

光谱学与光谱分析

## 氧氟沙星甲基化物的核磁共振波谱研究

高秀香<sup>1</sup>, 齐剑<sup>1</sup>, 赵梅仙<sup>2</sup>, 涂光中<sup>3</sup>, 安东各<sup>3</sup>, 徐怡庄<sup>1\*</sup>, 吴瑾光<sup>1</sup>

1. 北京大学化学与分子工程学院稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京 100871
2. 北京化工大学理学院应用化学系, 北京 100029
3. 北京微量化学研究所, 北京 100091

收稿日期 2007-2-6 修回日期 2007-5-12 网络版发布日期 2008-6-29

**摘要** 结合<sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, DEPT, HSQC, HMBC谱和碳氟偶合裂分行为, 对氧氟沙星(ofloxacin, OFL)哌嗪部分的甲基化产物-甲基氧氟沙星(methyl-ofloxacin, Me-OFL)的结构进行归属, 并探讨了Me-OFL在酸性及碱性溶液中的<sup>1</sup>H和<sup>13</sup>C谱的变化。碱性溶液中, 5H的化学位移较酸性向高场移动1.02, 推测此变化与形成C—H…O弱氢键有关。6C、13C、羰基碳7C和羧基碳15C分别向低场位移12.04, 7.46, 4.33, 2.88 ppm, 推测此变化与羧基和羧酸根的转变有关。另外, 还比较了OFL哌嗪环4' N上质子化产物与烷基化产物的正电荷分布。当哌嗪环质子化形成季铵盐时, 正电荷分布在氢原子上; 当其烷基化形成季铵盐时, 正电荷分布在氮原子上。

**关键词** [喹诺酮](#) [甲基氧氟沙星](#) [核磁共振](#) [哌嗪环](#)

**分类号** [O657.6](#)

**DOI:** [10.3964/j.issn.1000-0593.2008.06.010](#)

通讯作者:

徐怡庄 [xiuxianggao@sina.com](mailto:xiuxianggao@sina.com)

### 扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
  - ▶ [PDF\(1111KB\)](#)
  - ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
  - ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
  - ▶ [参考文献](#)
- 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“喹诺酮”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [高秀香](#)
- [齐剑](#)
- [赵梅仙](#)
- [涂光中](#)
- [安东各](#)
- [徐怡庄](#)
- [吴瑾光](#)