

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(2)—

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)

化学シフトによる推定構造の判別

分子式が $C_{15}H_{10}O_4$ の化合物の解析例をご紹介します。この化合物は基本的な測定法(1H , ^{13}C , DEPT, HSQC, COSY, HMBC)と1,1-ADEQUATEを解析することで、二つの推定構造を導き出すことができます(Fig. 1)。二つの推定構造の違いは酸素の位置で、炭素Kの ^{13}C の化学シフトに注目します。Kは推定構造Iでは、酸素に結合しています。ベンゼンの化学シフトは128.5 ppmです。ベンゼンに水酸基(-OH)やメトキシ基(-OCH₃)が結合すると、約20~30 ppm低磁場シフトすることが知られています(化学シフトの加成性)。Kの化学シフトは157.9 ppmでした。これより、Kに酸素が結合した推定構造Iが正しい構造と考えられます。

JASONの化学シフト予測機能による推定構造の確認

ソフトウェアの進歩により、化学シフトの加成性は化学シフト予測で代用することが可能です。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. 2)。推定構造IIは、Kとカルボニル炭素Mの予測値と実測値には約20 ppmの差があります(Table. 1)。推定構造Iは、予測値と実測値はほぼ同等の値です。化学シフト予測により、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。

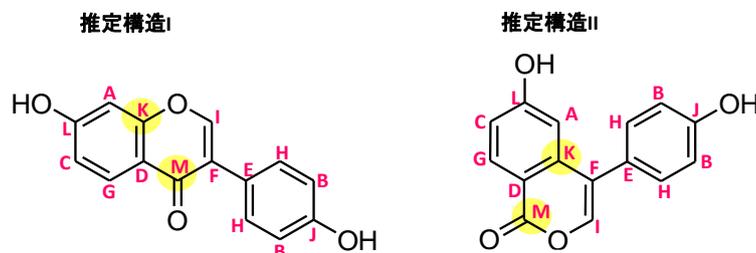


Fig. 1 二つの推定構造

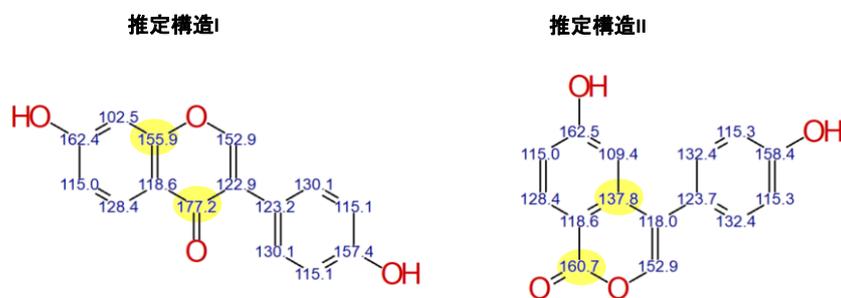


Fig. 2 化学シフト予測値 (ppm)

	^{13}C CS/ppm	JASON ^{13}C CS Prediction	
		推定構造I	推定構造II
A	102.6	102.5	109.4
B	115.5	115.1	115.3
C	115.6	115.0	115.0
D	117.2	118.6	118.6
E	123.1	123.2	123.7
F	124.0	122.9	118.0
G	127.8	128.4	128.4
H	130.6	130.1	132.4
I	153.3	152.9	152.9
J	157.7	157.4	158.4
K	157.9	155.9	137.8
L	163.0	162.4	162.5
M	175.2	177.2	160.7

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。

