

## 29【P2】 I -339

$^{13}\text{C}$  標識アセト酢酸エステルの合成とその応用

○大高 邦章<sup>1</sup>, 梶原 正宏<sup>1</sup>(<sup>1</sup> 明治薬大)

【目的】合成中間体として有用な $\beta$ -ジカルボニル化合物を簡便で、効率良く、安価な原料から $^{13}\text{C}$  標識合成することで、高価で市販品の種類も少ない $^{13}\text{C}$  標識医薬品を効率良く合成することができ、さらには開発期間の短縮化が可能になると考えた。今回は、アセト酢酸エステルに着目し、 $[^{13}\text{C}]$ メタノールや $[1-^{13}\text{C}]$ 酢酸ナトリウムといった比較的安価に手に入る原料からの $^{13}\text{C}$  標識アセト酢酸エステルの合成とその応用について検討を行った。

【方法】アセト酢酸メチルのメチルエステル部分への $^{13}\text{C}$  標識は、 $[^{13}\text{C}]$ メタノールをトリエチルアミン存在下、ジケテンと反応させることで定量的に $[^{13}\text{C}]$ アセト酢酸メチルを得た。また、他の位置への $^{13}\text{C}$  標識は、酢酸ナトリウムを原料として行った。 $^{13}\text{C}$  標識酢酸ナトリウムをエステル化した後、塩基性下で Claisen 縮合に付すことで、 $^{13}\text{C}$  多重標識アセト酢酸エステルを高収率で得ることができた。そこで、呼気試験や生合成研究に応用できる化合物を得られた $^{13}\text{C}$  標識アセト酢酸エステルから合成した。

【結果および考察】本法は、比較的安価な $^{13}\text{C}$  標識原料から簡便かつ高収率で $^{13}\text{C}$  標識アセト酢酸エステル得ることができる合成法である。この方法を用い、さらに有用な化合物を合成を検討していきたい。