

理研NMR施設利用報告書
(NMR 共用プラットフォーム トライアル利用)

本報告書については、印刷または必要な編集・加工を行った上で公開します。また、別途開催予定の成果報告会・シンポジウムや委託事業報告書作成時において、本報告書の内容についての資料作成または発表をお願いする場合があります。

課題番号：18-1200-005

利用機関名	東京工業大学	
実施部署名	理学院化学系	
実施責任者管理職名・氏名	准教授・大森 建	
利用課題名	合成ポリフェノール誘導体の構造解析	
背景と研究目的	複雑なオリゴマー構造を有する天然フラバンポリフェノールの合成に成功したが、その構造の詳細が不明であった。そこで、高分解能 NMR を利用し、分子の立体化学的情報を得るための研究を行った。	
利用装置	該当部分に○	<p>・ () 溶液 600MHz、() 溶液 700MHz、() 溶液 800MHz、(○) 溶液 900MHz、() 固体 700MHz、() 固体 900MHz</p> <p>利用日 1：平成 30 年 8 月 1 日</p> <p>利用日 2：平成 30 年 8 月 2 日</p> <p>利用日 3：平成 30 年 10 月 30 日</p>
本課題の概要	実施内容	<p>植物に多く含まれるフラバンオリゴマーは、古くから健康を促進する物質として知られるが、本化合物群には、さらなる生理作用や機能の発見が期待されている。ところが、これらの化合物を天然から高純度の化合物を得ることは容易でなく、この領域の科学の進展を妨げている。今回、我々は台湾アカマツの樹皮から単離された累積二重連結構造を有するフラバン 4 量体の全合成に成功した。しかし、報告されている論文に記載されている天然物の立体構造の証明には根拠が乏しかったため、独自にその立体構造を決定する必要があった。そこで、今回、当施設の高分解能 NMR の性能を活かし、合成中間体の立体構造と、各フラバン単位間の結合位置を特定するための実験を行った。その結果、差 ROE 測定を行うことにより、これまで不明確であった立体構造等を明らかにすることができた。また、クライオプローブを用いた ^{13}CNMR 測定を行い、十分な SN 比で合成品(最終生成物)のスペクトルを得ることができた。</p>

	今後の展開、課題	本研究には十分な成果が得られ、当初の目的を果たすことができた。今後は、さらに複雑な構造を有する天然物（フラバンポリフェノール）の合成を行い、必要に応じて高分解能 NMR を活用し緻密な構造解析を行いたい。
今後の利用形態の予定 (該当部分に○)	<p>(-)「成果占有利用」枠、「成果非占有利用」枠の申請を考えている。</p> <p>(-)NMR 共用プラットフォームの「最先端利用開発」枠の申請を考えている。</p> <p>(-)共同研究を考えている。</p> <p>具体的に： <div style="text-align: right;">※現在該当無し</div></p>	
施設利用における感想	職員の方々にきめ細かく対応していただいた。また技術的なサポートも充実していたため、当施設の利用に関しては大変満足であった。	
利用周辺環境に関する希望	特になし	
今後期待するその他のサービス (該当部分に○)	<p>(○) NMR 装置利用の教育（これまで NMR を使用した経験の無い方に対する教育も含む）</p> <p>(○) NMR 装置利用の技術的なサポート</p> <p>() その他</p> <p>具体的に：大学院生を対象にした講習会等の開催</p>	
その他	(上記の項目以外でご意見等お願いします。)	