

【技術資料】4 結合以上離れた H-C 結合相関による有機化合物の構造解析 ～2 次元 NMR ^1H - ^{13}C Long range-HSQMBC 測定～

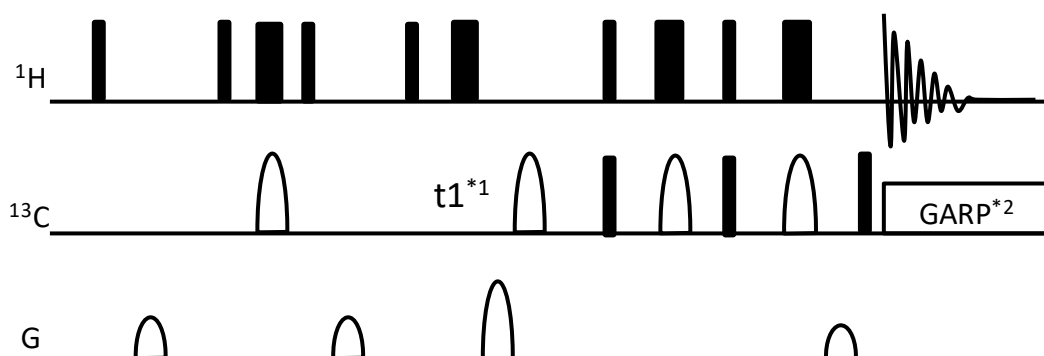
概要

2 次元 NMR 測定手法の 1 つである ^1H - ^{13}C LR-HSQMBC 測定では、4～5 結合離れた ^1H - ^{13}C 間の相関を解析可能です。2 次元 ^1H - ^{13}C HMBC 測定を補完し、より確度の高い分子構造解析結果をご提供可能です。天然物を含む有機化合物全般の分子構造解析に威力を発揮します。

分析方法・分析装置

- ・分析方法：2 次元 ^1H - ^{13}C LR-HSQMBC¹⁾
- ・分析装置：700MHz NMR、500MHz NMR

以下にパルスシーケンスダイアグラムを示します。



【図 1】2 次元 ^1H - ^{13}C LR-HSQMBC のパルスシーケンス

*1 ^{13}C 核の展開時間

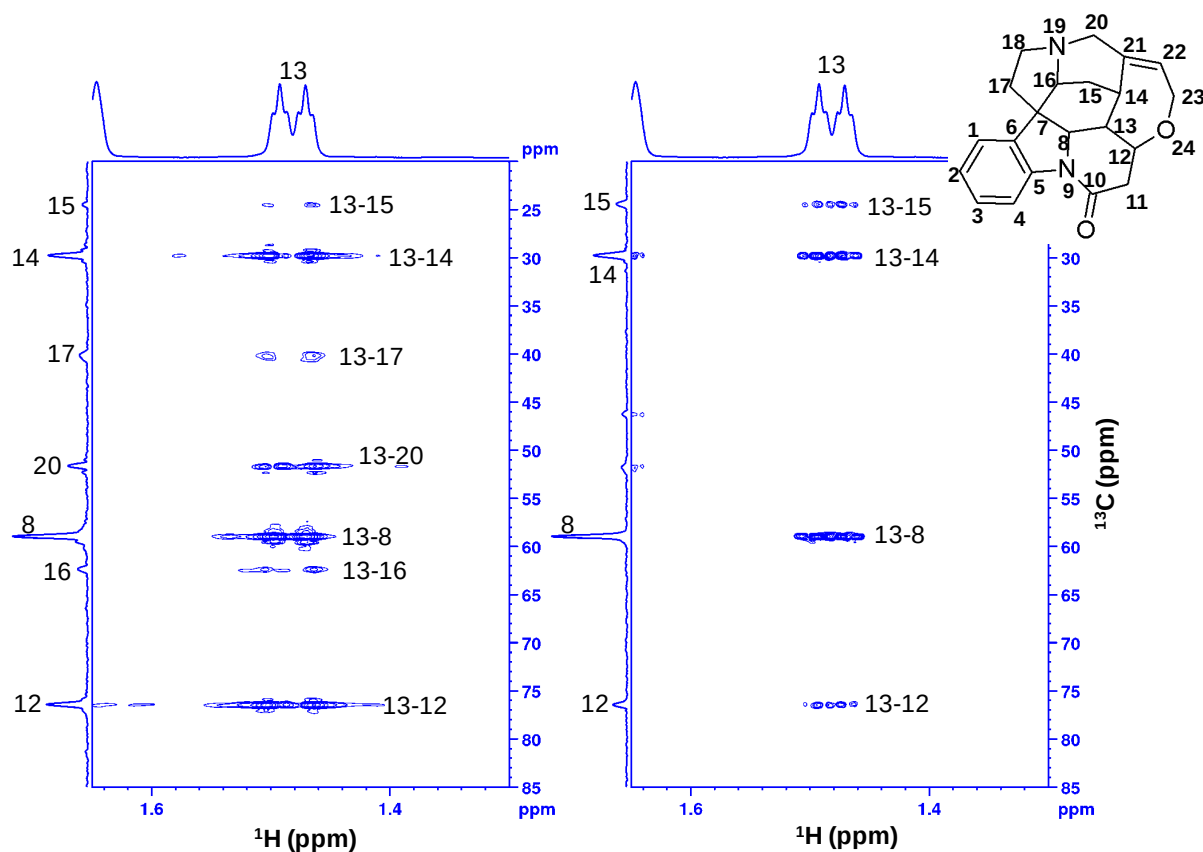
*2 ^{13}C 核のデカップリングシーケンス

試料

ストリキニーネ

結果

ストリキニーネの 2 次元 ^1H - ^{13}C HSQMBC 測定結果(図 2 左)と 2 次元 ^1H - ^{13}C HMBC 測定結果(図 2 右)を示します。HSQMBC スペクトルでは同一条件で測定した HMBC スペクトルに対し、4～5 結合(^4J 、 ^5J) 離れた ^1H - ^{13}C 間の情報を観測でき、分子構造解析に有用な情報を得ることができました。



【図 2】 ストリキニーネの 2 次元 ^1H - ^{13}C LR-HSQMBC スペクトルと ^1H - ^{13}C HMBC スペクトルの比較
(左: ^1H - ^{13}C HSQMBC、右: ^1H - ^{13}C HMBC、構造と帰属を右上に表示)

まとめ

2 次元 ^1H - ^{13}C HSQMBC 測定では、4~5 結合離れた長距離の ^1H - ^{13}C 結合状態を知ることができ、確度の高い分子構造解析結果をご提供可能です。4 級炭素の多い天然物等や有機 EL 材料等、有機化合物全般の分子構造解析に有用です。

引用文献

- Williamson, R.T. et al *J. Org. Chem.* **79**, 3887–3894 (2014).

適用分野：NMR、分子構造解析

キーワード：糖鎖、天然物、構造異性体、分子構造解析、医薬品、化粧品、農薬