

# NMR解析のポイント

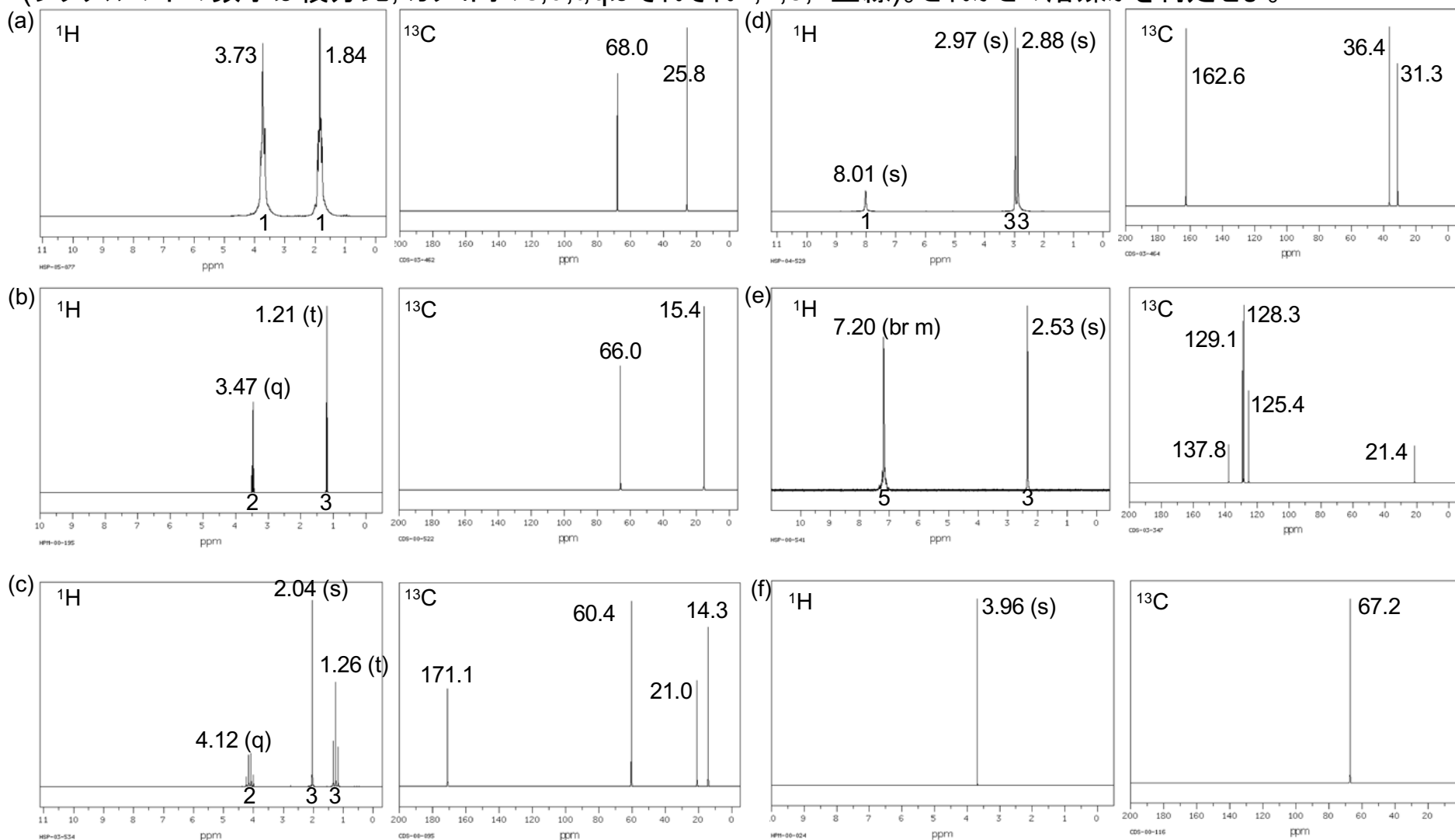
有機分析化学第9回(2020/5/14)

$^1\text{H}$  NMRスペクトル: 頭の中で覚えることは最小限に、傾向だけつかめ

$^{13}\text{C}$  NMRスペクトル: 全体を大きく区切ってイメージをつかめ

# NMR解析演習①

以下の $^1\text{H}$ および $^{13}\text{C}$  NMRスペクトル(いずれも $\text{CDCl}_3$ 溶液)はリストの有機溶媒のうちどれかのスペクトルである(シグナルの下の数字は積分比, カッコ内のs,d,t,qはそれぞれ1,2,3,4重線)。どれがどの溶媒かを判定せよ。



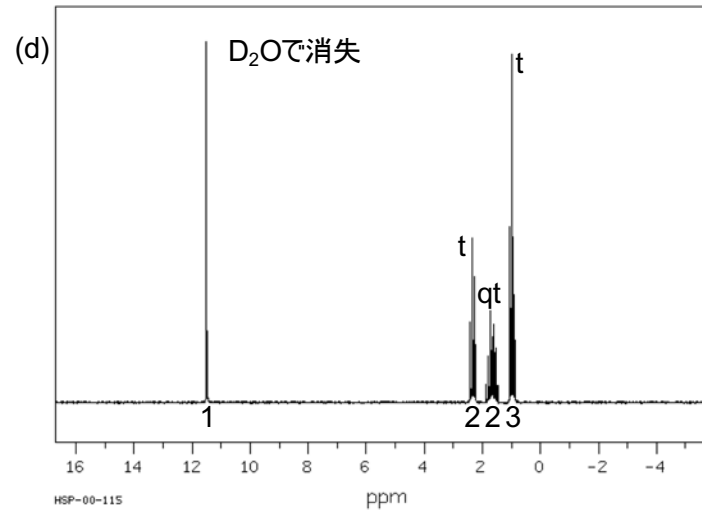
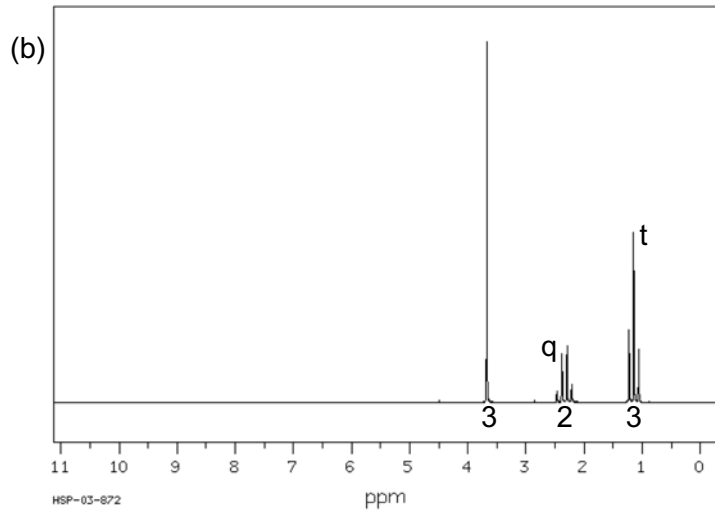
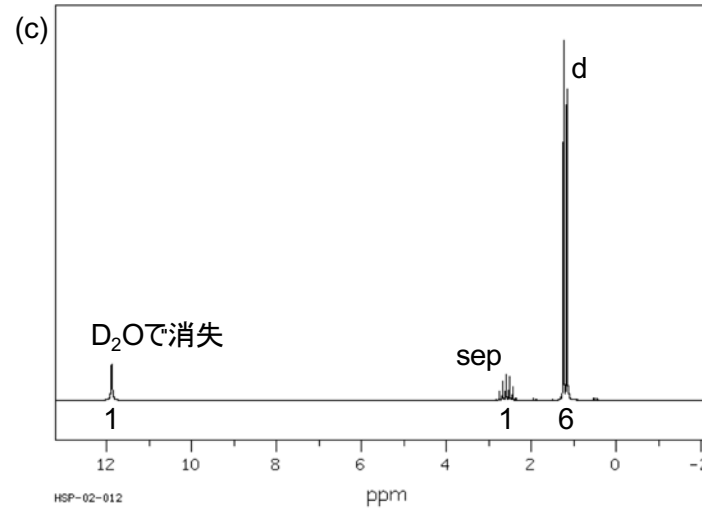
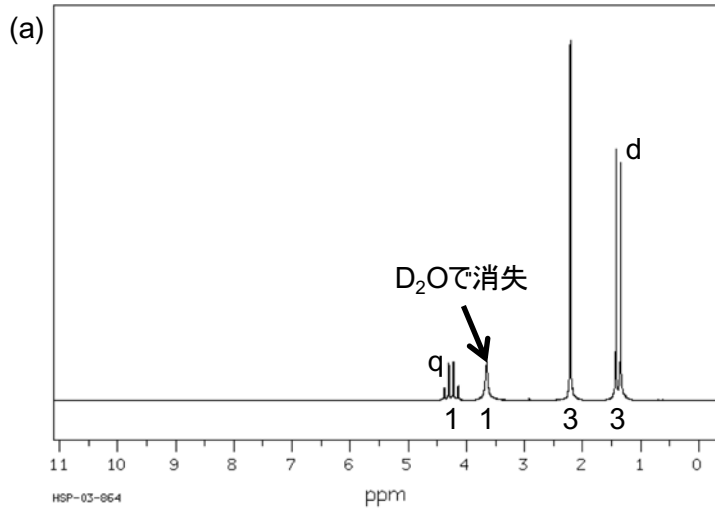
溶媒リスト

※ $^{13}\text{C}$  NMRは断りが無ければ通常はブロードバンドデカップリング測定

メタノール・エタノール・ベンゼン・ヘキサン・2-プロパノール・1-プロパノール・テトラヒドロフラン  
ジクロロメタン・ジエチルエーテル・トルエン・クロロホルム・アセトン・酢酸エチル・1,4-ジオキサン  
N,N-ジメチルホルムアミド・N,N-ジメチルアセトアミド

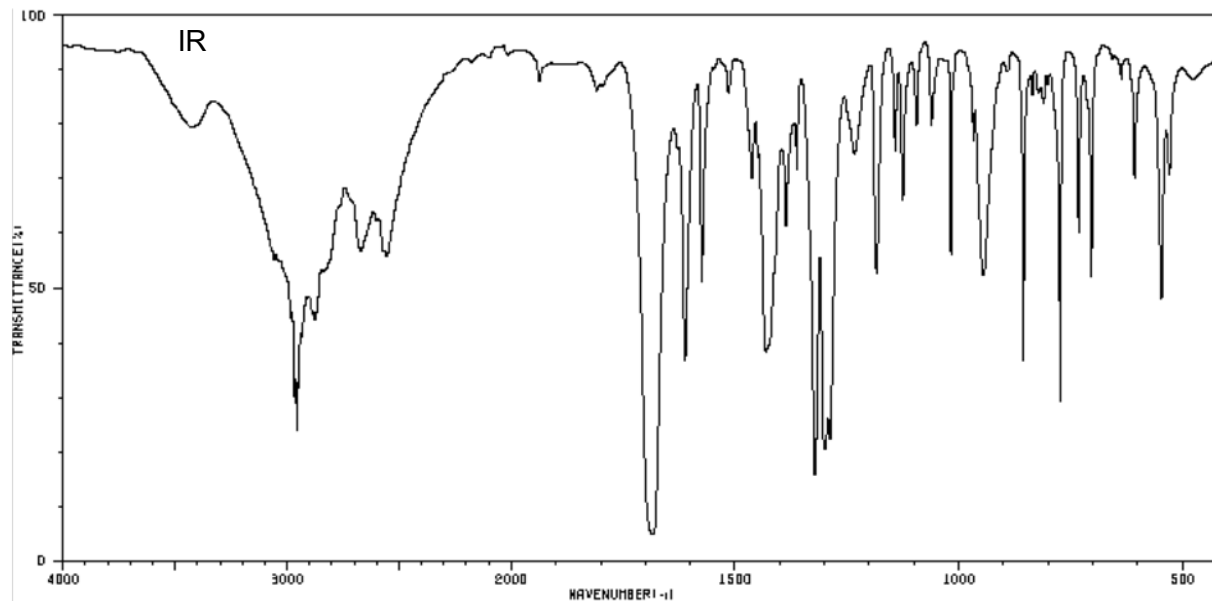
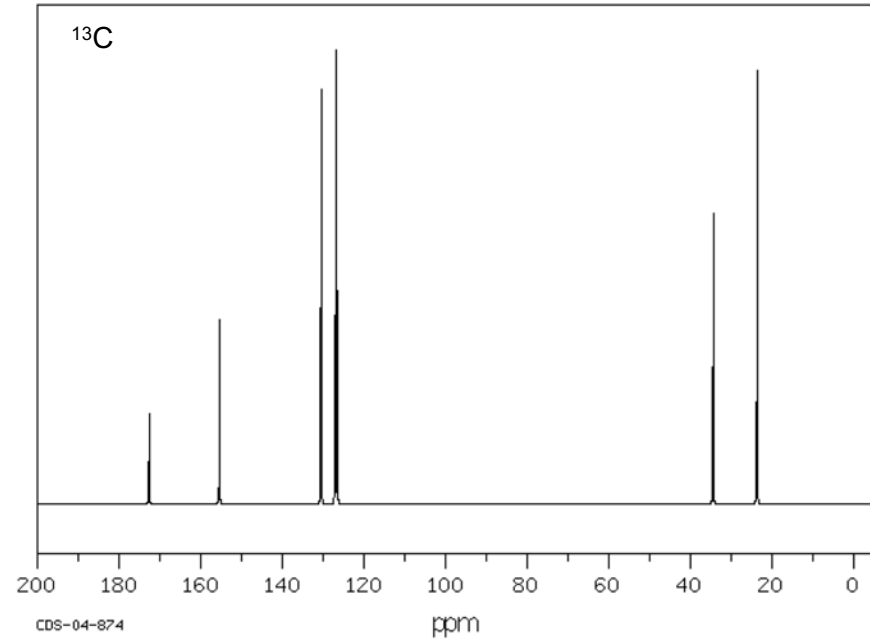
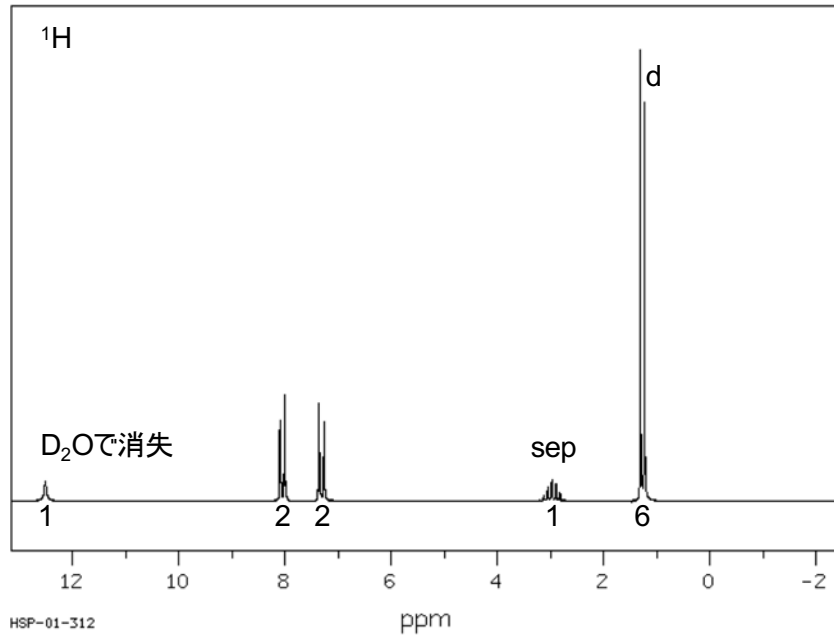
# NMR解析演習②

以下の $^1\text{H}$  NMRスペクトルは分子式 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ の鎖状化合物のものであり、いずれも $1700\text{-}1730\text{ cm}^{-1}$ にIRの吸収を持つ。全ての構造を決定せよ。なお、シグナルの下の数字は積分比、上の記号は多重度を示す。



# NMR解析演習③

以下の $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMRおよびIRスペクトルを示す分子量164の化合物の構造を決定せよ。

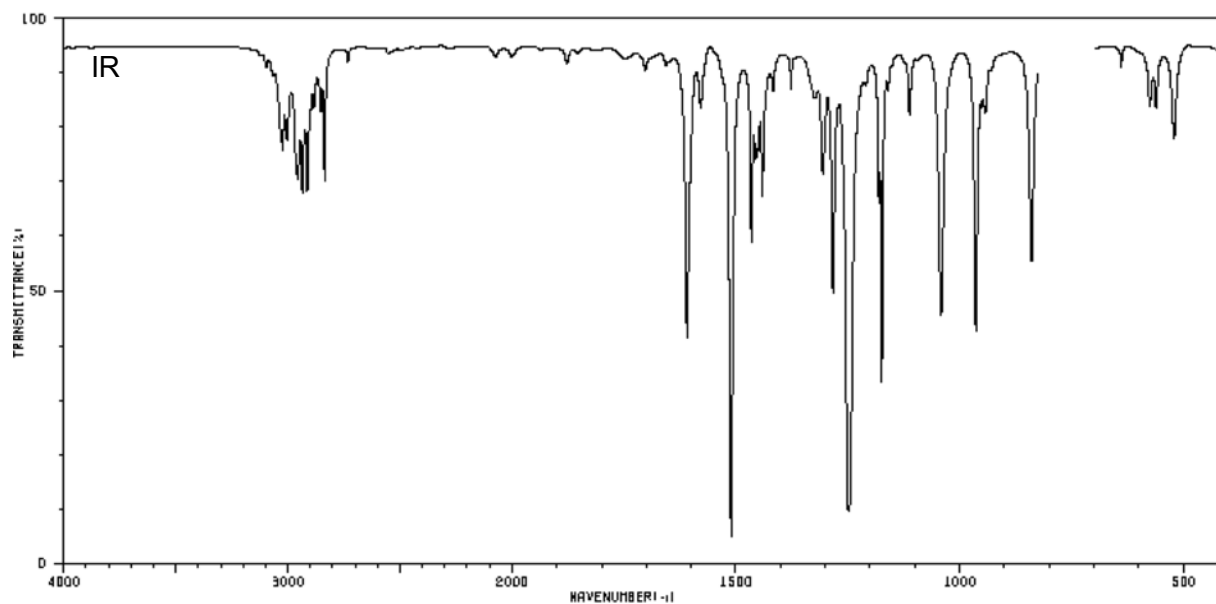
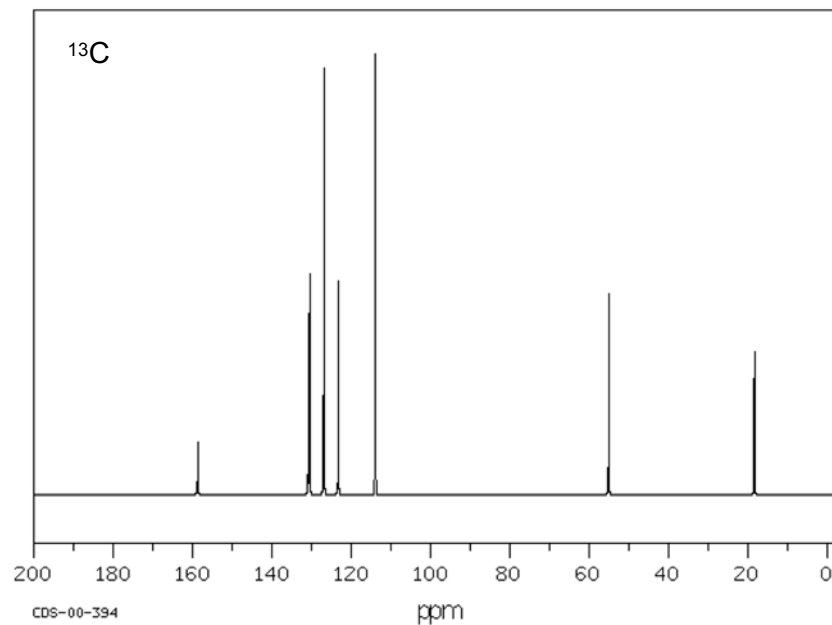
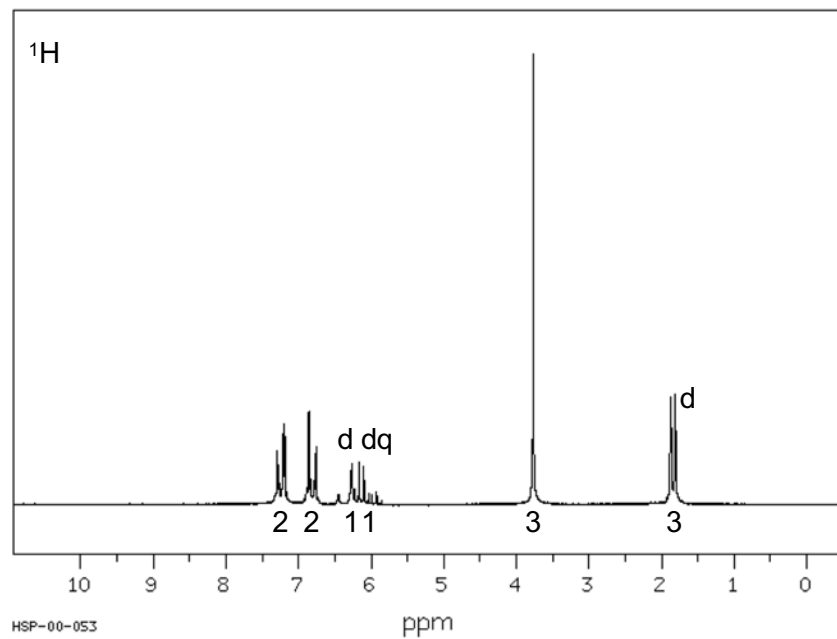


解く手順

- 1)  $^1\text{H}$ より水素の数を予測
- 2) IRの特性吸収1700 cm<sup>-1</sup>は何か?
- 3)  $^1\text{H}$ の12.5 ppmのシグナルは何か?
- 4)  $^1\text{H}$ の2.97(sep)と1.28(d)は何か?
- 5)  $^1\text{H}$ の8.05, 7.32は何か?
- 6)  $^{13}\text{C}$ の172.6は何か?
- 7) 全体の構造を決定せよ

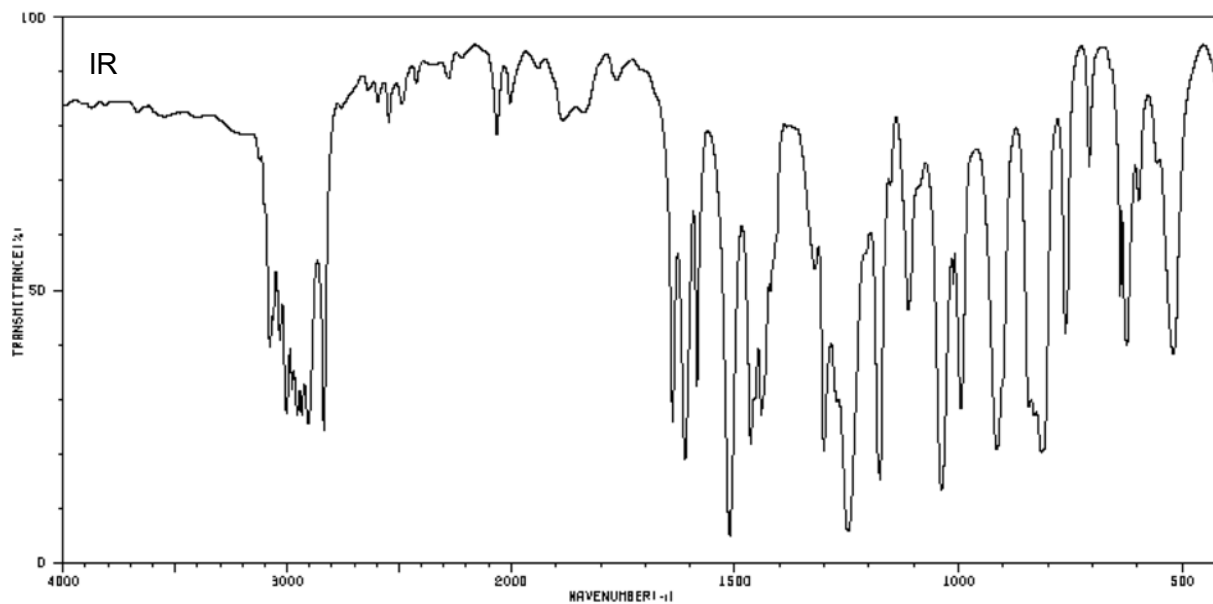
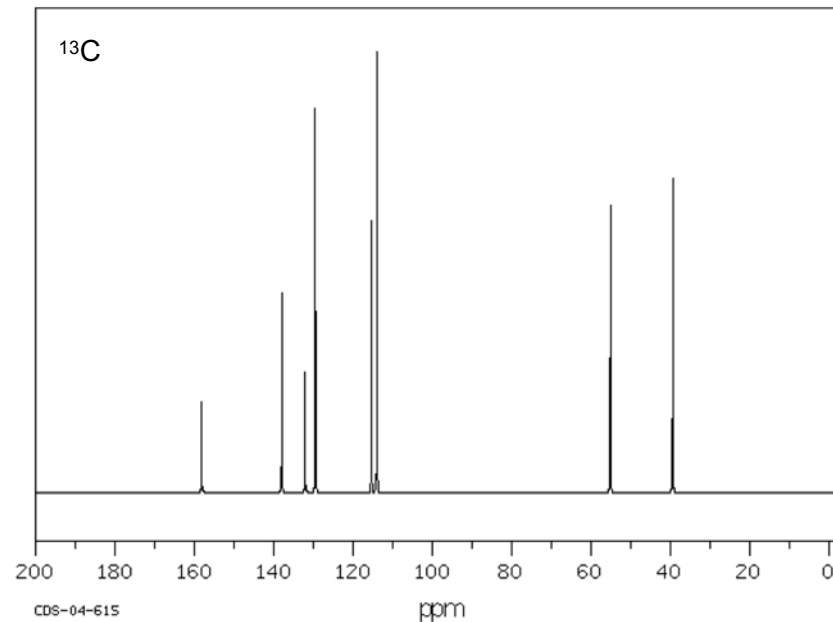
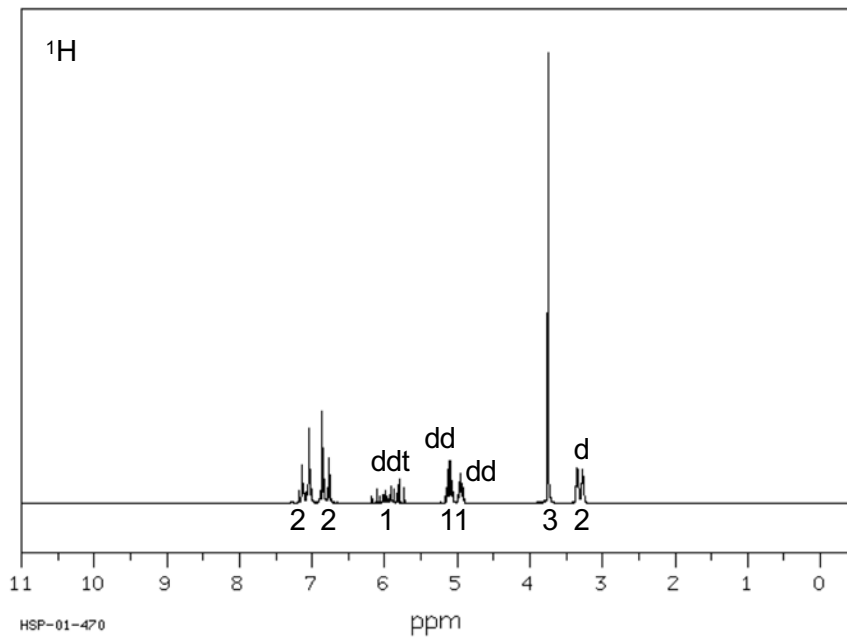
# NMR解析演習④

以下の $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMRおよびIRスペクトルを示す分子式 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}$ の化合物の構造を決定せよ。



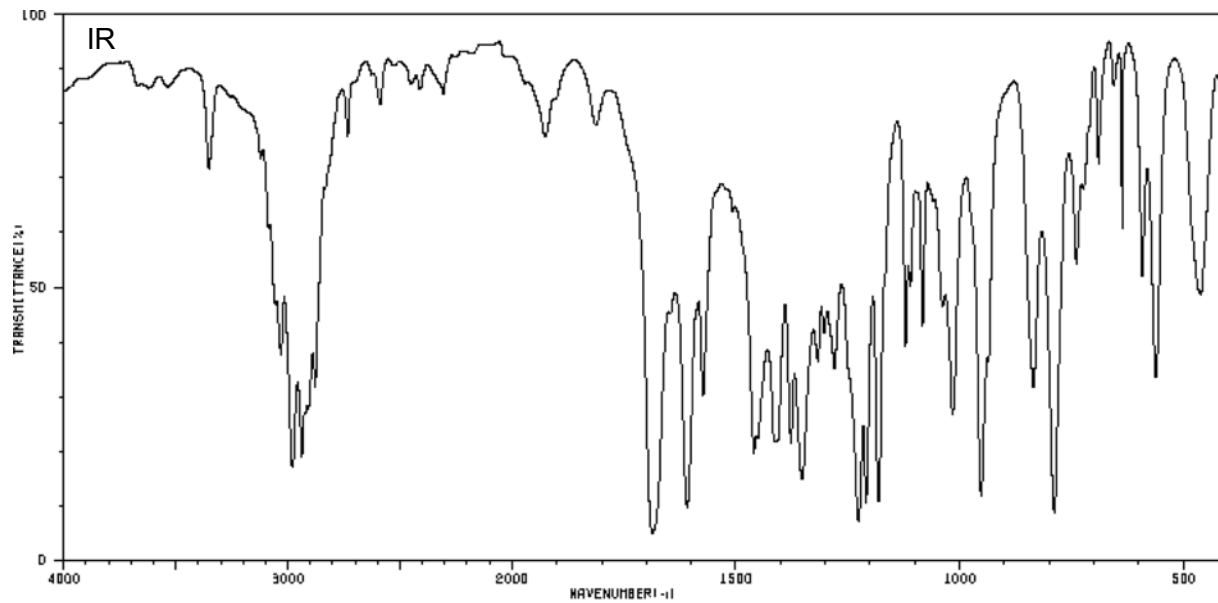
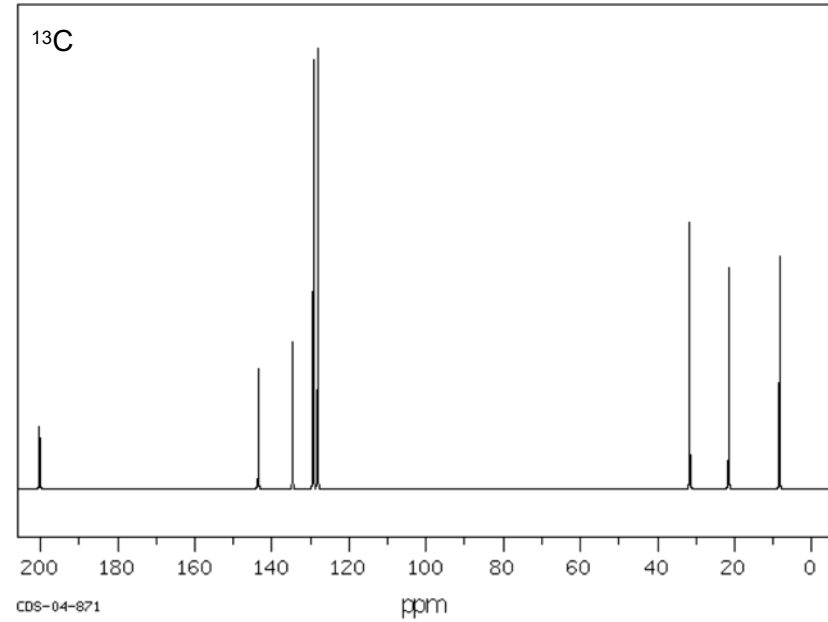
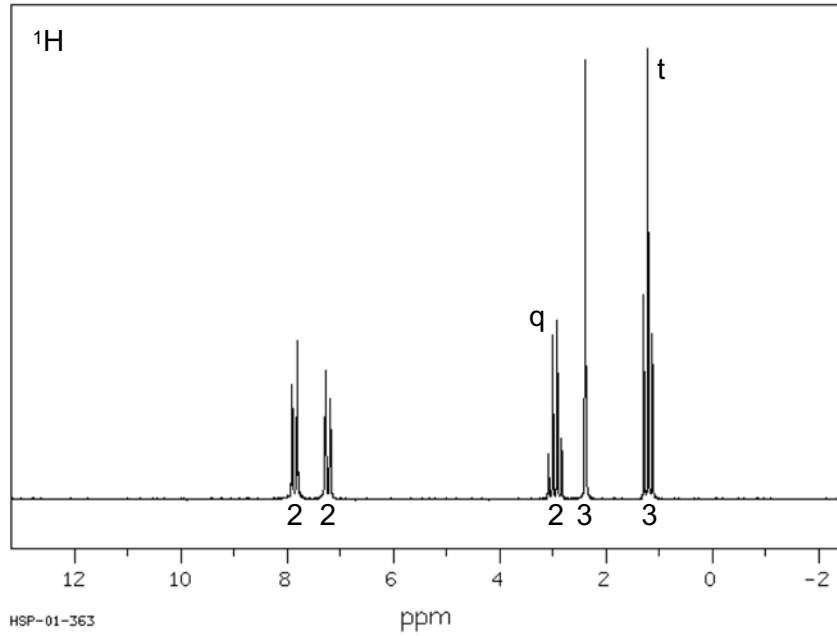
# NMR解析演習⑤

以下の $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMRおよびIRスペクトルを示す分子式 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}$ の化合物の構造を決定せよ。



# NMR解析演習⑥

以下の $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMRおよびIRスペクトルを示す分子式 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}$ の化合物の構造を決定せよ。



# NMR解析参考書類



化学同人「ベーシック有機構造解析」  
森田 博史, 石橋 正己 著  
ISBN: 9784759814569

多様な演習問題により実力がつくこと間違いなし