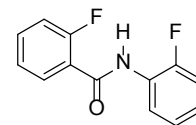


ROYALプローブ™ HFXを用いた¹⁴Nデカップリング ¹H-¹⁹F HOESY

関連製品: 核磁気共鳴装置(NM)

含フッ素、及び含窒素有機化合物は、医薬や材料科学などの様々な分野で用いられています。このような化合物の多くは分子のコンホメーションや分子間に働く相互作用により、特異な機能を持つことが知られています。そのため、分子内/分子間に働く弱い相互作用の解析が重要となります。ここでは、フッ素化ベンズアニリド(1)をモデル化合物とし、¹⁴Nデカップリング条件下での¹H-¹⁹F HOESY(異種核NOE)測定をご紹介します。



フッ素化ベンズアニリド(1)

¹⁴Nデカップリング¹H-¹⁹F HOESY(異種核NOE)の測定

¹⁴N核に結合した¹H核は信号がブロード化し、解析が困難となる場合が多々あります。¹⁴Nデカップリングのあり、なしの条件で測定した一次元¹H-¹⁹F HOESYのスペクトルを図1に示します。上段がF5、下段がF6を選択励起したスペクトルです。¹⁴Nデカップリング条件下で測定したスペクトルは、アミド¹Hの信号強度が約2倍に向上しています。NOE測定は一般に感度が低いため、¹⁴N核に結合した¹H核との相関を観測する場合に、¹⁴Nデカップリングは有効な手段となり得ます。¹⁴Nデカップリング条件下での二次元HOESY測定も可能です(図2)。

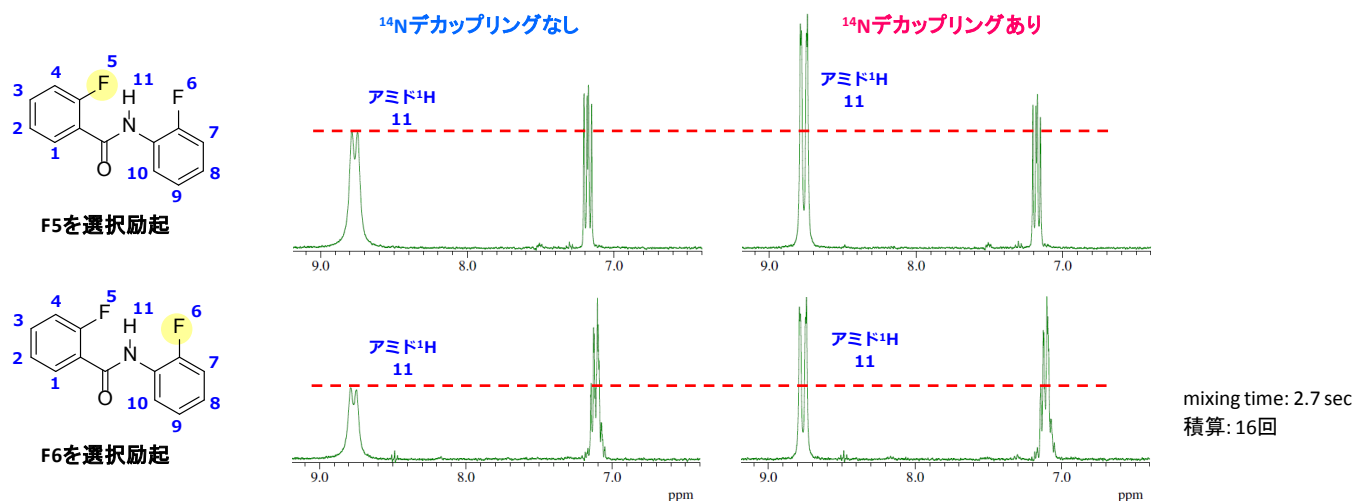


図1. 1の¹⁴Nデカップリングありとなしでの一次元¹H-¹⁹F HOESYスペクトルにおけるアミド¹Hの信号強度の比較 (上段: F5を選択励起 下段: F6を選択励起)

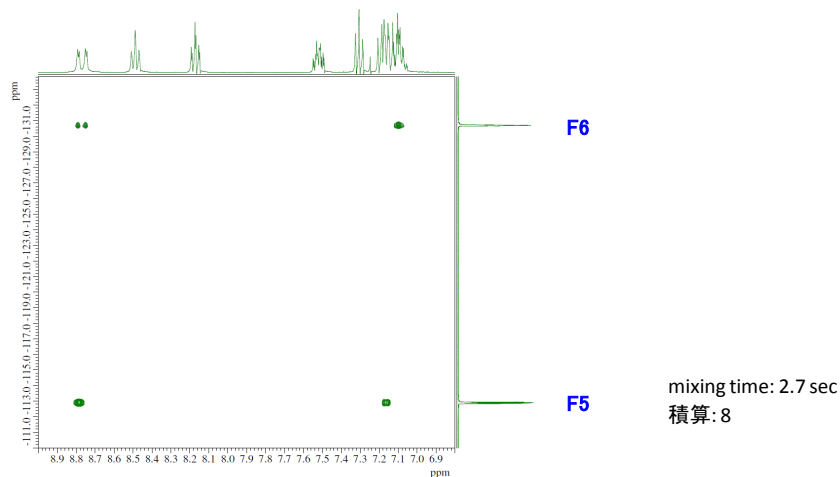


図2. 1の¹⁴Nデカップリング二次元¹H-¹⁹F HOESYスペクトル

試料: 36 mg フッ素化ベンズアニリド/ CDCl_3

使用装置: JNM-ECZ400S、ROYALプローブ™ HFX(¹⁴N核測定対応プローブ)

参考文献

G. N. Manjunatha Reddy, M. V. Vasantha Kumar, T. N. Guru Row, N. Suryaprakash, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 13232-13237 (2010).
L. E. Combettes, P. Clausen-Thue, M. A. King, B. Odell, A. L. Thompson, V. Gouverneur, T. D. W. Claridge, *Chem. Eur. J.*, **18**, 13133-13141 (2012).

Copyright © 2019 JEOL Ltd.

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせ下さい。

