

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(3)—

関連製品：核磁気共鳴装置(NMR)

NMR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)

JASONの化学シフト予測機能による推定構造の確認

分子式がC₆H₆N₂O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, ¹³C, DEPT, ¹H-¹³C HSQC, ¹H-¹H COSY, ¹H-¹³C HMBC)と¹H-¹⁵N HMBCを解析することで、推定構造を導き出すことができます(Fig. 1)。推定構造の妥当性を確認する方法として、化学シフト値の加成性の利用がありますが、これはソフトウェアによる化学シフト予測機能で代用できます。Fig. 1の推定構造にJASONの化学シフト予測を適用しました。実測値と予測値をTable. 1に示します。実測値と予測値がほぼ一致していることから、得られた推定構造は正しい構造と考えられます。

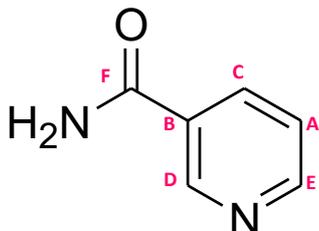


Fig. 1 推定構造

	¹³ C CS/ppm	JASON ¹³ C CS Prediction
A	123.9	124.9
B	130.2	129.6
C	135.7	137.0
D	149.2	152.5
E	152.4	148.3
F	167.0	170.6

Table. 1 ¹³C化学シフトの実測値と予測値 (ppm)

化学シフト予測を利用するときの注意

しかし、化学シフト予測の結果を注意深く見ると、DとEの帰属が逆転していることがわかります(Fig. 2)。このような場合は、スペクトルに戻り、解析結果を確認します。COSYスペクトル(Fig. 3)で、E/AとC/A相関が観測されたことから、C-A-Eという¹H配列があることがわかります。このことから、化学シフト予測が示すAとDが隣り合う構造は正しくありません。この例の様に化学シフト予測は、スペクトル解析を行った上で利用する必要があります。結果に矛盾が生じた場合は、解析結果を再確認することが重要です。

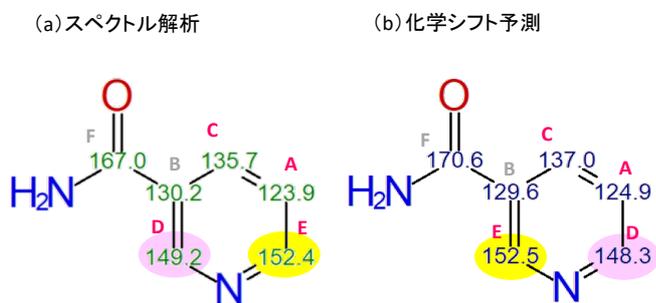


Fig. 2 スペクトル解析と化学シフトによる帰属

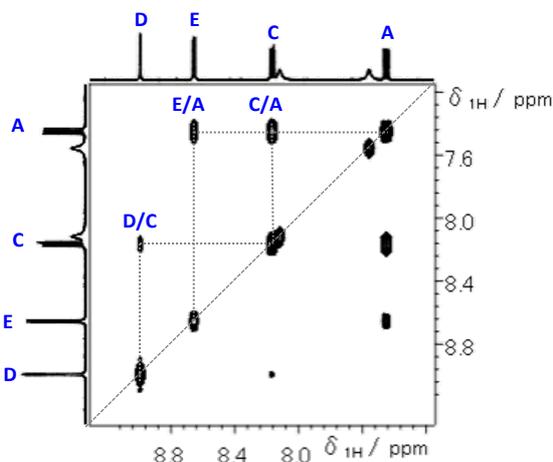


Fig. 3 ¹H-¹H COSYスペクトル

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。

