

KnowItAll® ソフトウェアのトレーニング

NMR 予測

NMR を予測

NMR スペクトルを予測する方法

目的

この演習では、KnowItAll 情報システムの PredictIt NMR アプリケーションを使用して、化学構造から予測された NMR スペクトルを生成する手順を説明します。

目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- データベースと溶媒の設定方法
- PredictIt NMR で構造を開く方法
- 予測を実行する方法
- 予測結果の解釈方法

背景

PredictIt NMR アプリケーションでは、特定の化学環境に対してデータベースを検索し、構造から 1、13、およびその他の NMR シフトを予測することができます。これらは、分子構造内の原子の化学的な環境を特徴付けるために使用される、球状環境の階層的な組織 (HOSE) コードで記述されます。

PredictIt NMR アプリケーションでは、一般的な溶媒のリストから選択することができます。必要に応じて、予測は溶媒に依存することも可能です。

PredictIt NMR の設定を実施

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

- ファイルパス: C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\ Samples\Structures\p-Methoxycarbanilic acid, 2-ethoxyethyl ester.dsf

KnowItAll 使用アプリケーション

- PredictIt™ NMR
- ChemWindow®
- Minelt™

アクション	結果
-------	----

<p>1 通常、スペクトル解析グループにあるアイコンをクリックして、PredictIt NMR アプリケーションを起動します。</p>	
<p>2 標準ツールバーの中にある溶媒と核種のドロップダウンリストを確認してください。核種のタイプを¹³Cに変更します。</p>	<p>核種のタイプが正しく ¹³C に設定されていることを確認してください:</p>  <p>PredictIt NMR アプリケーションは、ツールバーで指定された溶媒と核種に基づいて予測を行います。</p>
<p>3 File (ファイル) > Preferences (プリファレンス) を選択します。</p>	<p>PredictIt NMR の設定ダイアログボックスが開きます:</p> 

<p>アクション</p>	<p>結果</p>
--------------	-----------

4 「NMR 予測の設定」ダイアログボックスで、設定（核種別）を ^{13}C に設定してください。スペクトル技術の制限では、 ^{13}C を選択してください。その後、「全て追加」ボタンをクリックし、OK をクリックします。

予測時には、選択したデータベースが使用されます。OK をクリックすると、ダイアログボックスが閉じます。

インターネットデータベースは選...	対象スペクトル(L):	リフレッシュ(R)
Reference	13C NMR	
User DB		

名称	レコード	DB コー...
13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX
13C NMR - Natural Products - ...	3432	NPX
13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX
13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX
13C NMR - Sadtler Polymers ...	742	NMX
13C NMR - Wolfgang Robien	304586	WRX
Multi-Technique Sadtler Demo...	37	DEMO...

すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(E)

設定

核種(N): ^{13}C

サーチ パラメータ

サーチするシエルレベルの下限(L): 1

異常値を棄却(RSMDで設定):

棄却処理を行う最小データ数: 10

閾値(RSMDの倍数)(X): 3

スペクトル生成オプション

バー グラフ 推奨するシフト値の範囲(ppm):

ピークで表示(S) 高磁場側(W) 0 ppm

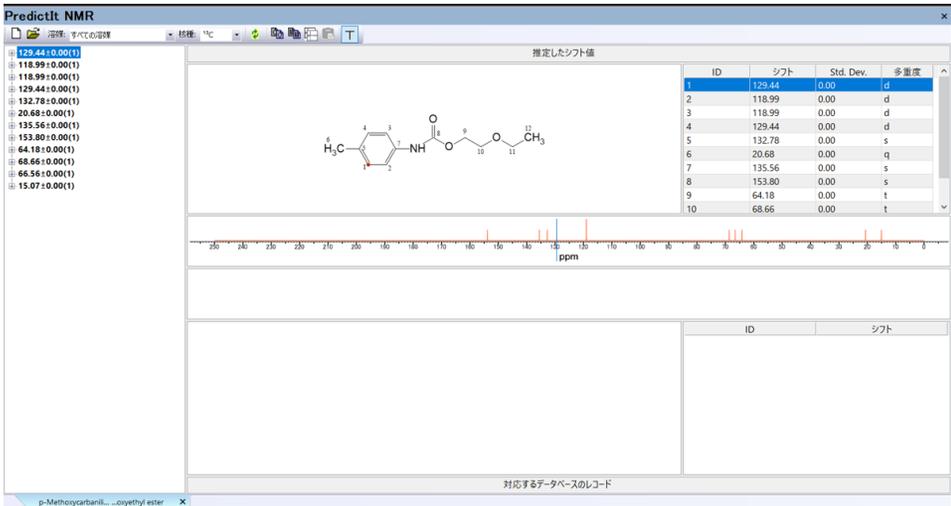
中心周波数(M): 100 MHz 上限(H): 250 ppm

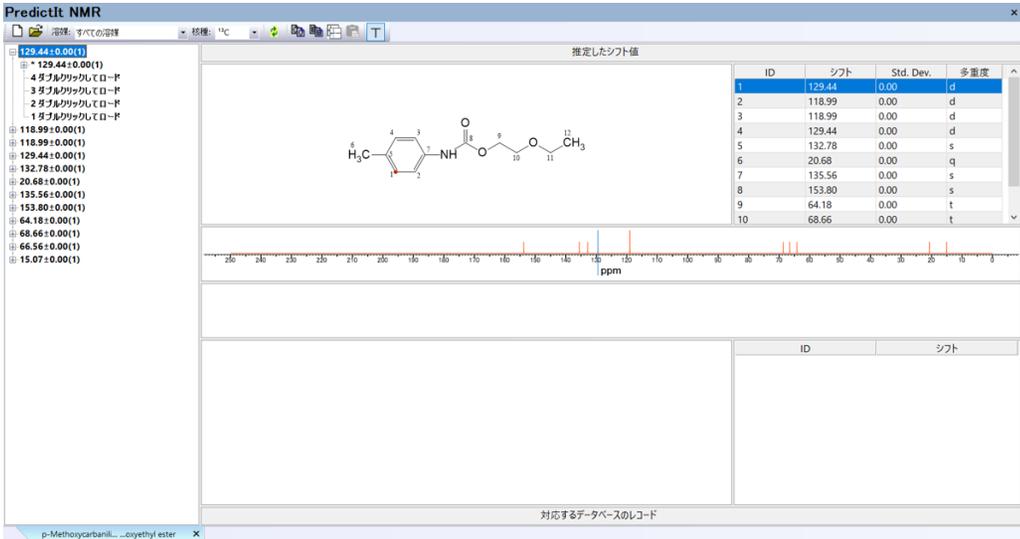
選択されているデータベース(C):

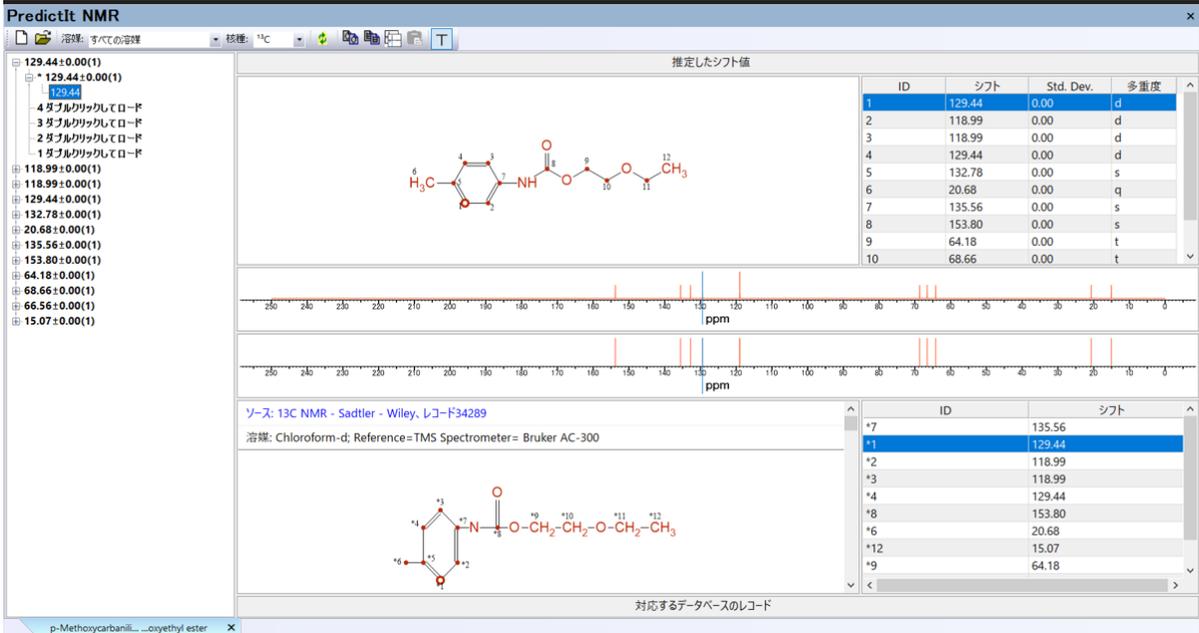
- 13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley
- 13C NMR - Natural Products - Wiley
- 13C NMR - Organic Compounds - Wiley
- 13C NMR - Sadtler - Wiley

注記：利用可能なデータベースは、ご使用のパッケージによって異なる場合があります。DEMOX が利用可能な唯一のデータベースとなることもあります。

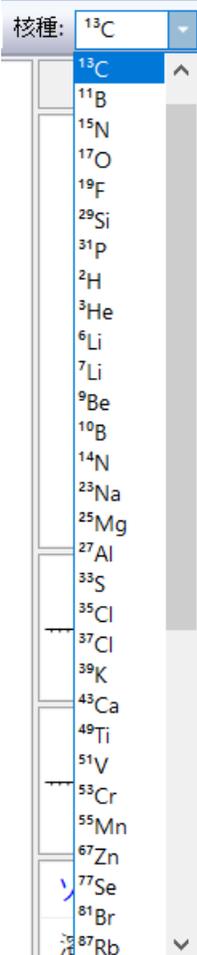
構造を読み込んで予測を行う

	アクション	結果
5	「右クリックして構造を追加」と書かれたボックスで右クリックします。	<p>ポップアップメニューが表示されます:</p>  <p>右クリックをして構造式を開く。</p>
6	「ファイルから構造をインポート」を選択します。	すると、標準ウィンドウの「開く」ダイアログボックスが表示されます。
7	C:\Users\Public\Public Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Structuresに移動してください。「p-Methoxycarbanilic acid, 2-ethoxyethyl ester.dsf」を選択し、開くをクリックします。	<p>計算が完了すると、結果が PredictIt NMR のメインウィンドウに表示されます:</p>  <p>選択した原子には赤いタグが表示されます。対応する行はピークテーブルでハイライトされます。化学シフトはシフトテーブルに表示されます。</p>

	アクション	結果																																												
8	<p>ピークテーブルのツリーで「+」のマークをクリックして展開します。さらに下の階層にある枝の「+」のマークをクリックして展開します。</p>	<p>最初のプラスボックスをクリックすると、ツリーの下に一連の行が展開されます。2番目のプラスボックスをクリックすると、特定の計算に寄与したレコードが表示されます。</p>  <table border="1" data-bbox="1381 495 1675 662"> <thead> <tr> <th>ID</th> <th>シフト</th> <th>Std. Dev.</th> <th>多重度</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>129.44</td> <td>0.00</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>118.99</td> <td>0.00</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>118.99</td> <td>0.00</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>129.44</td> <td>0.00</td> <td>d</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>132.78</td> <td>0.00</td> <td>s</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>20.68</td> <td>0.00</td> <td>q</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>135.56</td> <td>0.00</td> <td>s</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>153.80</td> <td>0.00</td> <td>s</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>64.18</td> <td>0.00</td> <td>t</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>68.65</td> <td>0.00</td> <td>t</td> </tr> </tbody> </table> <p>対応するデータベースのレコード</p> <p>KnowItAll は、原子の環境に一致するデータベースのレコードを第 4 シェル、第 3 シェルなどに分けて平均化します。</p>	ID	シフト	Std. Dev.	多重度	1	129.44	0.00	d	2	118.99	0.00	d	3	118.99	0.00	d	4	129.44	0.00	d	5	132.78	0.00	s	6	20.68	0.00	q	7	135.56	0.00	s	8	153.80	0.00	s	9	64.18	0.00	t	10	68.65	0.00	t
ID	シフト	Std. Dev.	多重度																																											
1	129.44	0.00	d																																											
2	118.99	0.00	d																																											
3	118.99	0.00	d																																											
4	129.44	0.00	d																																											
5	132.78	0.00	s																																											
6	20.68	0.00	q																																											
7	135.56	0.00	s																																											
8	153.80	0.00	s																																											
9	64.18	0.00	t																																											
10	68.65	0.00	t																																											

	アクション	結果
9	<p>「129.44」と書かれた行をクリックして、そのレコードを表示します。</p> <p>注記：「Source: ¹³C NMR」という青色のテキストで表示されているレコードIDをクリックすると、Minelt アプリケーションで選択したレコードが開かれます。</p>	<p>ピークテーブルツリーでレコードを選択すると、化学シフトの計算に参与したレコードが表示されます。</p>  <p>ソース: ¹³C NMR - Sadtler - Wiley, レコード34289 溶媒: Chloroform-d, Reference=TMS Spectrometer= Bruker AC-300</p> <p>対応するデータベースのレコード</p>
10	<p>予測は、溶媒のドロップダウンメニューを使用して特定の溶媒に基づいてフィルタリングすることができます。</p>	<p>溶媒をフィルタリングすると、選択した溶媒のデータのみを使用して計算が再実行されます。</p>

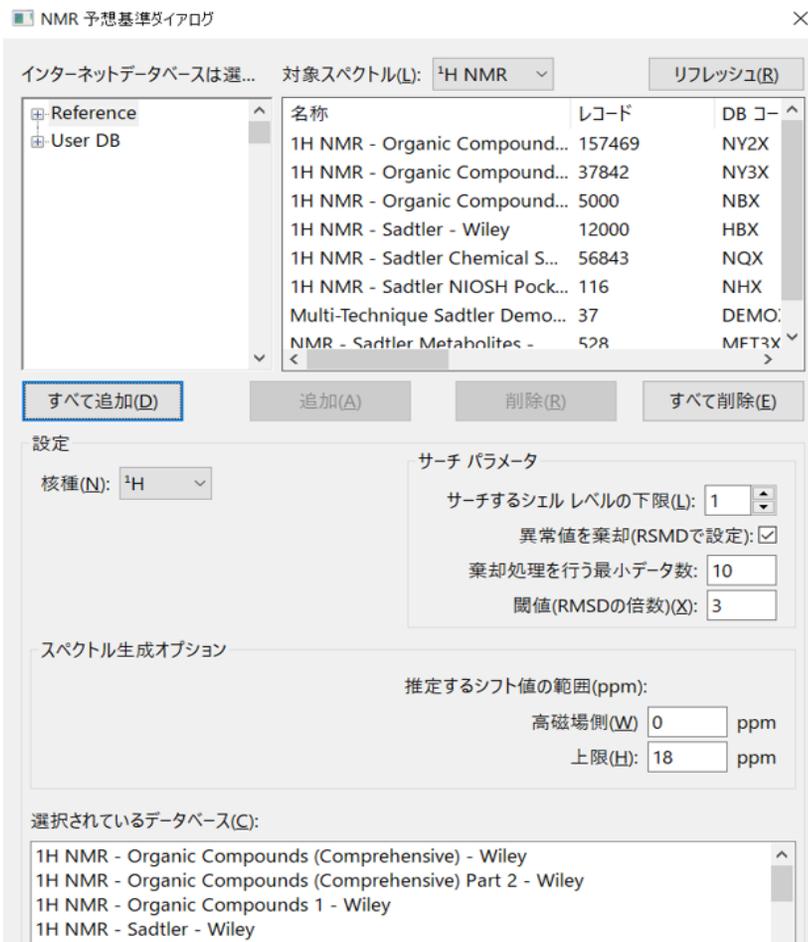
他の核に対する予測を行う

	アクション	結果
1	上記の例は ^{13}C NMR の予測ですが、他の核に対して予測を行う場合は、 核 のドロップダウンメニューで選択を変更してください。	 <p>核種: ^{13}C</p> <ul style="list-style-type: none">^{13}C^{11}B^{15}N^{17}O^{19}F^{29}Si^{31}P^2H^3He^6Li^7Li^9Be^{10}B^{14}N^{23}Na^{25}Mg^{27}Al^{33}S^{35}Cl^{37}Cl^{39}K^{43}Ca^{49}Ti^{51}V^{53}Cr^{55}Mn^{67}Zn^{77}Se^{81}Br^{87}Rb

2 **注記**：選択した技術に対応したデータベースを更新する必要があります。

File (ファイル) > Preferences (プリファレンス) を選択します。予測に使用されている既存のデータベースを削除するには、「**すべて削除**」をクリックしてください。「**スペクトル技術の制限**」の選択を目的の核に変更し、関連するデータベースを追加するために、「**すべて追加**」をクリックしてください。

NMR 予測の設定ダイアログが開きます。以下の例では、1 NMR のデータベースが追加されました：



The screenshot shows the 'NMR 予想基準ダイアログ' (NMR Prediction Settings) dialog box. It includes a table of databases to be added, search parameters, and spectral generation options.

インターネットデータベースは選...	対象スペクトル(L):	¹ H NMR	リフレッシュ(R)
Reference	名称	レコード	DB コー
User DB	1H NMR - Organic Compound...	157469	NY2X
	1H NMR - Organic Compound...	37842	NY3X
	1H NMR - Organic Compound...	5000	NBX
	1H NMR - Sadtler - Wiley	12000	HBX
	1H NMR - Sadtler Chemical S...	56843	NOX
	1H NMR - Sadtler NIOSH Pock...	116	NHX
	Multi-Technique Sadtler Demo...	37	DEMO:
	NMR - Sadtler Metabolites -	528	MFT3X

Buttons: **すべて追加(D)**, **追加(A)**, **削除(R)**, **すべて削除(E)**

設定

核種(N): ¹H

サーチ パラメータ

サーチするシェル レベルの下限(L): 1

異常値を棄却(RSMCで設定):

棄却処理を行う最小データ数: 10

閾値(RMSDの倍数)(X): 3

スペクトル生成オプション

推定するシフト値の範囲(ppm):

高磁場側(W): 0 ppm

上限(H): 18 ppm

選択されているデータベース(C):

- 1H NMR - Organic Compounds (Comprehensive) - Wiley
- 1H NMR - Organic Compounds (Comprehensive) Part 2 - Wiley
- 1H NMR - Organic Compounds 1 - Wiley
- 1H NMR - Sadtler - Wiley

3	<p>以前の予測が開かれた状態で、「編集」メニューから「予測の繰り返し」を選択するか、標準ツールバーの「予測の繰り返し」アイコンをクリックしてください。</p> 	<p>選択した核に対して予測が再計算されます。</p>
---	--	-----------------------------