JASON Tips

NMJT_0007

Jカップリングシミュレーション

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。

JEOL Analytical Software Network

20 3 分 日 ···· 3/- 9 子-9処理 県示	新世	ここで、「スピン数」にはNMR信号の数、「Freq 共鳴周波数、「線幅」にはNMR信号の半値幅 カップリングのシミュレーションに使用するため は2以上を選択します。	uency」には ¹ Hの を入力します。 り、通常スピン数
 ★ ★<th>± 正式的(-2 ~ √ 協) 「日前 「千前 (3) 何 27 2 万福田 (3) 77 ○ 万福田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 70 ○ 万田 (3) 70 ○ 万田</th><th>■ JEOL 場合シミレーター スピン教 1 © Frequency 400.000HHz ⑤ 操幅 1.00Hz ◎ Shift/ppm No of Identical Spins A 0.000 ppm ⑦ 1 ⑦</th><th>× やり直し的 設定 ジミュレーション(5) 読み込み(1)… 係存(y)</th>	± 正式的(-2 ~ √ 協) 「日前 「千前 (3) 何 27 2 万福田 (3) 77 ○ 万福田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 77 ○ 万田田 (3) 70 ○ 万田 (3) 70 ○ 万田	■ JEOL 場合シミレーター スピン教 1 © Frequency 400.000HHz ⑤ 操幅 1.00Hz ◎ Shift/ppm No of Identical Spins A 0.000 ppm ⑦ 1 ⑦	× やり直し的 設定 ジミュレーション(5) 読み込み(1)… 係存(y)

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。



例えば信号Aと信号Bの化学シフト差∆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。

🚇 JEOL J結合シミュレーター	×	/I IV	0.60
スピン数 2 🔄 Frequency 400.00MHz 🝨 線幅 1.00Hz 单	取り消し(山) やり直し(別) 設定		0.54
Shift/ppm No of Identical Spins A(Hz)			10.48
A 0.975 ppm 1	シミュレーション(5)	$\{i_1, \dots, i_k\}$	-0.42
			-0.36
	読み込み(」)		0.24
			0.18
	(位)		-0.12
			0.06
		1.16 1.12 1.08 1.64 1.00 0.96 0.52 0.88	0.84 8/ppm

1/2

JEOL 🚺 日本電子株式会社



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。

JEOL Analytical Software Networ



信号A,信号B,信号Cの3スピン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の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。

スピン数 3 😓 Frequency 400.00MHz 호 線幅 1.00Hz 💿 取り消し(U) やり直し(E) 設定	ε
Shift/npm No of Identical Spins A(Hz) B(Hz)	
A 0.500 ppm 🗘 3 😌	
B 1.500 ppm 1 2 1 7 00 Hz 1 500 Hz 1	1(5)
読み込み(1)	
17 m/ 1	

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ー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数等の条件を保存時の状態に戻すことが可能です。

🚨 JEOL J塘舎シミュレーター X								
ג	スピン数 3 全 Frequency 400.00MHz 全 線幅 1.00Hz 全 取り消し(1) やり直し(3) 静定							
		Shift/ppn	n	No of Identical Spins	A(Hz)	B(Hz)		
	A	0.500 ppm	*	3				
	В	1.500 ppm	+	2	7.00 Hz 🛟			シミュレーション(S)
	с	3.000 ppm	•	1	0.00 Hz 🔹	5.00 Hz 🔹		
								読み込み(<u>L</u>)
								保存(<u>v</u>)

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