



Kajtár Márton-Emlékiülés

2013

## **Enantiomer önfelismerés az NMR spektroszkópiában, avagy: a molekulák is "társas lények"**

Szántay Csaba

*Richter Gedeon Nyrt.*

Egy általános paradigma szerint NMR spektroszkópiával enantiomereket csak valamilyen királis segédanyag jelenlétében tudunk megkülönböztetni. Ez a paradigma a mai napig uralkodik, annak ellenére, hogy Uskokovic és munkatársai már 1969-ben rámutattak arra, hogy az enantiomerek segédanyag nélkül is szétválhatnak a molekulák között kialakuló gyenge tranzien kölcshatások következtében. Mivel a homo-dimer és hetero-dimer asszociátumok diasztereomer viszonyban vannak, az enantiomerek inherens módon különböző NMR spektrumot adnak nem-racém rendszerekben. Ez elvben lehetőséget ad az enantiomer felesleg közvetlen és kényelmes meghatározására királis segédanyag felhasználása nélkül. A jelenségért felelős intermolekuláris kölcshatások általában gyengék, így a két enantiomer között mért kémiai eltolódás különbségek többnyire mérhetetlenül kicsik, vagy legalább is annak hisszük őket. Az előadásban bemutatom az enantiomer önfelismerés jelenségének intuitív magyarázatát (és bizonyos fokig a "pszichológiáját") egy szerkezetkutatói szempontból is izgalmas probléma felmerülése kapcsán.