

## ■ フーリエ変換核磁気共鳴装置 (FT-NMR) 日本電子株式会社 ECP-600



【特徴】小さな磁石としての性質を持つ原子核を強い磁場の中に置き、外部から電磁波を加えると、特有の周波数で共鳴する現象が起こる。これと、分子構造・原子核の配置により共鳴する周波数が僅かに変動する現象(化学シフト(chemical shift))を利用し、試料である有機化合物の構造式を解析する。

【適用分野】

合成化学、製薬、高分子化学、天然物化学

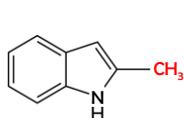
【適用業務】

合成薬品の分子構造確認、天然物由来抽出成分の同定、反応生成物の同定 など

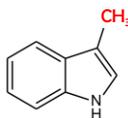
【利用料金】320円(1時間あたり)

### <分析事例> “2-メチルインドール”の解析

・2-メチルインドールは染料、顔料、蛍光染料および医薬品の合成に用いられるが、メチル基(-CH<sub>3</sub>)の配位により数種類の異性体が存在する。(特に、3-メチルインドールは“スカトール”と呼ばれ、強い糞臭を放つ)

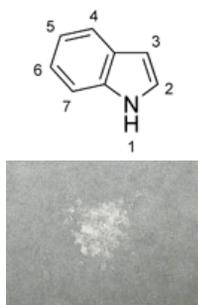


2-メチルインドール



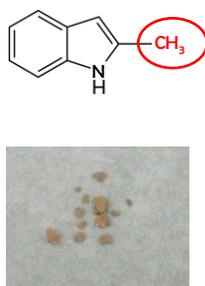
3-メチルインドール(スカトール)

・本事例では、インドールをメチル化して生成されたメチルインドールについて、メチル基が目的の位置で置換されているか、FT-NMRを用いて測定した。



インドール

メチル化



メチルインドール(精製後)

目的の位置で置換されているか？



粉末 15mgを  
600μLの重水素化クロロホルム(CDCl<sub>3</sub>)  
に溶解し、<sup>1</sup>H-NMR測定を実施。

・測定結果は、インドールのスペクトル(下図左)では、7か所のH原子核に由来する信号が同じ大きさと確認されるが、メチルインドールのスペクトル(下図右)では、2位(構造式上のbの位置)の信号が消え、メチル基に相当する3倍の新しい信号Nが現れており、目的とした化合物(2-メチルインドール)が合成できていることがわかる。

