

## บทคัดย่อ

จากผลการคำนวณ  $^1\text{H-NMR}$  chemical shifts ของเนวिरาฟีนในตัวทำละลายไดเมทิลซัลฟอกไซด์ ที่ถูกต้องด้วยวิธี MD-ONIOM2 งานวิจัยชิ้นนี้จึงได้คำนวณ  $^1\text{H-NMR}$  chemical shifts ของโมเลกุลเอมีนโดยทั่วไปในตัวทำละลายไดเมทิลซัลฟอกไซด์ เพื่อแสดงให้เห็นว่าวิธี MD-ONIOM2 สามารถที่จะใช้ได้อย่างมีประสิทธิภาพและมีความถูกต้อง

โมเลกุลเอมีนที่ใช้ในงานวิจัยได้แก่ aniline acetamide N-methylaniline และ valerolactam โดยที่ตัวถูกละลายเอมีนจะมีลักษณะเฉพาะที่แตกต่างกัน เช่น จำนวนโปรตอนที่วงไนโมเลกุลที่สามารถที่จะสร้างพันธะไฮโดรเจนกับตัวทำละลาย โดยผลจากการคำนวณได้ถูกเปรียบเทียบกับค่าจริงของ  $^1\text{H-NMR}$  chemical shifts ที่ได้จากการทดลอง การคำนวณทางควอนตัมในสภาวะแก๊ส และการคำนวณทางควอนตัมแบบ IEFPCM

**Keyword:** MD-ONIOM2  $^1\text{H-NMR}$  Solvent effect

## Abstract

MD-ONIOM2 has been previously used to model nevirapine in the polar solvent DMSO, accurately predicting the  $^1\text{H}$  NMR chemical shifts of all the protons, including the acidic amine proton that suffers significant deshielding due to hydrogen bonding. In this work, MD-ONIOM2 is shown to be a more generally applicable model by predicting the NMR shifts of four amines in DMSO solution with acceptable accuracy. The solutes N-methylaniline and valerolactam with a single acidic proton, and aniline and acetamide with two acidic protons were used, and the NMR predictions compared to experimental values. Gasphase models and IEFPCM are shown to not predict the acidic proton shifts well in comparison to MDONIOM2.

**Keyword:** MD-ONIOM2  $^1\text{H}$ -NMR Solvent effect