



P3: Stable Isotope-Labeled Fluoro-rNTPs and Amidites

フッ素ラベル化は核酸のNMR構造解析において多様で強力なツールとなります。フッ素（原子核）は高感度な情報（0.83, 1H）でみられるNMR分光法の魅力的な特性をいくつか持っています。天然存在比は100%であり、化学シフトは環境中のローカルケミカルシフトとして応答します。加えて、フッ素は事実上生物系に存在しないため、バックグラウンド信号のない理想的な候補であり、*in vivo*-NMRで測定が可能です。

¹⁹F-¹³C Labeling Results in Very Favourable Spectroscopic Behaviour

最近、Haribabu Arthanariと共同研究者は[¹⁹F-¹³C]スピンペアにおける芳香族ラベル化は、NMR-TROSYにおいて非常に良好な分光学的挙動を示し、サイズの大きさも実験手法的に軽減されると示しました。

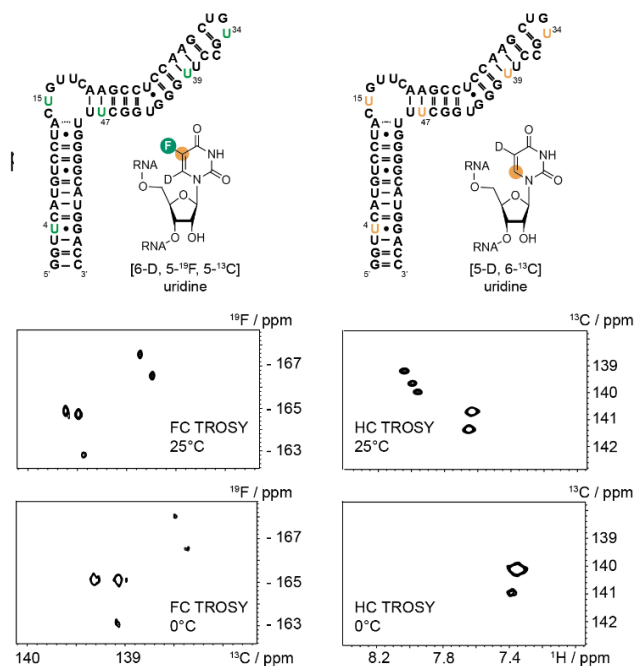


図5: シーケンスとNMR-TROSYのスペクトル
[6-D, 5-¹⁹F, 5-¹³C] ウリジンラベル化hHBV RNA (左)
[5-D, 6-¹³C] uridineウリジンラベル化hHBV RNA (右)

図5(*1)はラベルパターン毎のRNA相関（NMR-TROSY）におけるB型肝炎ウイルスの0°Cと25°Cのポイントを示す。左側が[6-D, 5-¹⁹F, 5-¹³C]ウリジンラベル化（グリーン強調）で、右側が[5-D, 6-¹³C]ウリジンラベル化（ブラウン強調）。

両方の安定同位体ラベルの相関ピークは25°Cでよく分離され得られる。

しかしながら、0°Cでは¹⁹F/¹³Cスピンペアは優れたスペクトラ特性、より高い分子量の挙動の様に分子の移動を下げることが明らかである。

Conclusion of Haribabu Arthanaris study:

全部で5つの[6-D, 5-¹⁹F, 5-¹³C] 全ラベル化が観察された。

しかし5つの¹H-¹³Cウリジン共鳴のうち2つだけが見つかった

フッ素ラベルの良好なスペクトル挙動は、適切なフッ素NMR装置を用いることで、核酸の構造やダイナミクス、相互作用を特徴づける新たな機会を提供します。

¹ Nußbaumer, Felix, Raphael Plangger, Manuel Roeck, and Christoph Kreutz. "Aromatic ¹⁹F-¹³C TROSY—[¹⁹F, ¹³C]-Pyrimidine Labeling for NMR Spectroscopy of RNA." *Angewandte Chemie (International Ed.)* 59.39 (2020): 17062-7069.

Appendix: Product Lists

rNTPs and dNTPs



Fluoro-Ribo-Nucleoside-Triphosphates 19F			
121903701	Fluoro-2 Adenosine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Uniform)	25 mg
121903702	Fluoro-5 Cytidine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Uniform)	25mg
121903704	Fluoro-5 Uridine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Uniform)	25 mg
Fluoro-Ribo-Nucleoside-Triphosphates 19F 13C-labeled			
121923601	Fluoro-2 13C-2 Adenosine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Uniform) 13C (Site-spec.)	10 mg
121923701	Fluoro-2 13C-2 Adenosine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Uniform) 13C (Site-spec.)	25 mg
Fluoro-Ribo-Nucleoside-Triphosphates 19F 2H 13C-labeled			
121943604	Fluoro-5 13C-5 2H-6 Uridine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Unif.) 2H13C (Site Spec.)	10 mg
121943704	Fluoro-5 13C-5 2H-6 Uridine 5'-triphosphate, lithium salt, solution	19F (Unif.) 2H13C (Site Spec.)	25 mg
Fluoro-Ribo-Phosphoramidites 19F-labeled			
127903801	Fluoro-2 Adenosine Phosphoramidite, powder	19F (Uniform)	50 mg
Fluoro-Ribo-Phosphoramidites 19F 2H-labeled			
127913804	Fluoro-5 2H-6 Uridine Phosphoramidite, powder	19F (Unif.) 2H (Site Spec.)	50 mg
Fluoro-Ribo-Phosphoramidites 19F 13C-labeled			
127923601	Fluoro-2 13C-2 Adenosine Phosphoramidite, powder	19F (Uniform) 13C (Site-spec.)	10 mg
127923801	Fluoro-2 13C-2 Adenosine Phosphoramidite, powder	19F (Uniform) 13C (Site-spec.)	50 mg
Fluoro-Ribo-Phosphoramidites 19F 2H 13C-labeled			
127943604	Fluoro-5 13C-5 2H-6 Uridine Phosphoramidite, powder	19F (Unif.) 2H13C (Site Spec.)	10 mg
127943804	Fluoro-5 13C-5 2H-6 Uridine Phosphoramidite, powder	19F (Unif.) 2H13C (Site Spec.)	50 mg