

量子化学計算による有機分子の スピン結合定数の解析

NMR測定と計算の組み合わせにより分子構造の詳細な解析が可能です

測定法 : 計算科学・AI・データ解析、NMR

製品分野 : 医薬品

分析目的 : 化学結合状態評価、構造評価

概要

核磁気共鳴分析(NMR)は有機化合物の構造解析に用いられる手法です。NMRスペクトルは化合物を構成する原子核のスピンの影響を相互に受け、その影響はスピン結合定数で示されます。このスピン結合定数を評価することで複雑な構造を持つ化合物や新規化合物などの同定が可能となります。本資料では、スピン結合定数の測定値と量子化学計算による計算値との比較に基づき、フッ素化合物の立体配座について解析した事例を紹介し、配座のエネルギー計算により安定性の比較も可能です。

データ

■ スピン結合定数の評価

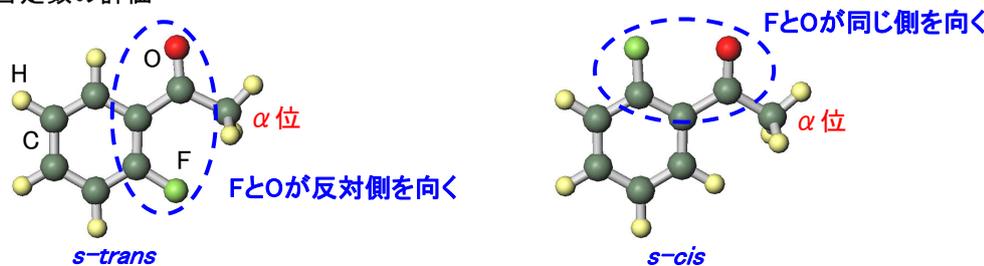


図: 2'-フルオロアセトフェノンの配座異性体の分子モデル

表: H^{α} -F, C^{α} -Fスピン結合定数の計算値と測定値[文献1]の比較結果

	H^{α} -Fスピン結合定数(Hz) ³⁾			C^{α} -Fスピン結合定数(Hz) ³⁾	
	計算値	測定値		計算値	測定値
<i>s-trans</i>	6.7	5.0	<i>s-trans</i>	8.0	7.7
<i>s-cis</i>	-0.1		<i>s-cis</i>	-0.3	

*s-trans*配座の計算値が測定値に近い
→ *s-trans*配座を主に形成することが分かる

- 1) H^{α} は α 位の炭素Cに結合した水素H
- 2) C^{α} は α 位の炭素C
- 3) スピン結合定数はクロロホルム溶媒中の値

エネルギー(E)⁴⁾計算の結果も、
*s-trans*配座を主に形成することを支持

$$E(s-trans) < E(s-cis)$$

より安定

- 4) 量子化学計算で得た、ゼロ点振動、熱補正済みの全エネルギー
 $E(s-trans) = -484.059$ a.u., $E(s-cis) = -484.056$ a.u.



- ・測定値と計算値との比較から、分子構造について配座異性体も含めた詳細な知見が得られます
- ・データベースに無い新規化合物に対しても、候補構造から計算が可能です

[文献1] Otake, C.; Namba, T.; Tabata, H.; Makino, K.; Hirano, K.; Oshitari, T.; Natsugari, H.; Kusumi, T.; Takahashi, H. Conformational Preference of 2'-Fluoro-Substituted Acetophenone Derivatives Revealed by Through-Space 1H - ^{19}F and ^{13}C - ^{19}F Spin-Spin Couplings. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 4638-4645.

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : https://www.mst.or.jp/