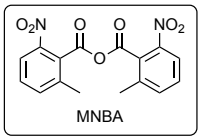
迅速脱水縮合剤 MNBA を用いたエステル化反応に与える水の影響

（東理大理）村田 貴嗣・○高林 奈央・椎名 勇

The Effect of Water in the Esterification Mediated by MNBA, Highly Efficient Dehydration Condensation Reagent (*Faculty of Science, Tokyo University of Science*) Takatsugu Murata, ○Nao Takabayashi, Isamu Shiina

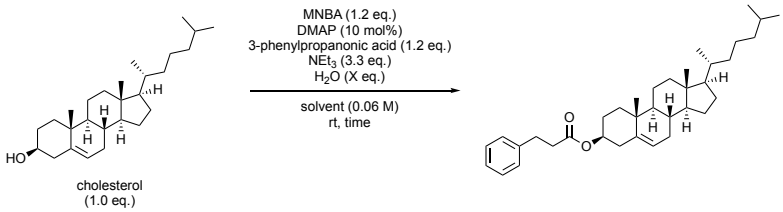
As a highly efficient dehydration condensation reagent, 2-methyl-6-nitrobenzoic anhydride, MNBA has been utilized for the ester bond formation and the amide bond formation. Notably, the number of reports on utilization to derivatization in microscale analysis has remarkably increased. The water content of substances in microscale analysis should be considered. Therefore, we have investigated the effect of water in the esterification mediated by MNBA.
Keywords : Dehydration Condensation; Esterification; MNBA; Microscale Analysis



2-メチル-6-ニトロ安息香酸無水物[1)]、すなわち MNBA はこれまでに迅速脱水縮合剤として多くのエステル結合形成、アミド結合形成反応に用いられてきた。近年、生体内分子の微量分析を実施する際の汎用縮合剤としても広く用いられ、利用例が著しく増加している[2,3)]。一方で、水が共存した場合に、この反応がどのように阻害されるかについては今まで調査が行われてこなかった。そこで我々は、MNBA を用いたエステル化反応に与える水の影響について調査することとした。

本研究では、基質に生合成産物であるコレステロールを選択し、縮合剤に MNBA を用いて、触媒量の DMAP の存在下で 3-フェニルプロパン酸とのエステル化反応を行った[1)]。まず、反応次数を調査するために各反応時間で反応を実施した。その後、各試薬が反応に何次に相関するかを調査した。続いて、あらかじめ水を溶かし込んだ溶媒を用いて反応を実施し、反応に与える水の影響の調査に取り組んだ。

今回我々は、MNBA を用いたエステル化反応が混合酸無水物を経由していることを実験的に示した。また、水が共存した場合のエステル化反応に与える水の影響の調査を行うことで、反応に水がどのように作用しているかを明らかにした。さらに、これらの結果を踏まえ、微量分析に採用可能な反応条件として、含水条件でも無水条件と同等の収率が与えられる条件を調査した。本講演ではこれらの詳細を報告する。



1) I. Shiina, R. Ibuka, M. Kubota, *Chem. Lett.*, **2002**, *31*, 286–287.
2) K. Yamashita, M. Takahashi, S. Tsukamoto, M. Numazawa, M. Okuyama, S. Honma, *J. Chromatogr. A.*, **2007**, *1173*, 120–128.
3) Z. Hubler, D. J. Adams, *et al.*, *Nature*, **2018**, *560*, 372–376.

© The Chemical Society of Japan