

JASON Tips

NMJT_0007

Jカップリングシミュレーション

JASON
JEOL Analytical Software Network

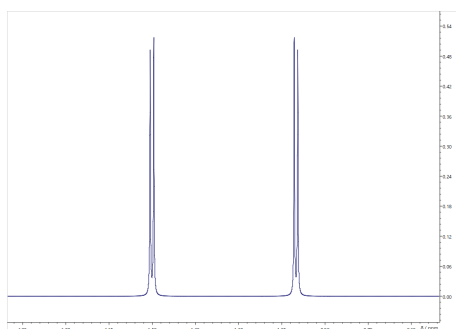


JASONでスペクトルを開いた状態でコンテキストツール > 解析にチェックをつけると解析画面が表示されます。その後、J結合シミュレーションを選択すると、J結合シミュレーターツールが展開します。これを用いてカップリングパターンのシミュレーションを行うことができます。

ここで、「スピン数」にはNMR信号の数、「Frequency」には¹Hの共鳴周波数、「線幅」にはNMR信号の半値幅を入力します。カップリングのシミュレーションに使用するため、通常スピン数は2以上を選択します。

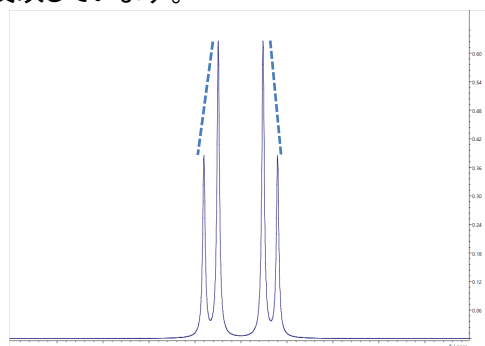
スピン数2 (信号A, 信号Bの2スピン系)の場合、以下の図のような画面になります。そこで「Shift/ppm」にA,Bそれぞれの化学シフト、「No of Identical Spins」にそれぞれが¹Hいくつ分なのか、「A(Hz)」にA-Bのカップリングが何Hzなのかを入力します。するとシミュレーション結果が表示されます。

Shift/ppm	No of Identical Spins	A(Hz)
A 1,000 ppm	1	
B 1,500 ppm	1	5,000 Hz



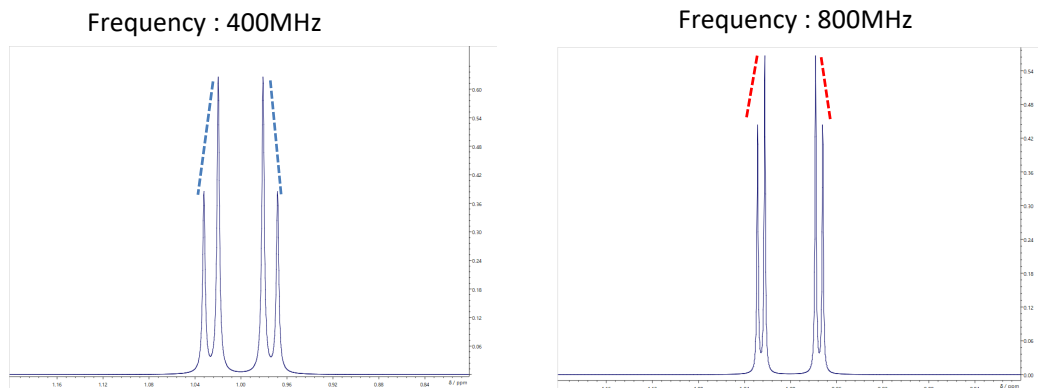
例えば信号Aと信号Bの化学シフト差 Δ に比べ、信号Aと信号B間のカップリング定数 J_{AB} が十分に小さくない場合、実際のスペクトルではそれぞれのダブレットの強度比は二次効果により、1:1からずれていきますがシミュレーションにおいても同様に二次効果を考慮した線形を反映しています。

Shift/ppm	No of Identical Spins	A(Hz)
A 0,975 ppm	1	
B 1,025 ppm	1	5,000 Hz





二次効果についてはNMR装置の磁場強度が高いほど化学シフト差 Δ をHz表示で表した際に大きな値になるため、二次効果の影響が小さくなります。



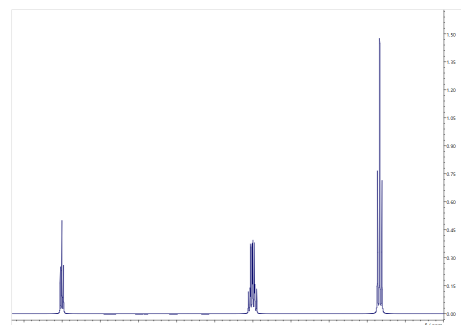
信号A, 信号B, 信号Cの3スピ系においてもシミュレーションが可能です。もし信号A, 信号C間のカップリングがないケースをシミュレーションしたい場合は0Hzに設定します。

JEOL 結合シミュレーター

スピンス数 3 Frequency 400.00MHz 掃幅 1.00Hz

Shift/ppm	No of Identical Spins	A(Hz)	B(Hz)
A 0.500 ppm	3	7.00 Hz	
B 1.500 ppm	2	0.00 Hz	5.00 Hz
C 3.000 ppm	1	0.00 Hz	5.00 Hz

シミュレーション(S) 読み込み(L)... 保存(Y)



例えば参考文献のNMR装置の磁場強度、着目信号の化学シフト、カップリング定数の情報があれば、異なる磁場のNMR装置で測定したデータと比べるような場合に本シミュレーションの機能を利用することでより比較しやすくなります。

結合シミュレーターの「保存」を選択し、次回このツールを立ち上げて「読み込み」を行うことでスピンス数等の条件を保存時の状態に戻すことが可能です。

JEOL 結合シミュレーター

スピンス数 3 Frequency 400.00MHz 掃幅 1.00Hz

Shift/ppm	No of Identical Spins	A(Hz)	B(Hz)
A 0.500 ppm	3	7.00 Hz	
B 1.500 ppm	2	0.00 Hz	5.00 Hz
C 3.000 ppm	1	0.00 Hz	5.00 Hz

シミュレーション(S) 読み込み(L)... 保存(Y)

以上はJASON (JEOL Analytical Software Network) ver.2.1によるものです。