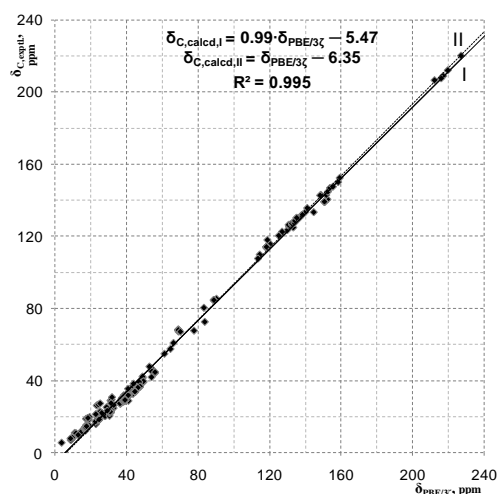
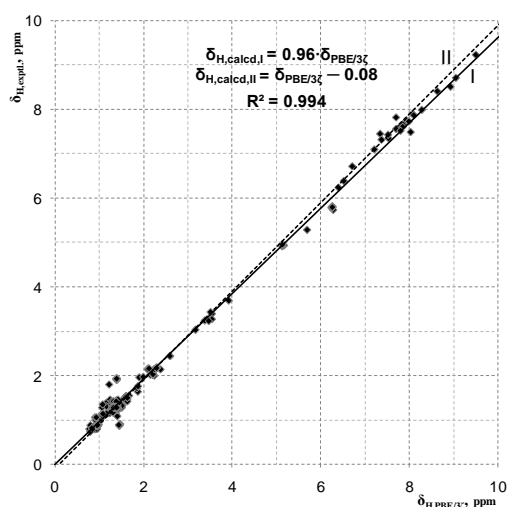


# ЭМПИРИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ ДЛЯ РАСЧЁТА ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ GIAO В ПРИБЛИЖЕНИИ PBE/3z

**Е. Ю. Панкратьев, А. Р. Тулябаев, Л. М. Халилов**

*Учреждение Российской академии наук Институт нефтехимии и катализа РАН*

Проведён линейный регрессионный анализ зависимости рассчитанных методом GIAO в приближении PBE/3 $\zeta$  и экспериментальных значений химических сдвигов ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  модельных органических соединений различных классов. Предложены эмпирические уравнения  $\delta_{\text{H,calc}} = \delta_{\text{PBE/3}\zeta} - 0.08$  ppm и  $\delta_{\text{C,calc}} = \delta_{\text{PBE/3}\zeta} - 6.35$  ppm для теоретического описания экспериментальных величин химических сдвигов ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  органических соединений. Доверительные интервалы значений химических сдвигов ЯМР при доверительной вероятности 95% составляют  $\delta_{\text{H,calc}} \pm 0.35$  ppm для  $^1\text{H}$  и  $\delta_{\text{C,calc}} \pm 6.05$  ppm для  $^{13}\text{C}$ .



В тестовый набор соединений включили органические соединения различных групп: *n*-алканы, *изо*-алканы, терминальные *n*-алкены, терминальные *n*-алкины, ароматические углеводороды, незамещённые фуллерены, простые эфиры, кетоны, пятичленные гетероциклические соединения. Таким образом, набор пробных соединений охватывает наиболее часто встречающиеся в органической химии типы углеродных атомов (первичные, вторичные, третичные и четвертичные; при двойной и тройной связи; в ароматических кольцах; при гетероатоме N, O, S). Суммарный набор литературных экспериментальных значений химических сдвигов для ЯМР  $^1\text{H}$  составляет 263, а для  $^{13}\text{C}$  – 308.