

化学合成と酵素合成の融合によるスピロケタール類の網羅的短工程合成と結晶スポンジ法による構造決定

Short and Unified Chemo-Enzymatic Synthesis of Spiroketal, and the Structural Elucidation by the Crystalline Sponge Method

ユーザー氏名: 服部 弘, ウォルフガング クローティル / Hattori Hiromu, Wolfgang Kroutil
(グラーツ大学 / University of Graz)

実施機関担当者: 三橋 隆章, 藤田 誠 / Mitsuhashi Takaaki, Fujita Makoto
(分子科学研究所 / Institute for Molecular Science)

KEY WORDS Crystalline Sponge Method, Chemo-Enzymatic Synthesis, Spiroketal

概要 | Overview

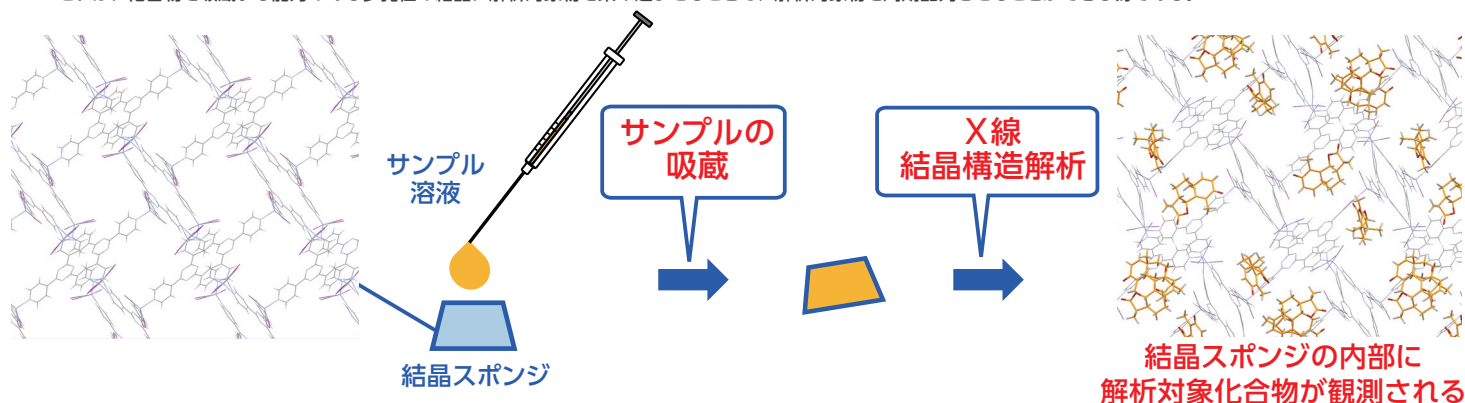
スピロケタールは、生理活性化合物にしばしば見られる重要な化学構造である為、その効率的な合成法の開発が求められている。本研究では、酵素反応と化学合成を巧みに組み合わせることで、スピロケタール類を網羅的かつ簡便に合成可能な手法を開発した。合成したスピロケタール類の構造決定がボトルネックとなったものの、ナノテクノロジープラットフォームが提供する構造決定技術「結晶スポンジ法」を用いることで迅速に解決した。

A spiroketal is an important chemical structure, which appears in structures of many bioactive compounds. Therefore, an efficient method for the synthesis of the spiroketals is required. Herein, we developed a short and unified chemo-enzymatic synthesis of the spiroketals. Even though structure elucidation of the obtained spiroketals was not straightforward, it was accomplished by using the "crystalline sponge method", with the support of Nanotechnology Platform Program.

結晶スポンジ法とは

What is the Crystalline Sponge Method?

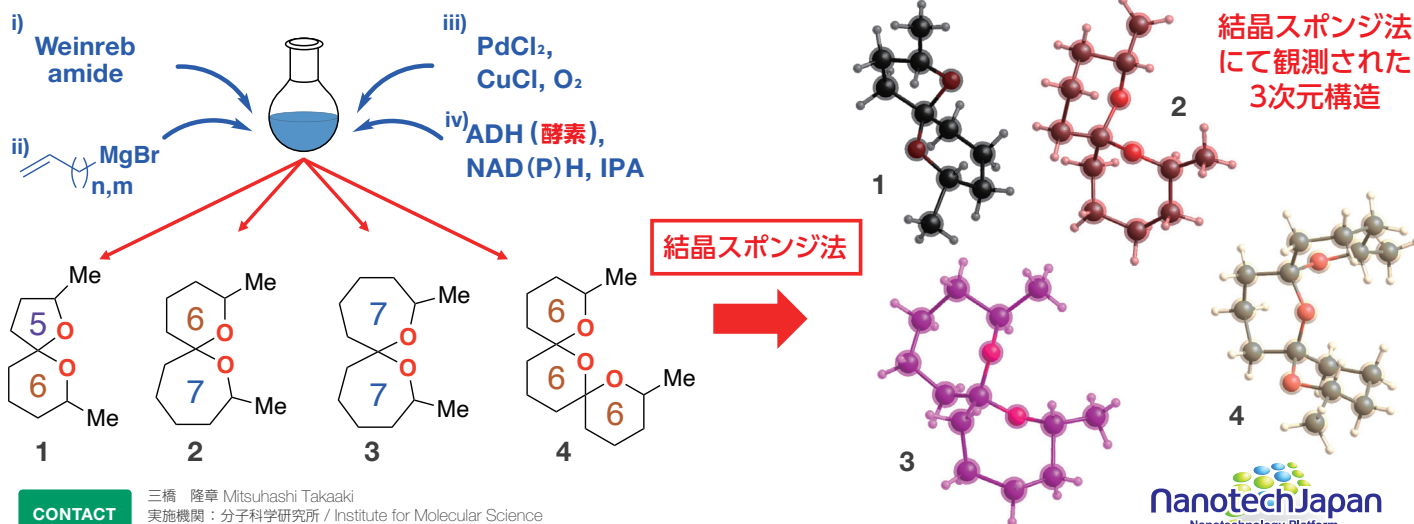
X線結晶構造解析は、最も信頼のおける構造解析手法の一つとして知られているものの、解析対象化合物の結晶化が必要という欠点が存在する。化合物が結晶化する条件を探索する為に、多くの時間と労力が費やされることもしばしばである。一方、結晶スポンジ法では、この結晶化のプロセスを経ずにX線結晶構造解析を行うことができる。これは、化合物を吸蔵する能力のある多孔性の結晶に解析対象物を染み込ませることで、解析対象物を周期配列させることができる為である。



スピロケタール類の網羅的・短工程合成

Short and Unified Synthesis of Spiroketal

化学合成のプロセスの一部に酵素反応を取り入れることで、スピロケタール類を短工程にて合成することができる手法を開発した。合成の短工程化により、合成のプロセス中に生じる廃棄物を低減することができる為、コスト削減や環境負荷低減につながる事が期待される。更に、今回開発した手法により、新規化合物となるものも含め様々なスピロケタール類の合成に成功したが、これらの構造決定は「結晶スポンジ法」を用いることにより達成した。



CONTACT

三橋 隆章 Mitsuhashi Takaaki
実施機関: 分子科学研究所 / Institute for Molecular Science
URL: <https://www.ims.ac.jp/>

NanotechJapan
Nanotechnology Platform