

## フッ素含有化合物へのアプリケーション例

関連製品: 核磁気共鳴装置(NM)

ROYALプローブ™ HFXはRFチャンネル数の拡張されていない汎用機においても $^1\text{H}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{13}\text{C}$ (X核)の同時照射が可能で、多核種も高感度に測定できるマルチプローブです。以下にJNM-ECZ400SとROYALプローブ™ HFXの組み合わせで使用できるフッ素含有化合物に対して有効な測定例を紹介します。

### 測定1: $^{13}\text{C}$ , $^1\text{H}$ , $^{19}\text{F}$ の三重共鳴測定例

$^{19}\text{F}$ を含む化合物の $^{13}\text{C}$ スペクトルは $J_{\text{CF}}$ の大きなカップリングにより複雑に分裂し、信号強度も低下するため解析が困難になります。このような化合物では図1に示す通り $^{13}\text{C}$ 測定時に $^1\text{H}$ と $^{19}\text{F}$ 両方をデカップリングすることでスペクトルを単純化、高感度化し解析が容易になります。

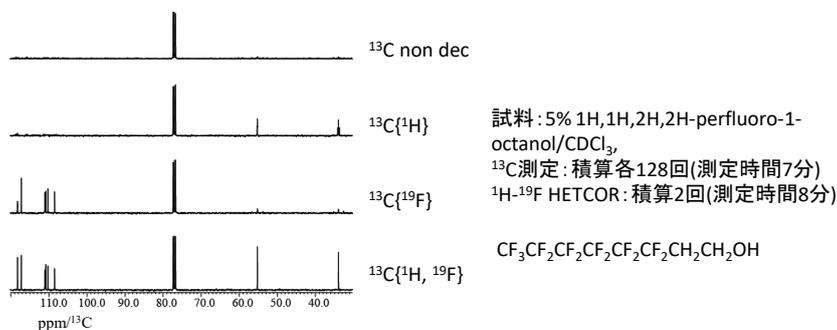


図1:  $^{13}\text{C}$ スペクトルの比較

### 測定2: $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$ 異種核COSY測定

$^{19}\text{F}$ を含む化合物では $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY,  $^{19}\text{F}$ - $^{19}\text{F}$  COSYと合わせて $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$ 異種核COSY(図2)も構造解析に有効な測定手法になります。

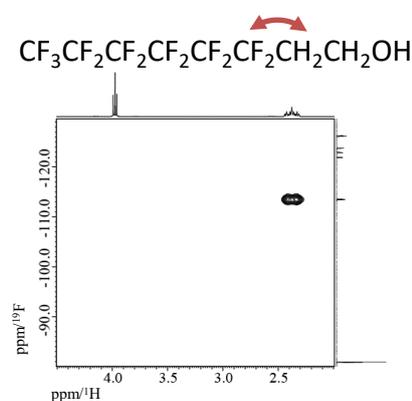


図2:  $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$  異種核COSY

### 測定3: $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$ HOESY

Trifluridineは deoxyuridineのトリフルオロメチル誘導体であり抗悪性腫瘍剤ならびに抗(ヘルペス)ウイルス剤として利用されます。このようなヘテロ環にトリフルオロメチル基を含む化合物は医薬品では多く存在します。Trifluridineの $^1\text{H}$ と $^{19}\text{F}$ は化学結合では4結合離れているため、 $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$ のカップリングを確認することは一般的に難しい構造です。このような化合物に対して $^{19}\text{F}$ と空間的に近い $^1\text{H}$ のみを選択的に検出する手法として一次元HOESY法(図3)が有効です。二次元のHOESYで解析を行うと数時間の測定時間が必要ですが、一次元で測定することで数分で簡便に解析できます。

図4の結果より $^{19}\text{F}$ と空間的に近い $^1\text{H}$ が8.65ppmの信号であるとわかります。

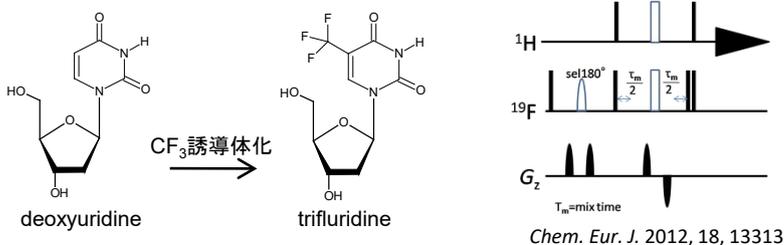


図3: 一次元  $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$  HOESY パルスシーケンス

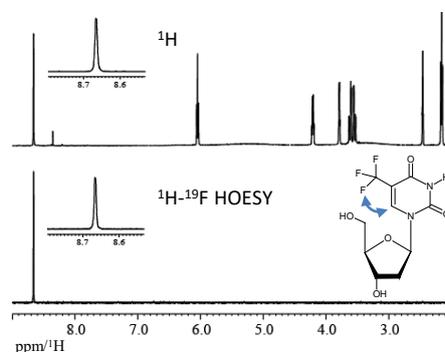


図4: 一次元  $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$  HOESY

試料: 100mM Trifluridine/DMSO- $d_6$   
 上段:  $^1\text{H}$  積算8回(測定時間1分),  
 下段: HOESY 積算16回(測定時間2分), 混合時間=1s

Copyright © 2020 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入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。

