

^{13}C デカップリングによる複数のピーク溶媒抑制

- 2019年6月25日に投稿(Andrew)
- 以前の投稿では、SpinsolveULTRA ベンチトップ NMR 分光計で複数のピーク溶媒抑制を使用する方法を示しました。前回のシーケンスは3つの NMR 溶媒ピークを効果的に抑制しましたが、測定に干渉する可能性のある溶媒の炭素原子は周波数が異なり、対象の化合物と同様の強度を持っていたため、減らすことができませんでした。Spinsolve ULTRA 炭素分析では ^{13}C のピークを抑えることができます。炭素デカップリングによるピーク溶媒抑制の事例を以下の図1に示します。炭素原子が抑制されると、紫色の点でラベル付けされたピークがどのように表示されるかに注目してください。

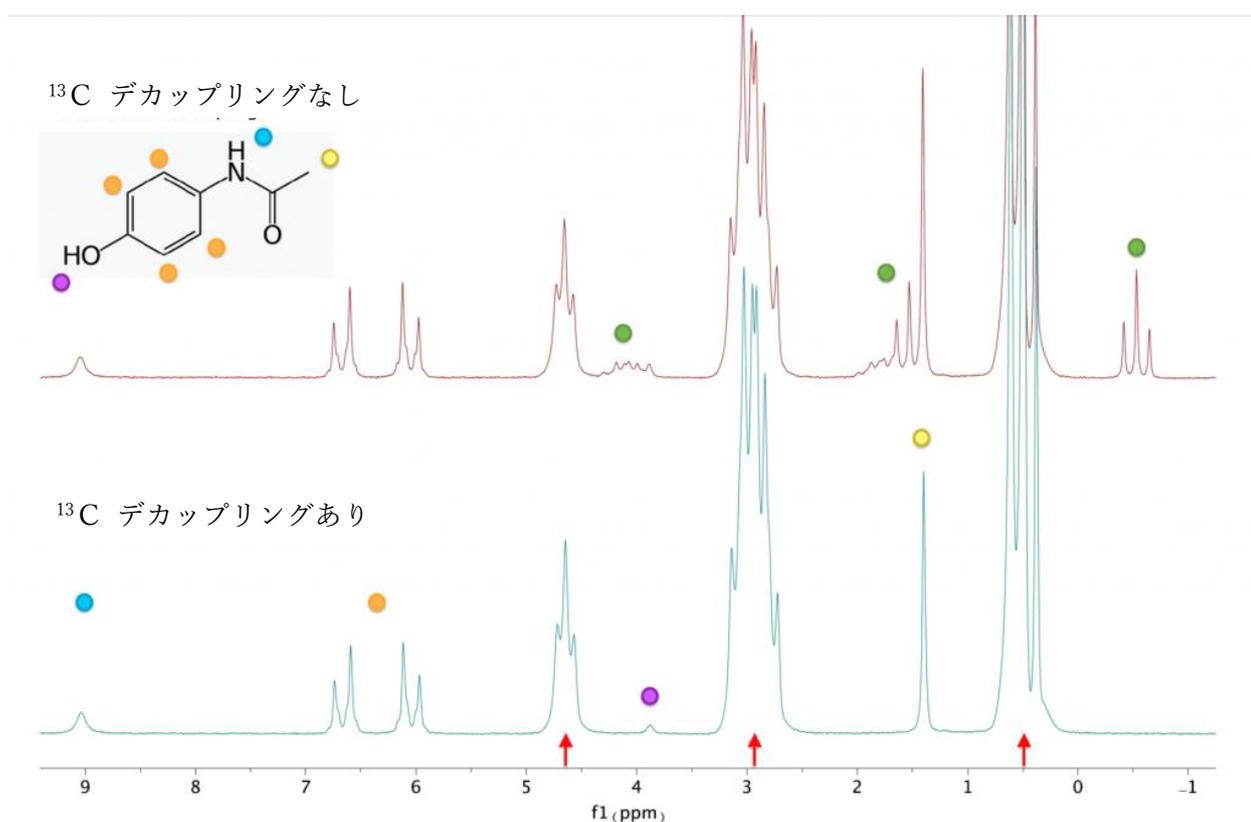


図1: 上の画像は、Spinsolve 60 ULTRA カーボン(上、赤)の3つの赤い矢印で示される周波数で、複数のピーク溶媒抑制で取得された通常のプロトン化エタノールに溶

解した 170mM パラセタモールの 1D プロトンスペクトルを示しています。緑の点は、スペクトルの溶媒ピークの炭素原子を識別します。2 番目のスペクトル(下、青)は、複数のピーク溶媒抑制で取得された同じサンプルを示していますが、炭素デカップリングを使用しています。これにより、溶媒からのものを含め、すべてのピークの炭素原子が削除されます。残っているピークはパラセタモールに属し、青、オレンジ、紫、黄色の点で識別されます。

溶媒抑制と組み合わせる ^{13}C デカップリングするプロトン化有機溶媒に溶解させ、任意のサンプルのために非常に有用です。反応モニタリング、または図 2 に示すように、マルベックワインのサンプルを測定して、水/エタノール溶媒に溶解した成分を明らかにすることが含まれます。

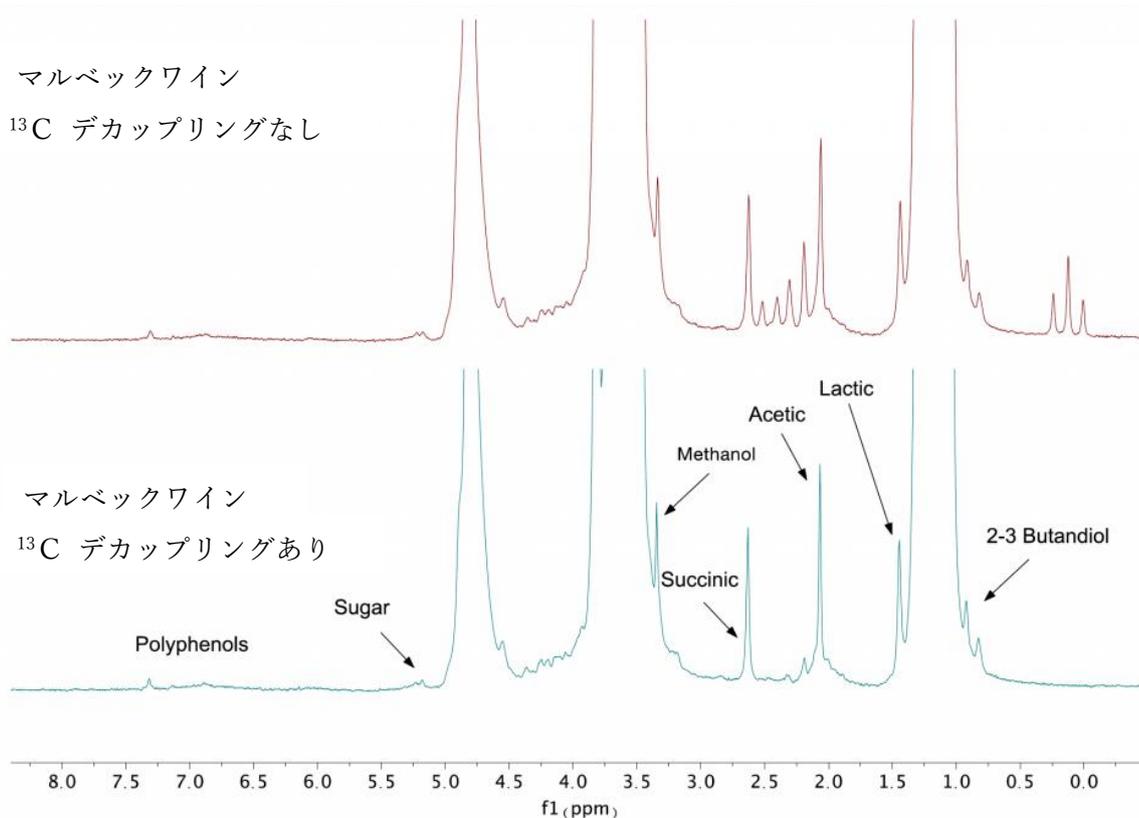


図 2: Spinsolve 60ULTRA カーボン分光計で取得したマルベックワインの 1D プロトン NMR。上の(赤)スペクトルはカーボンデカップリングなしで取得され、下(青)スペク

トルはカーボンデカップリングありで取得されます。エタノールの炭素原子を削除すると、溶解した化合物に対応する NMR ピークがすぐに表示され、図にラベルが付けられます。

溶媒抑制シーケンスと炭素デカップリングシーケンスの両方で、有用なデータを提供するために分光計からより安定性と性能が必要です。特に、シーケンスが機能するには、分光計の線形と分解能が非常に優れている必要があります。線形と解像度を測定する方法の詳細については、このトピックに関する以前の投稿をお読みください。