

## 2020年度 有機分析化学 第5回講義 Q&A

Q1. p9 右下に例示されている分子においてプロトンが非等価になるのはなぜですか？同じページの左のグリセリンはなぜ非等価になるのですか？

A1. 八員環部分が平面になる配座は安定ではなく、2つのメチレン  $\text{CH}_2$  が異なる角度で面外へずれるために非等価になります。グリセリンが非等価になる理由はここで即答はできませんが、両端の炭素に結合している水酸基同士が水素結合すると6員環を形成するため、比較的安定な水素結合を形成することで非等価になるのかもしれませんが。

Q2. p3 のブロモエタンのスペクトルにおいて  $\text{CH}_3$  の3重線の左のピークが高いのは何故ですか？

A2. p5 で説明したループ効果によるものだと考えられます。p5 で3 ppm 以上離れているシグナルどうしにループ効果が出ているため、p3 で2 ppm 以下の差の2つのシグナルどうしにループ効果が出ても良いと考えています。

Q3. 論文の化合物情報を載せる際にシグナルの分裂について記述しますが、broad と分類されるか、singlet と分類されるかの判断は半値幅で決定しますか？

A3. 注目しているシグナルの半値幅が同じスペクトルに含まれる溶媒の残留プロトンの半値幅と比較して明確に大きいようであれば broad と記すべきかと思いますが、個人的には特別な閾値を持っているわけではありませんし、半値幅これ以上なら broad と記せという国際的なコンセンサスがあるわけではないです。

Q4. ケトエノール平衡では、積分比がそのまま溶液中の存在比になりますか？

A4. なります。ただし、正確な積分比をとるためには p8 に記したように  $^1\text{H}$  NMR の測定条件設定の際に relaxation delay を適切にセッティングしておく必要があります。