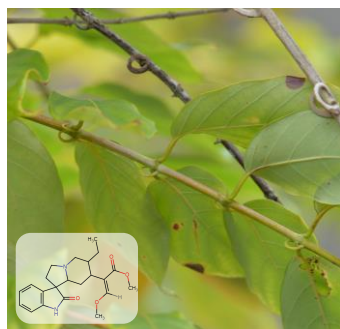


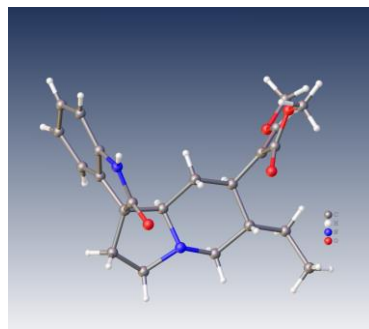
# アルカロイド類有機化合物の分子構造解析

関連製品: 電子回折装置

## XtaLAB Synergy-ED および日本電子装置によるアルカロイド類有機化合物の分析



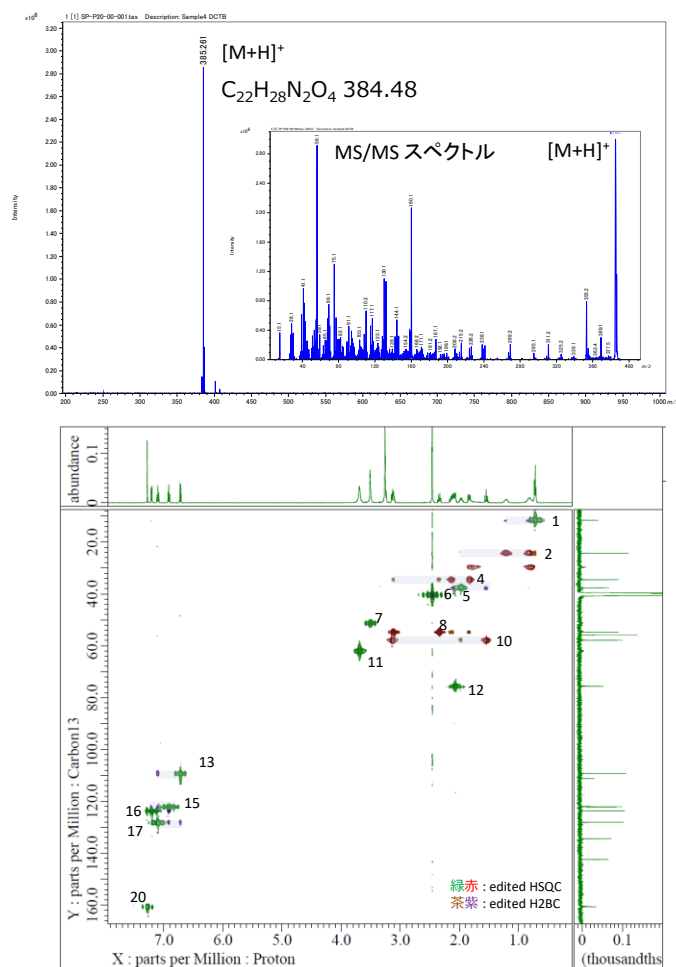
アカネ科カギカズラの鉤  
Rhynchophyllineの化学構造式



Rhynchophylline微小結晶の  
XtaLAB Synergy-ED電子回折構造解析結果

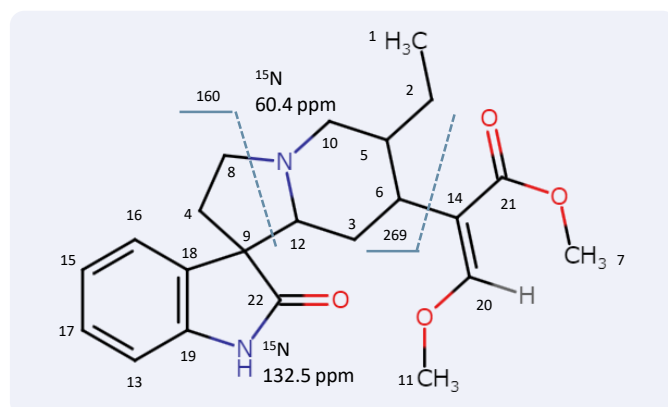
アルカロイドは、窒素を含む主に塩基性の有機化合物です。植物由来の化合物が多く、薬用植物の主成分として利用されているものもあります。アルカロイドの生合成は多岐にわたり、複雑な分子立体構造の化合物を形成します。XtaLAB Synergy-EDは、医薬品試験試薬などの粉末試料をそのままの状態電子回折構造解析を行うことが可能です。さらに日本電子の質量分析計 (MS) および核磁気共鳴装置 (NMR) による精密な化学構造解析と組み合わせることで、サブミクロン結晶のより最良な分子構造解析が可能です。

## Rhynchophylline分子の化学構造分析



アルカロイド類の分子化学構造は、質量分析計SpiralTOF™-plus 2.0による精密質量測定や、核磁気共鳴装置ECZ Luminous™シリーズによる分子化学構造の分析から詳細な解析が可能です。

左図は、RhynchophyllineのMSおよびNMR測定結果です。精密質量の分析結果から、Rhynchophylline分子の組成式を調べることができます。また二次元NMR測定から、<sup>1</sup>Hおよび<sup>13</sup>C原子核や<sup>1</sup>Hおよび<sup>15</sup>N原子核の繋がりを分析することで、アルカロイド化合物の部分構造を解析することが可能です。これらを組み合わせることで、全体の分子構造を推定することができます。以下は、推定されたRhynchophylline分子の構造です。

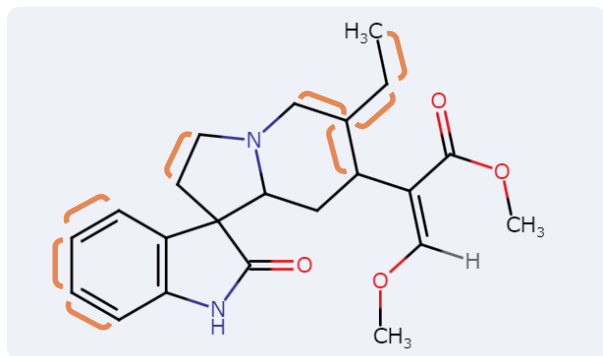


MS・NMR分析結果より推定されたRhynchophylline分子の化学構造

左上: JMS-S3000 SpiralTOF™-plus 2.0による Rhynchophyllineの精密質量分析結果およびMS/MSスペクトル

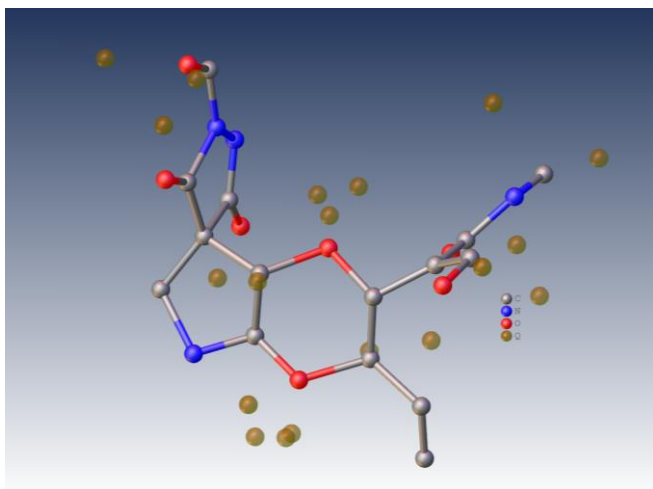
左下: JNM-ECZL 500RIによるRhynchophyllineのEdited HSQCおよびEdited H2BC NMRスペクトル

## Rhynchophylline 微結晶電子回折データの構造精密化

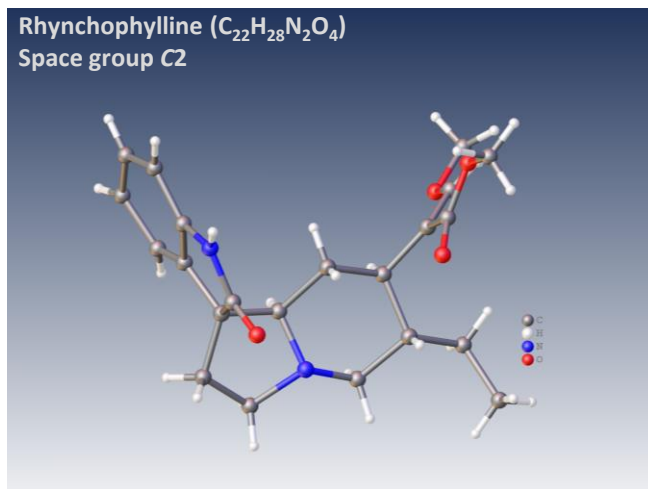


JNM-ECZL 500RによるRhynchophyllineのEdited H2BC  
NMRスペクトルから確認された2結合離れたCHどうしの繋がり

XtaLAB Synergy-EDでは、Rhynchophyllineを微小結晶の状態ですべて単結晶電子回折構造解析を行うことが可能です。アルカロイド類の化合物は、水素、炭素、窒素および酸素などの元素を含みます。電子回折による分子構造解析では、電子回折データから得られた電子密度分布を基に解析を行います。原子番号の近い元素から構成される分子の場合、分子によってはそれぞれの元素の違いや水素の数を推定することが難しい場合があります。電子回折測定から得られた電子密度分布による初期構造は、MSおよびNMRから得られた化学構造情報を用いて最適化することが可能です。以下の右図は、MS・NMR分析結果により精密化されたRhynchophylline微小結晶の電子回折構造解析結果です。



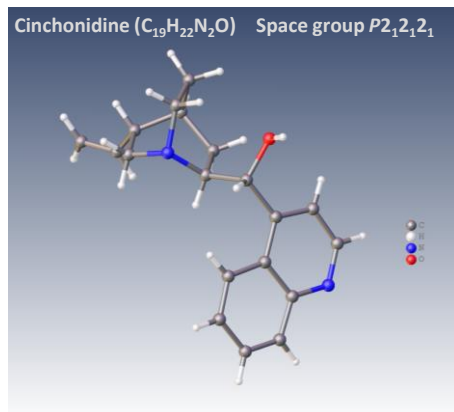
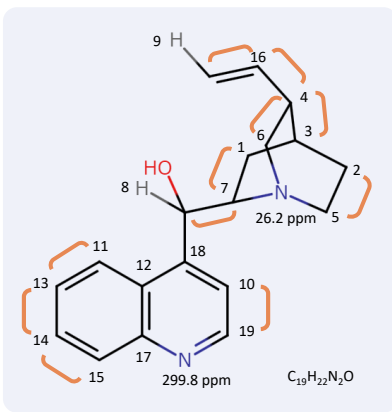
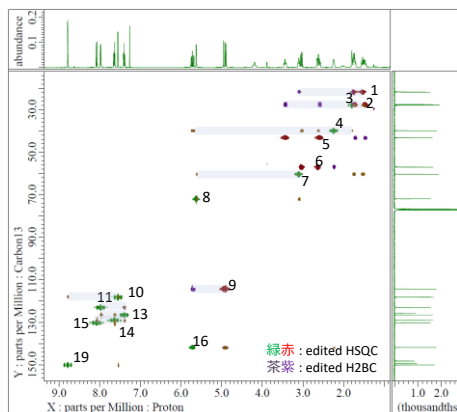
XtaLAB Synergy-EDによるRhynchophylline微小粒子の電子回折結果  
電子密度分布より得られた初期構造



XtaLAB Synergy-EDによるRhynchophylline微小粒子の電子回折結果  
MS・NMR分析結果より精密化された分子立体構造

## その他アルカロイド類有機化合物の分子構造解析例

他のアルカロイド化合物も、Rhynchophyllineと同様に解析することが可能です。以下は、MS・NMR分析結果より精密化されたCinchonidine微小結晶の電子回折構造解析結果です。NMRで確認できた<sup>1</sup>Hおよび<sup>13</sup>C原子核や<sup>1</sup>Hおよび<sup>15</sup>N原子核の繋がりから精密化されました。



左 : JNM-ECZL 500R によるCinchonidineのEdited HSQCおよびEdited H2BC NMRスペクトル  
中央 : JNM-ECZL 500R によるCinchonidineのEdited H2BC NMRスペクトルから確認された2結合離れたCHどうしの繋がり  
右 : XtaLAB Synergy-ED によるCinchonidine微小粒子の電子回折構造解析結果

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ください。 Copyright © 2023 JEOL Ltd.

