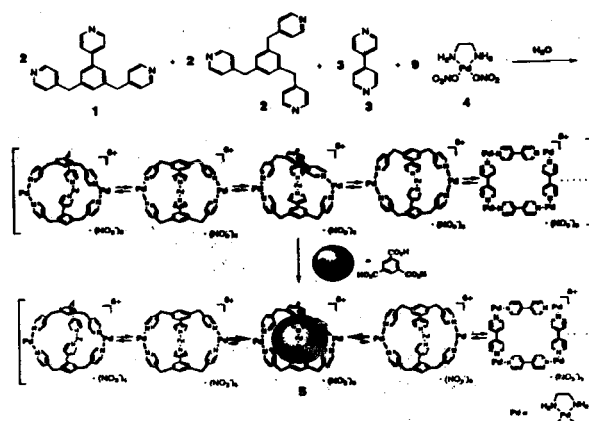


## 5. 差NMR手法による動的レセプターライブラリー検索—久保田 康生

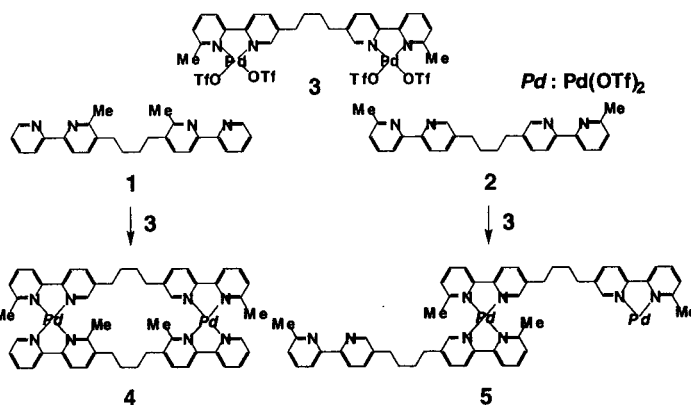
ゲストの形状に応じて、動的に変化するレセプター構造のライブラリーは、ホスト-ゲスト化学に新たな手法を提供するものと考えられる。複数のレセプター構造からなるライブラリーを扱う場合、その<sup>1</sup>H-NMRスペクトルは複雑なシグナルを与え解析・帰属することは困難である。そのためライブラリーから任意のレセプター構造を読み出すためには、新たな分析手法の開発が必要である。配位子1-3と二価Pd錯体4との反応では、熱力学平衡下にあるレセプター



ライブラリーを与える。このライブラリーに少量のゲストを添加すると、ゲストと強く相互作用するホスト成分のみ<sup>1</sup>H-NMRスペクトルに変化が生じた。この変化を差NMRで読み出すことにより、ライブラリーから最適レセプター構造5をスクリーニングすることに成功した。

## 6. 非対称ビピリジンの相補的なPd(II)錯体形成—富永 昌英

相補的な非共有結合相互作用は、分子レベルでの情報伝達・複製に重要な役割を果たしている。本研究では、配位結合による自己集合を利用することで、金属イオンを介したリガンド間の相補的な多点錯形成に成功した。2種類のビピリジンダイマー(1, 2)を設計し、その多点相補的錯形成を検討した。その結果、2·Pd<sub>2</sub>(OTf)<sub>4</sub>(3)と1からは、1:1錯体(4)が生成した。これに対し、3と2を錯形成させると、メチル基の立体障害により5:5錯体までのオリゴマー(5)がESI-MSより確認された。



## 7. コールドスプレーイオン化質量分析法 (CSI-MS) によるL-プロリン集合体の観測—國村美希

低温スプレー法 (coldspray ionization; CSI) では、不安定な非共有結合性相互作用を破壊することなくイオン化することが可能である。本手法を用いて天然アミノ酸の溶液構造の解析を行ったところ、L-プロリンはアルカリ金属 (Na, K, Rb, Cs) イオン存在下溶液中で、特定のクラスターを形成することを見出した。さらにMS/MSを用いて詳細な構造解析を行ったところ、金属イオンを中心に環状に会合し、その環状クラスターは3量体と4量体を最小ユニットとしたサブユニット構造であると推測することができた。

