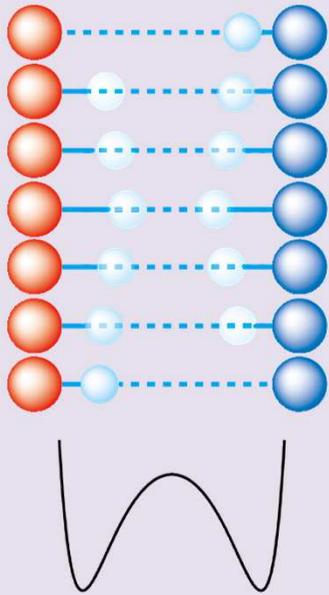


# 水素結合におけるH/D同位体効果の研究



水素結合のイメージ

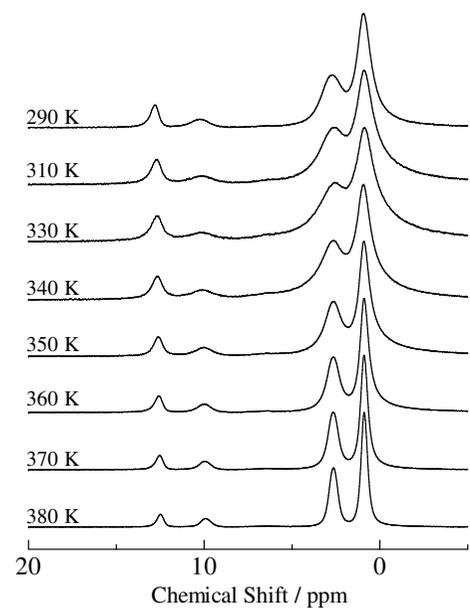
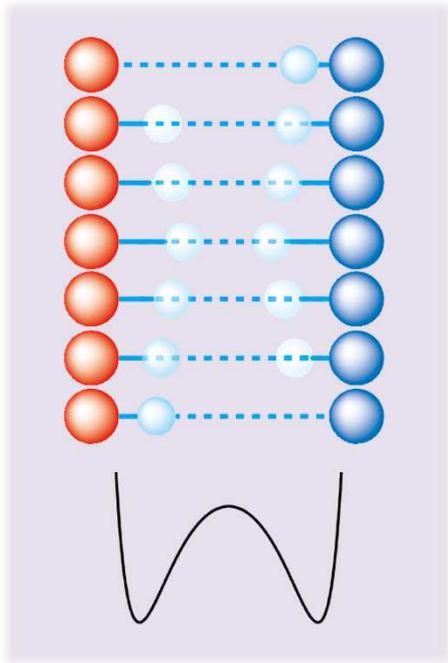
水素結合は、物質科学だけでなく生命科学でも重要な結合です。質量数1の**水素 (H)** を質量数2の**重水素 (D)** に置換すると、質量が2倍になるので、**H/D同位体効果**が観測されます。

H/D同位体効果は、相転移温度のシフトや結晶構造の違いなどで見られることもあります。

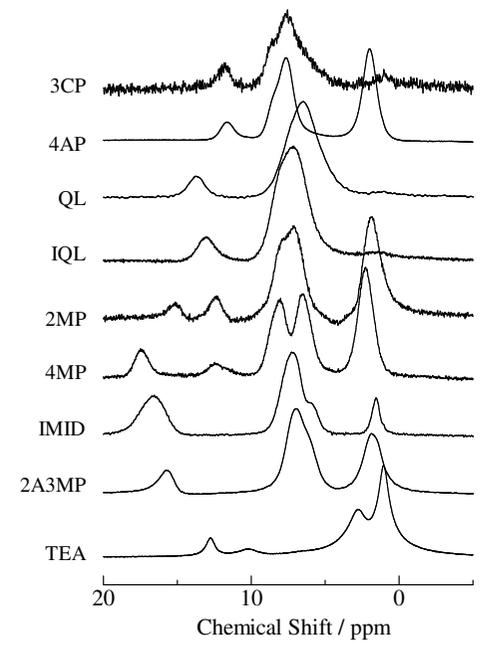
本研究室では、 **$^1\text{H}$  MAS NMR測定**を行い、**H/D同位体効果が分子の電子状態にどのような影響を及ぼすのか**研究しています。

## これまでの結果

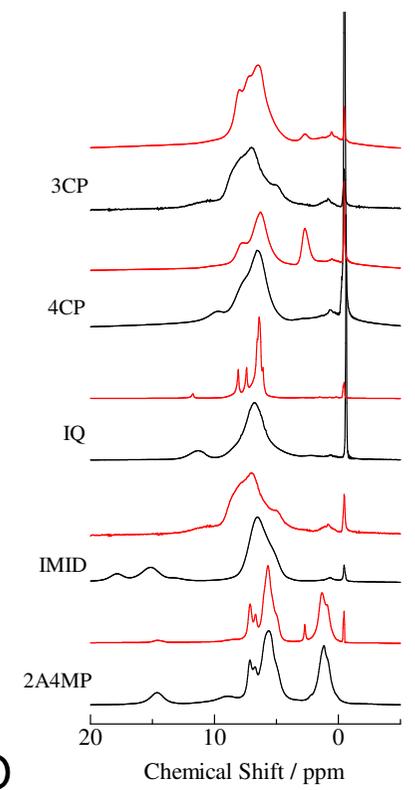
1. 水素結合を形成している水素原子の位置は、酸（赤丸）と塩基（青丸）の $\text{p}K_a$  値の差  $\Delta \text{p}K_a$  に依存していることをNMR測定で明らかにしました。
2. H/D同位体効果は、 $\Delta \text{p}K_a$  が0付近で観測されることを明らかにしました。
3. D置換すると、水素結合が弱くなる傾向が得られています。



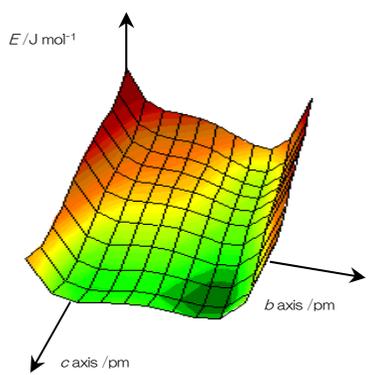
水素の信号強度が温度変化  
→ 平衡定数分かる



pKaの値により水素の  
信号がシフトしている



H/D同位体効果  
赤：D体  
黒：H体



水素の位置に関する  
ポテンシャル計算

他の分光法では得ることが難しい情報を固体NMR測定で得られる

## 水素結合におけるH/D同位体効果の研究に関する論文

H. Honda, *Molecules*, **2013**, *18*, 4786.

R. Nakano, H. Honda, S. Ishimaru, and S. Noro, *Hyperfine Interactions*, **2013**, *222*, 43.

H. Honda, S. Kyo, Y. Akaho, S. Takamizawa, and H. Terao, *Hyperfine Interactions*, **2011**, *197*, 275.

R. Nakano, H. Honda, T. Kimura, S. Kyo, S. Ishimaru, R. Miyake, E. Nakata, S. Takamizawa, S. Noro, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2010**, *83*, 1019.

R. Nakano, H. Honda, T. Kimura, E. Nakata, S. Takamizawa, S. Noro, S. Ishimaru, *Hyperfine Interactions*, **2008**, *181*, 59.

H. Honda, A. Sasane, K. Miyagi, A. Ishikawa, and Y. Mori, *Z. Naturforsch.*, **1994**, *49a*, 209.

A. Sasane, T. Matsuda, H. Honda, and Y. Mori, *Z. Naturforsch.*, **1992**, *47a*, 129.