NMR化学シフト計算とその解析

NMR化学シフト計算

ベンズアルデヒド分子(図1)について、Winmostarで計算入力ファイルを作成して、PCM法でクロロホルム($CHCl_3$)溶媒効果を加えたB3LYP/6-311G**レベルで構造最適化、NMR化学シフトの量子化学計算を行いました。その結果ファイルをWinmostarで読み込み、^{1}H及び^{13}C NMR化学シフトスペクトル図にして、実験データ[1]と比較しました(図2、3)。^{1}H、^{13}Cどちらの計算も実験スペクトルをよく再現しています。

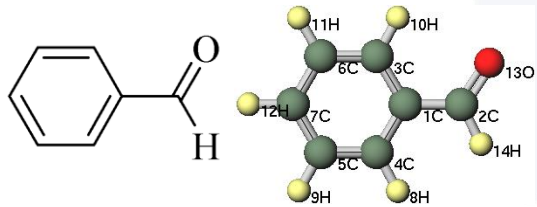

図1 ベンズアルデヒド分子

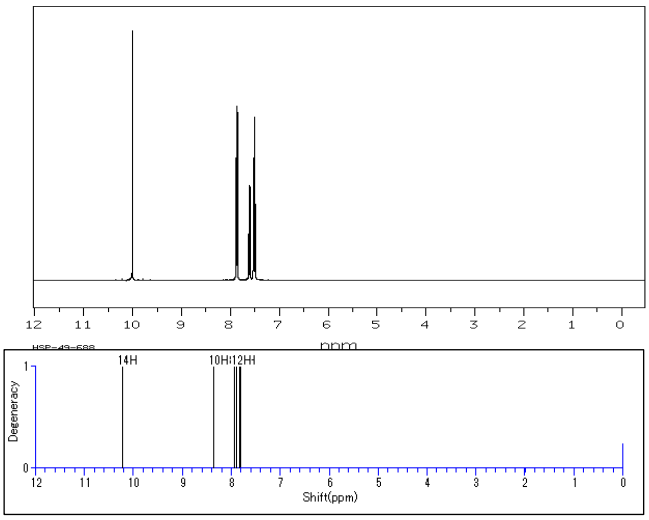

図2 ^{1}H NMR化学シフトスペクトル(上:実験[1]、下:計算)

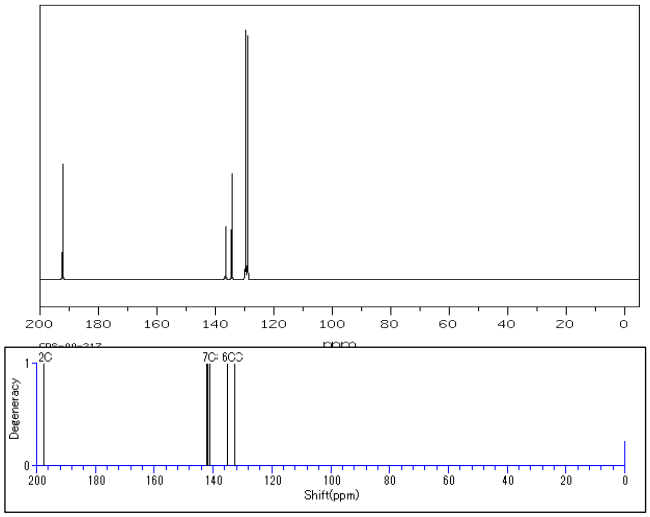

図3 ^{13}C NMR化学シフトスペクトル(上:実験[1]、下:計算)

量子化学計算から得られる値は、対象分子の各原子の磁気遮蔽定数です。NMR化学シフト値は、基準物質(本事例では^{1}H、^{13}C共にテトラメチルシラン(TMS)分子)と対象分子の磁気遮蔽定数の差から算出します。そのため、TMS分子についても同じレベルでの量子化学計算を行う必要がありますが、主要な計算方法の値についてはWinmostarにあらかじめ登録されています。

Winmostarでの解析

Winmostarでは元素(Element)、基準物質と計算方法(Reference)を設定した後、図4のようにピークをクリックすると、原子の番号と化学シフト値がSelected欄に表示されます。原子の番号は、図1右のようにWinmostarメインウィンドウで確認できます。それぞれのピークがどの原子由来のものであるか、帰属を簡単に行うことができます。

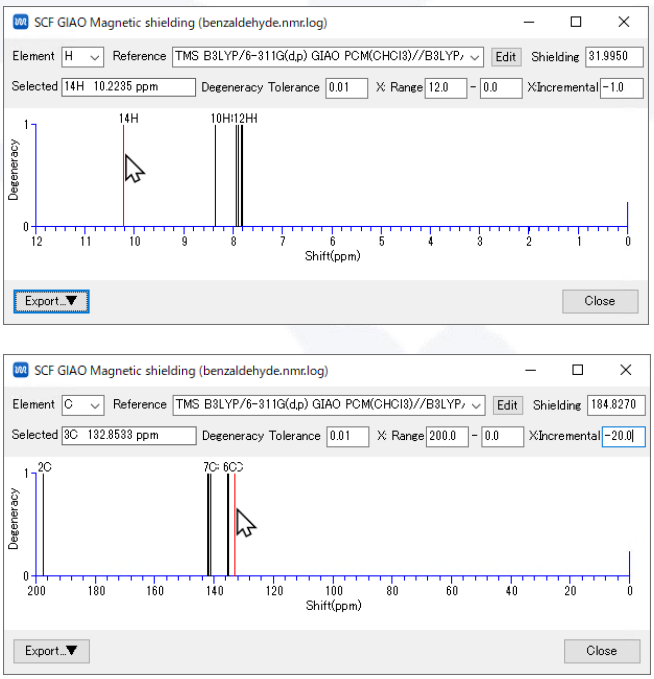

図4 Winmostarでの各ピークの情報取得(上:^{1}H NMR、下:^{13}C NMR)

Winmostarバージョン: 10.2.4

対応ソルバ: Gaussian、NWChem

引用:

[1] SDBSWeb : https://sdbs.db.aist.go.jp (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, 2020/09)

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.