

量子化学計算による有機分子の NMR化学シフトシミュレーション

測定と計算を組み合わせた解析により構造異性体の識別が可能です

測定法 : 計算科学・データ解析、NMR
製品分野 : 医薬品、化粧品、日用品、食品
分析目的 : 化学結合状態評価、構造評価

概要

有機分子の異性体構造の決定は天然物化学や創薬化学などの分野において、非常に重要な課題です。核磁気共鳴分析(NMR)の測定結果と量子化学計算によるNMR化学シフトシミュレーション結果を組み合わせることは、構造-化学シフト相関を調べるためのモデル化合物が無い新規化合物の構造解明や特性評価に役立つと考えられます。本資料では生物活性を有するキノキサリンの誘導体を対象に、構造異性体の識別を行った事例を紹介いたします。

データ

■ シミュレーション対象

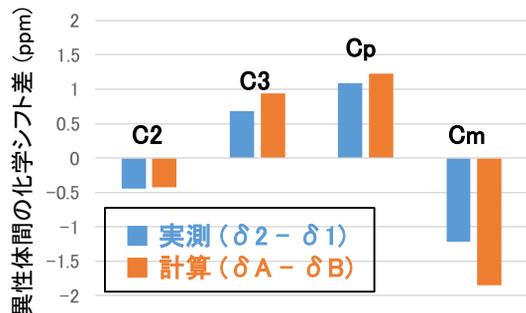
着目する炭素のラベル付け(C2, C3, Cp, Cm)
CpはNO₂-に対しpara位、Cmはmeta位に対応



■ 結果と考察

- 今回想定している状況
キノキサリン誘導体2種(化合物1, 2)の¹³C NMR測定を行ったが、それぞれが異性体A, Bのどちらの構造に対応するか分からない。
- ¹³C NMR化学シフト実測値と計算値の比較による構造異性体の識別
化合物1, 2の化学シフト実測値[1]をそれぞれ $\delta 1$, $\delta 2$ とし、異性体A, Bの化学シフト計算値をそれぞれ δA , δB とする。着目する炭素それぞれについて、異性体間の化学シフト値の差に基づき考察する。

- ✓ シミュレーション結果と測定結果を比較することで構造異性体の識別が可能です。
- ✓ データベースに無い新規化合物に対しても、候補構造からシミュレーションを行えます。
- ✓ 構造を特定した分子に対し他の計算も行うことで、安定性や電荷分布、分子軌道のエネルギー、光吸収などの性質を調べられます。



異性体間の化学シフト差について、実測と計算の傾向から化合物2が異性体A、化合物1が異性体Bの構造に対応することが分かる。

[1] Balandina, A.; Mamedov, V.; Franck, X.; Figadère, B.; Latypov, S. *Tetrahedron Lett.* **2004**, *45*, 4003–4007.

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/