

JASONの化学シフト予測機能を使おう！ —化学シフト予測による解析結果の確認(1)—

関連製品：核磁気共鳴装置(NMR)

NMRIによる構造解析の結果は、様々な測定データの情報で総合的に判断する必要があります。近年はソフトウェアによる化学シフト予測の進歩が目覚ましく、測定結果と併せて利用することで、解析の確度を向上させることができます。ここでは、JASON[®]による化学シフト予測の活用例をご紹介します。(JASON: JEOL Analytical Software Network)

HMBCによる推定構造の確認

分子式が $C_6H_{10}O_2$ の化合物の解析例をご紹介します。この化合物は ^{13}C , DEPT, HMQC, COSYで二つの推定構造を導き出すことができます (Fig. 1)。推定構造IとIIの違いはカルボニル炭素Fと結合する酸素の位置です。そのため、HMBCでFと相関がある 1H を確認します。Fは H_C , H_D , H_E と相関が観測されました。HMBCは、主に2, 3結合離れた 1H と ^{13}C の相関が観測されます。推定構造IはFと相関のある 1H は3結合以内に存在しますが、推定構造IIは、Fと H_E は4結合離れています。

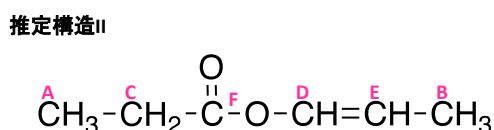
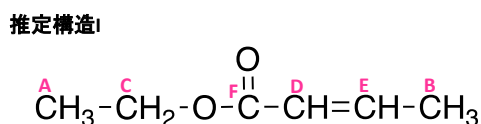


Fig. 1 二つの推定構造

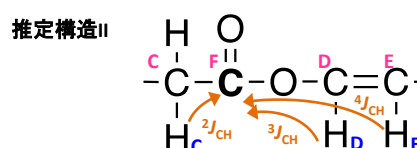
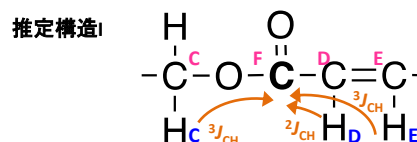


Fig. 2 HMBCで観測された $^nJ_{CH}$ 相関の結合数

JASONの化学シフト予測機能による推定構造の確認

HMBCとJASON化学シフト予測を併用することで、解析の確度を向上させることができます。推定構造IとIIにJASONの化学シフト予測を適用しました (Fig. 3)。Table. 1に実測値と化学シフト予測値を示します。推定構造IIは実測値と予測値が良く一致しています。HMBCと化学シフト予測の結果より、推定構造IIの可能性は低く、推定構造Iが正しい構造と考えられます。

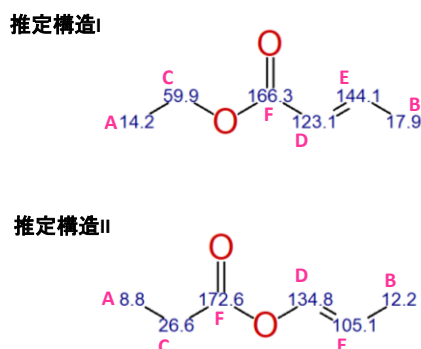


Fig. 3 化学シフト予測値 (ppm)

	^{13}C CS/ppm	JASON ^{13}C CS/ppm Prediction	
		推定構造I	推定構造II
A	14.2	14.2	8.8
B	17.9	17.9	12.2
C	60.0	59.9	26.6
D	122.8	123.1	134.8
E	144.4	144.1	105.1
F	166.5	166.3	172.6

Table. 1 実測値と予測値

このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせください。 Copyright © 2023 JEOL Ltd.

