

T141603

การศึกษาค่าเคมีคัลชิฟท์ของอะตอมคาร์บอน-13 ในหมู่แอลเคน หมู่แอลคีน หมู่แอลไคน์ ซึ่งเป็นกลุ่มโมเลกุลไฮโดรคาร์บอน โดยใช้ทฤษฎีการประมาณทางออร์บิทัลเชิงโมเลกุลในระดับของ INDO ด้วยวิธีการ SOS กับ FPT พบว่าค่าเคมีคัลชิฟท์ที่ได้จากการคำนวณเทียบกับผลจากการทดลองมีความสัมพันธ์กันแต่มีค่าแตกต่างกันและพบว่า SOS ไม่สามารถแยกความแตกต่างของค่าเคมีคัลชิฟท์ระหว่างโมเลกุลได้ดีนัก ค่าพารามิเตอร์ที่คำนวณได้จากการจับพันธะเพื่อสร้างเป็นโมเลกุลไฮบริไดเซชันแบบต่างๆ มีอิทธิพลมากกว่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่อยู่บนอะตอมโดยค่าเคมีคัลชิฟท์ที่เกิดจากผลของไฮบริไดเซชันเรียงตามลำดับจากมากไปน้อย คือ $sp^2 > sp > sp^3$ จึงได้เปลี่ยนค่าตัวแปรเสริมของพันธะและค่าการซ้อนทับยังผลในพันธะซิกมาและพันธะไพในการประมาณการ INDO/S พบว่าค่าสัมประสิทธิ์ของสหสัมพันธ์ใหม่มีค่าดีขึ้นเป็น 0.9883 จากเดิมที่ใช้โมเลกุลชุดเดียวกันมีค่าเท่ากับ 0.9243 โดยการเปลี่ยนแปลงค่าพารามิเตอร์ทั้งสองชนิดจะให้ผลในการคำนวณค่าเคมีคัลชิฟท์ที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองมากขึ้นและสามารถแยกความแตกต่างในโมเลกุลไฮบริไดเซชันแบบต่างๆ ได้ยกเว้นในกลุ่มของเมทิล

TE141603

The ^{13}C chemical shifts in alkane, alkene, alkyne of hydrocarbon molecules are studied by means of the sum over state and the finite perturbation method together with a semi-empirical INDO molecular orbital method. The calculated values of chemical shifts and observed values from the experiments, gave a linear relationship but the values were different. In the SOS method, we could not distinguish the chemical shifts among molecules. We found that the paramagnetic shielding term calculated depended on the molecular bonding which forms the states of the hybridization, more than the density of the electron on the considered atoms. The comparative chemical shifts values which result from hybridization in descending order is $sp^2 > sp > sp^3$. By a small revision of the bonding parameters and effective overlap in sigma and pi bondings in the INDO/S calculation, the new correlation coefficient is found to be 0.9883 compared with the value of 0.9243 of the old parameters in the same molecules. By changing both terms, the calculated results show fairly good agreement with the observed values. We can distinguish the chemical shifts among molecules in the states of the hybridization except those in the methyl groups.