

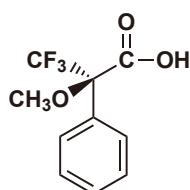
# NMRによる光学純度決定用試薬

## Mosher 酸と類縁体

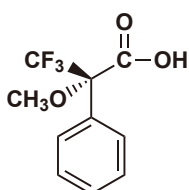
Mosher 酸 (MTPA) とアルコールもしくはアミンとの縮合で得られる MTPA エステル/アミドの <sup>1</sup>H-NMR を測定することで、光学純度を算出できます。さらに、(+ ) および (- )-MTPA エステル/アミドを合成し、両ジアステレオマーの化学シフト値の差を読み取ることで、化合物の絶対立体化学を決定することも報告されています<sup>1,2)</sup>。

引用文献 1) J. A. Dale, H. S. Mosher, *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 512. <https://doi.org/10.1021/ja00783a034>

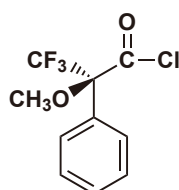
2) I. Ohtani, T. Kusumi, Y. Kashman, H. Kakisawa, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 4092. <https://doi.org/10.1021/ja00011a006>



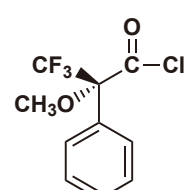
**(+)-MTPA**  
1g 19,400円 / 5g 70,400円  
[M0831]



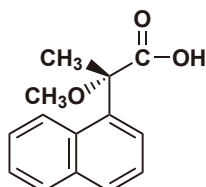
**(-)-MTPA**  
1g 20,900円 / 5g 73,000円  
[M0832]



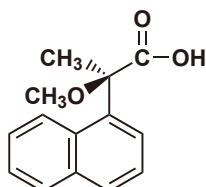
**(S)-(+)-MTPA-Cl**  
100mg 8,400円 / 1g 48,000円  
[M1103]  
(ca. 18% in Dichloromethane)  
5g 41,800円  
[M2214]



**(R)-(-)-MTPA-Cl**  
100mg 7,600円 / 1g 43,600円  
[M1104]  
(ca. 18% in Dichloromethane)  
5g 41,800円  
[M2215]



**(S)-(+)-MaNP Acid**  
100mg 25,300円  
[M1367]

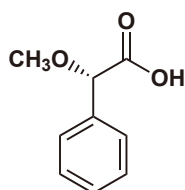


**(R)-(-)-MaNP Acid**  
100mg 32,300円  
[M1366]

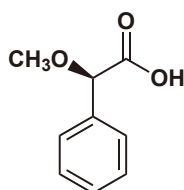
## マンデル酸誘導体

$\alpha$ -メトキシフェニル酢酸 (O-メチルマンデル酸) を利用した絶対立体化学の決定は Trost 法と呼ばれ、第二級アルコールと反応させて得たエステルから、化合物の絶対立体化学を決定することができます。

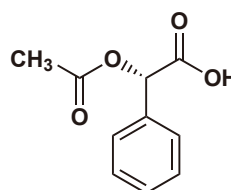
引用文献 B. M. Trost, J. P. Springer, *et al.*, *J. Org. Chem.* **1986**, *51*, 2370. <https://doi.org/10.1021/jo00362a036>



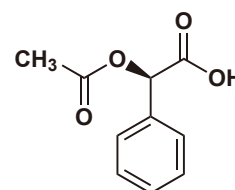
**(S)-(+)- $\alpha$ -Methoxyphenylacetic Acid**  
1g 4,900円 / 5g 15,800円  
[M0829]



**(R)-(-)- $\alpha$ -Methoxyphenylacetic Acid**  
100mg 1,800円 / 1g 4,300円 /  
5g 12,900円  
[M0830]

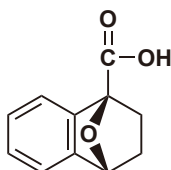


**(+)-O-Acetyl-L-mandelic Acid**  
5g 5,700円 / 25g 21,100円  
[A1454]

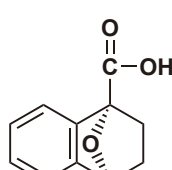


**(-)-O-Acetyl-D-mandelic Acid**  
5g 4,600円 / 25g 16,000円  
[A1453]

## THENA



**(S)-THENA**  
100mg 26,200円  
[T3002]



**(R)-THENA**  
100mg 25,200円  
[T3001]

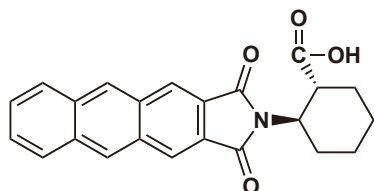
THENA と第二級アルコールから得られるエステルの NMR を測定することで、アルコールの絶対立体化学を決定できます。また、MTPA では対応できない化合物にも適用可能です。

引用文献 S. Sungsuwan, T. Thongpanchang, *et al.*, *Tetrahedron Lett.* **2010**, *51*, 4965. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2010.07.062>

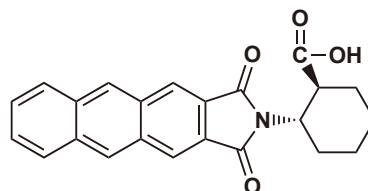
## 遠隔位不斉識別試薬

大類らが開発したカルボン酸と、遠隔位に不斉点をもつアルコールからエステルを合成し、NMRを測定することで、ジアステレオマーを識別できます<sup>1,2)</sup>。

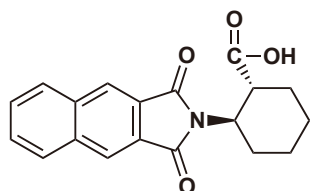
引用文献 1) H. Ohruai, H. Terashima, K. Imaizumi, K. Akasaka, *Proc. Jpn. Acad., Ser. B* **2002**, 78, 69. <https://doi.org/10.2183/pjab.78.69>  
2) K. Imaizumi, H. Terashima, K. Akasaka, H. Ohruai, *Anal. Sci.* **2003**, 19, 1243. <https://doi.org/10.2116/analsci.19.1243>



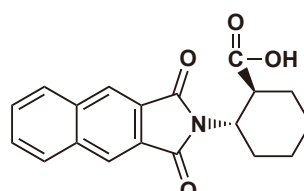
**(1R,2R)-2-(Anthracene-2,3-dicarboximido)-cyclohexanecarboxylic Acid**  
100mg 34,100円  
[A1657]



**(1S,2S)-2-(Anthracene-2,3-dicarboximido)-cyclohexanecarboxylic Acid**  
100mg 28,600円  
[A1658]



**(1R,2R)-2-(Naphthalene-2,3-dicarboximido)-cyclohexanecarboxylic Acid**  
100mg 25,500円  
[N0713]

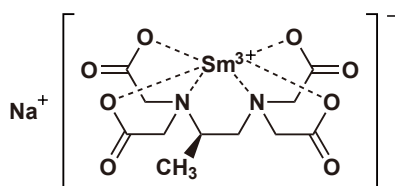


**(1S,2S)-2-(Naphthalene-2,3-dicarboximido)-cyclohexanecarboxylic Acid**  
100mg 25,500円  
[N0714]

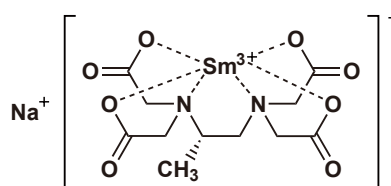
## 水溶性キラルシフト試薬

甲らが開発したサマリウム錯体はキラルシフト試薬として用いることができ、これらを添加してNMRを測定することで、 $\alpha$ -アミノ酸や $\alpha$ -ヒドロキシ酸の光学純度や絶対立体化学を決定することができます。

引用文献 K. Kabuto, Y. Sasaki, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1987**, 670. <https://doi.org/10.1039/C39870000670>



**Sodium [(R)-1,2-Diaminopropane-N,N,N',N'-tetraacetato]samarate(III)**  
100mg 45,000円  
[S0473]



**Sodium [(S)-1,2-Diaminopropane-N,N,N',N'-tetraacetato]samarate(III)**  
100mg 42,600円  
[S0474]

上記以外の光学純度決定用試薬についても取り揃えています。各製品の詳細はTCIのウェブサイトでも ▶▶▶

## 東京化成工業株式会社

### 試薬製品について

■本社営業部 〒103-0001 東京都中央区日本橋小伝馬町 16-12 T-PLUS 日本橋小伝馬町8階  
Tel: 03-3668-0489 Fax: 03-3668-0520 E-mail: Sales-JP@TCIchemicals.com

■大阪営業部 〒541-0041 大阪府大阪市中央区北浜1-1-21 第2中井ビル1階  
Tel: 06-6228-1155 Fax: 06-6228-1158 E-mail: osaka-s@TCIchemicals.com

### スケールアップ、受託サービス(合成・開発・製造)について

□化成品営業部 〒103-0001 東京都中央区日本橋小伝馬町 16-12 T-PLUS 日本橋小伝馬町8階  
Tel: 03-5651-5171 Fax: 03-5640-8021 E-mail: finechemicals@TCIchemicals.com

### 弊社製品取扱店

本誌掲載の化学品は試験・研究用のみ使用するものです。化学知識のある専門家以外の方のご使用はお避けください。品目や製品情報等、掲載内容の変更を予告なく行う場合があります。内容の一部または全部の無断転載・複製はご遠慮ください。