

参考情報「 ^1H スピン情報に基づいた参照 NMR スペクトルと日本薬局方試薬への応用」 の新規作成について

令和 6 年 6 月

日本薬局方原案検討委員会生薬等委員会

「 ^1H スピン情報に基づいた参照 NMR スペクトルと日本薬局方試薬への応用」を参考情報として G5 へ新規追加することにあたり、本参考情報の背景等について説明いたします。

日本薬局方に収載されている試薬・試液のうち、NMR を用いた確認試験が設定されているものでは、例えば「エボジアミン、定量用」の「 δ 〇.〇〇ppm 付近に〇重の〇重線様のシグナル」のように、ヒトの目で見てスペクトルを解析する試験が設定されていますが、このような視覚的な情報は、NMR 装置の磁場の大きさなど装置間の性能の違いによりわずかに異なる場合があります。他方、NMR 用反復計算ソフトを用い、 ^1H qNMR データから化学物質の ^1H スピン情報を正確に決定し、これを NMR 解析ソフトに入力して解析すると、NMR 装置の磁場の大きさに依存しない目的物質の参照 NMR スペクトルが作成されます。参照 NMR スペクトルの利点は、確認したい化学物質とそのジアステレオマーなど、非常によく似た類縁化学物質を明確に区別可能であり、さらにそれが NMR 装置の磁場の大きさに依らないことです。したがって、本技術を利用することで、医薬品各条（化学薬品等）の確認試験で用いられる赤外吸収スペクトル測定法〈2.25〉のような、実測スペクトルと参照スペクトルとの比較試験が、NMR 装置の大きさを問わず実施可能となります。

例えば、チンピ（ウンシュウミカンの成熟果皮）の定量試験に用いられる「ヘスペリジン、定量用」では、ヘスペリジン（2S 体）に、そのジアステレオマーであるエピヘスペリジン（2R 体）が混入している場合があります。その判別が課題となっていました。本技術を用いた確認試験を適用することで混入の有無を知ることができます。

今回提案する「 ^1H スピン情報に基づいた参照 NMR スペクトルと日本薬局方試薬への応用」は、「1. ^1H スピン情報」、「2. 参照 NMR スペクトルを用いた確認試験」の 2 部構成となっており、これらの原理と利点を説明したものです。

以上