

NMR解析のポイント

有機分析化学第9回(2022/12/12)

^1H 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}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

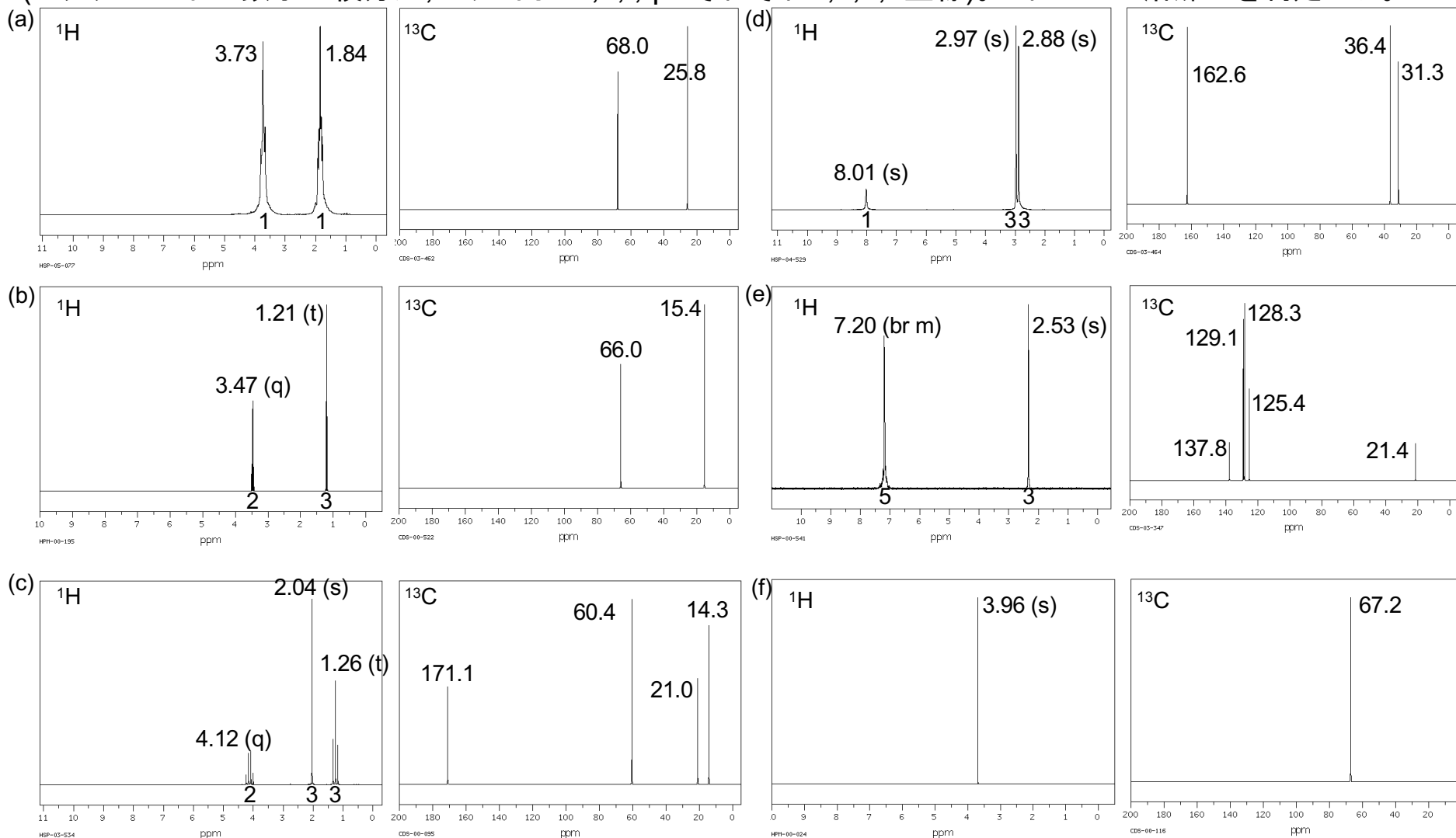
質問用フォーム
(後ほどまとめて回答します)



<https://forms.gle/xM8YRhLfjJG7azjU9>

NMR解析演習①

以下の ^1H および ^{13}C NMRスペクトル(いずれも 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(シグナルの下に数字は積分比, 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。



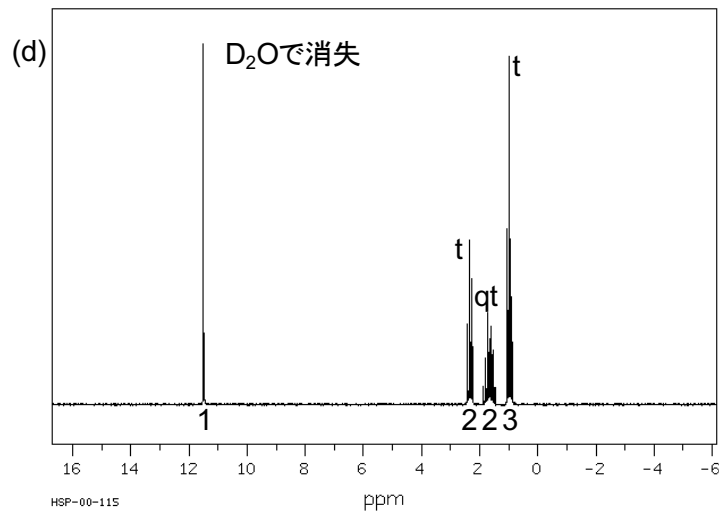
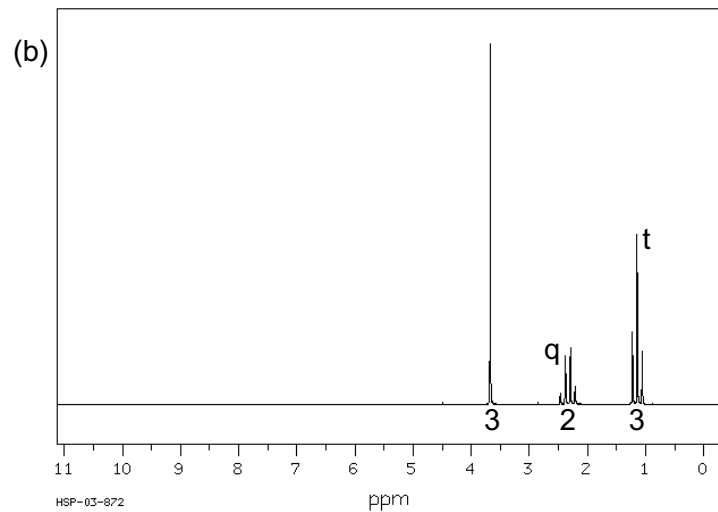
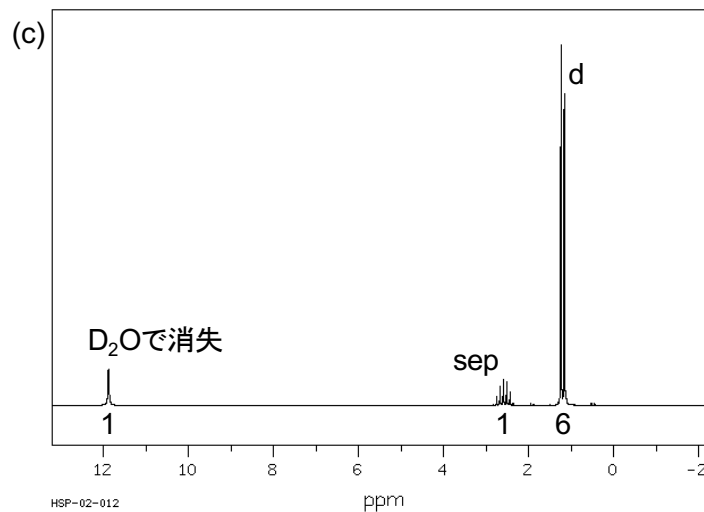
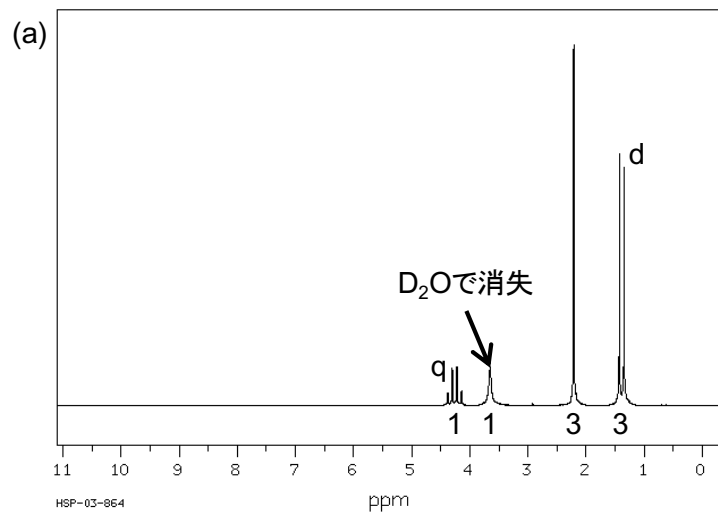
溶媒リスト

※ ^{13}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

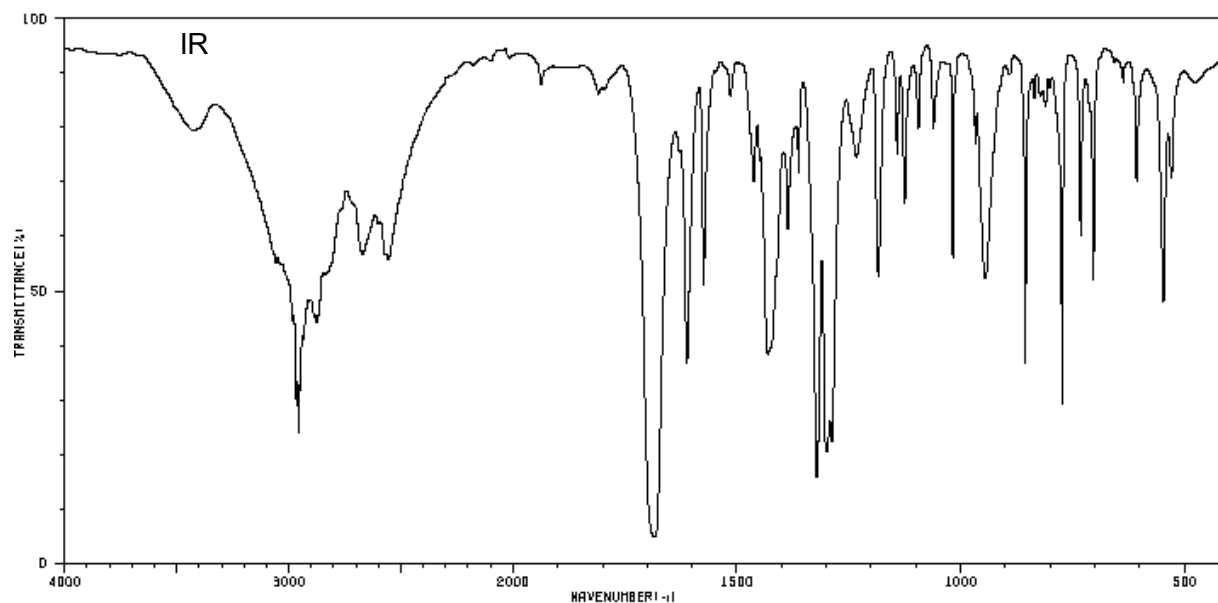
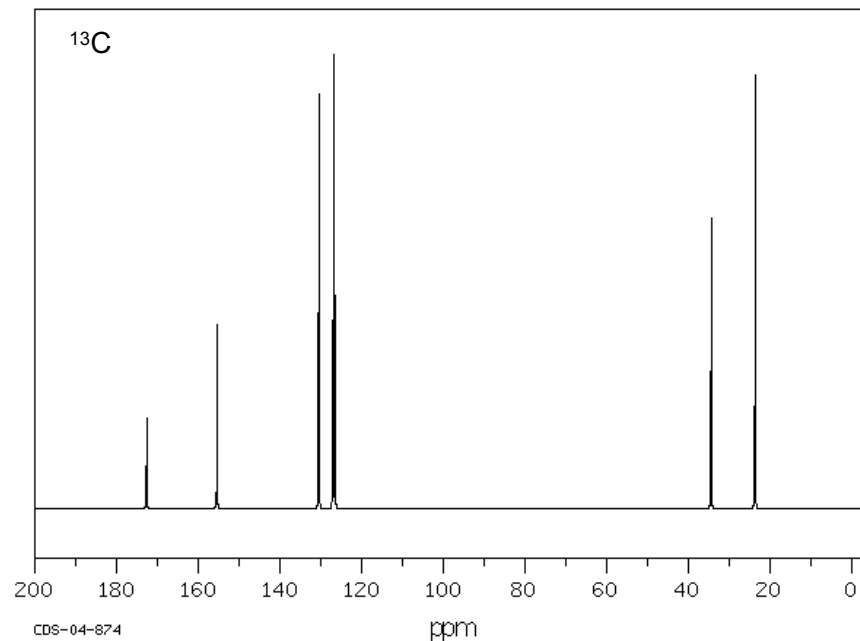
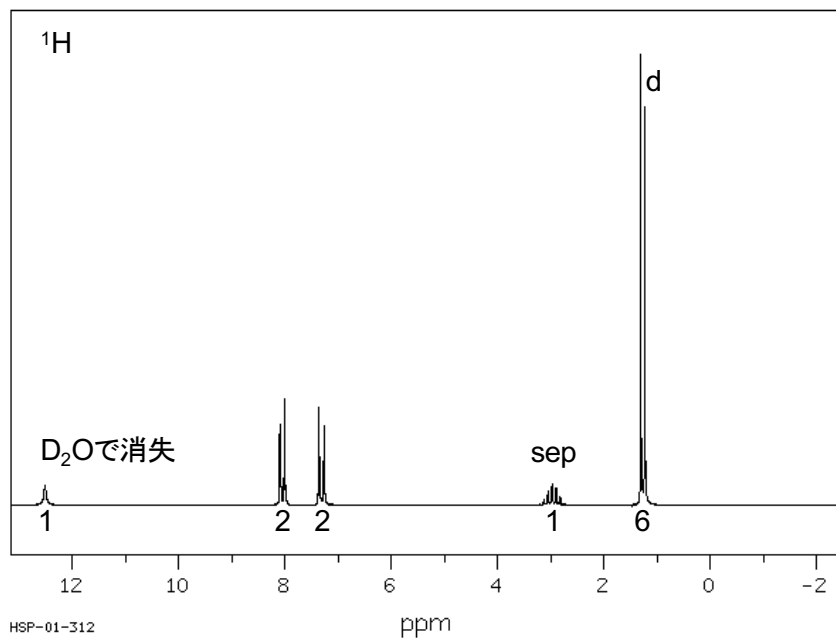
NMR解析演習②

以下の ^1H 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 ^1H , ^{13}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。

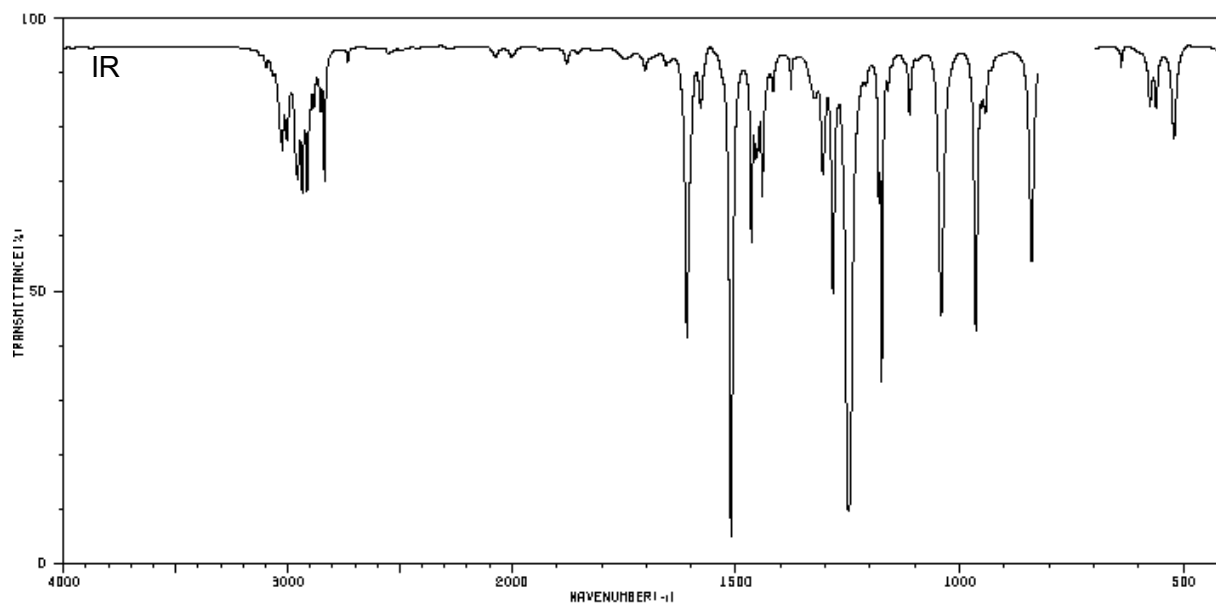
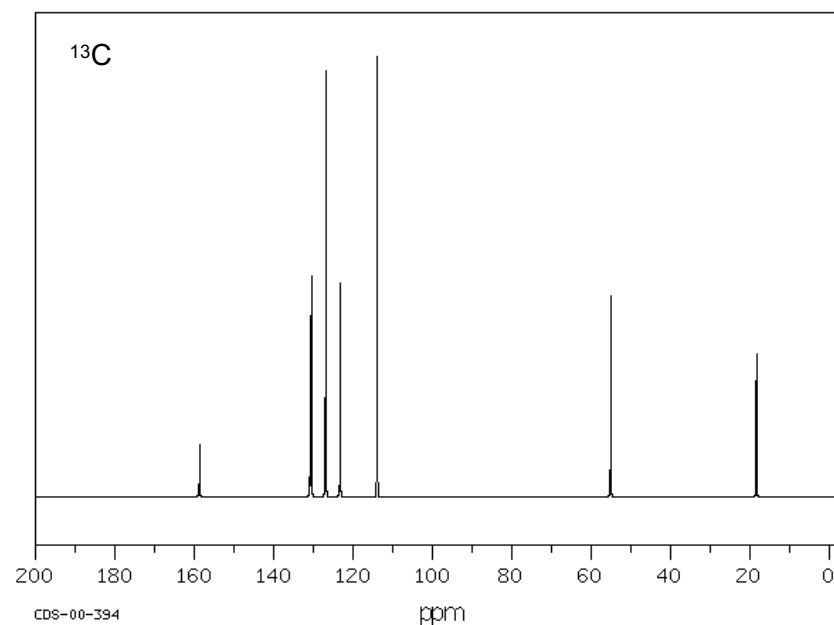
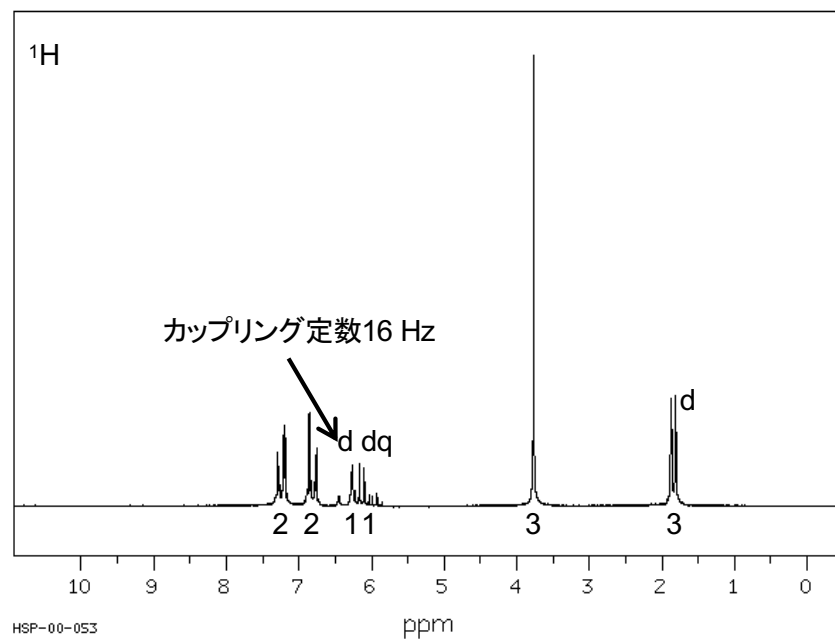


解く手順

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

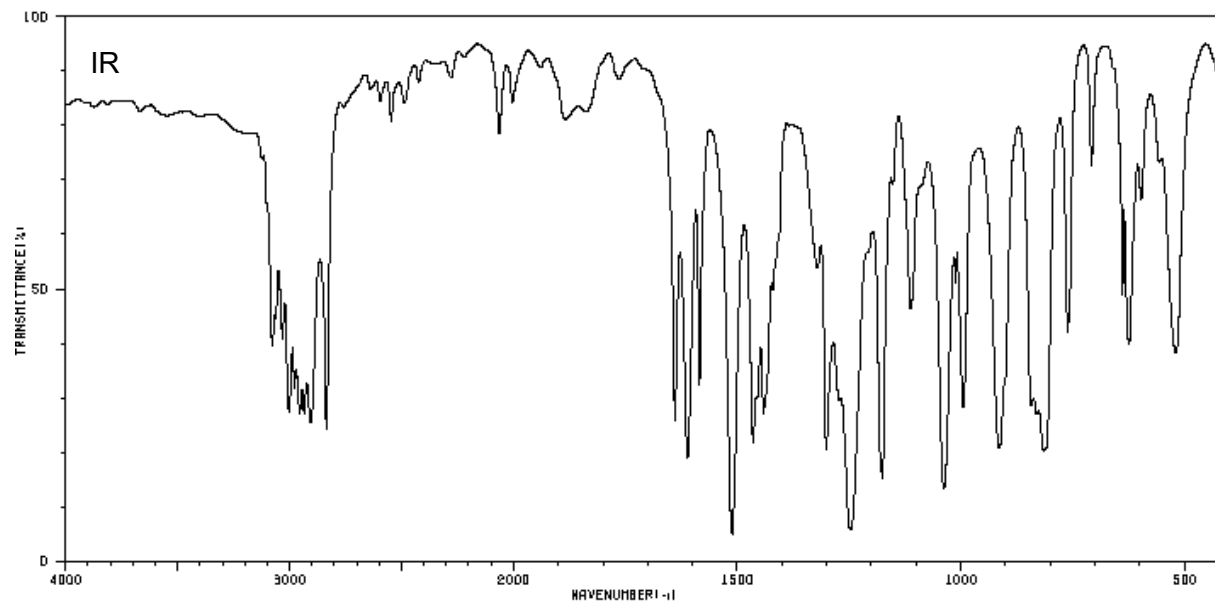
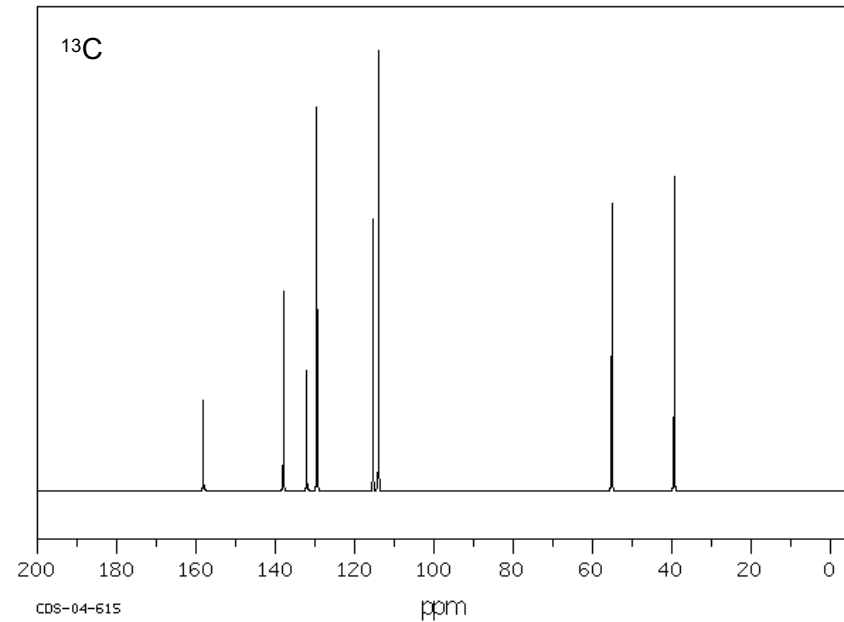
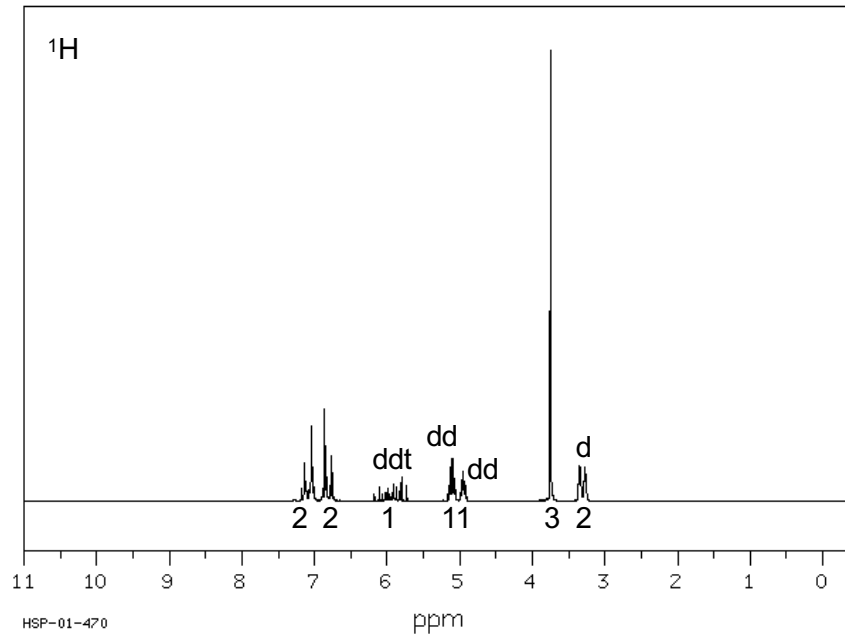
NMR解析演習④

以下の ^1H , ^{13}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。



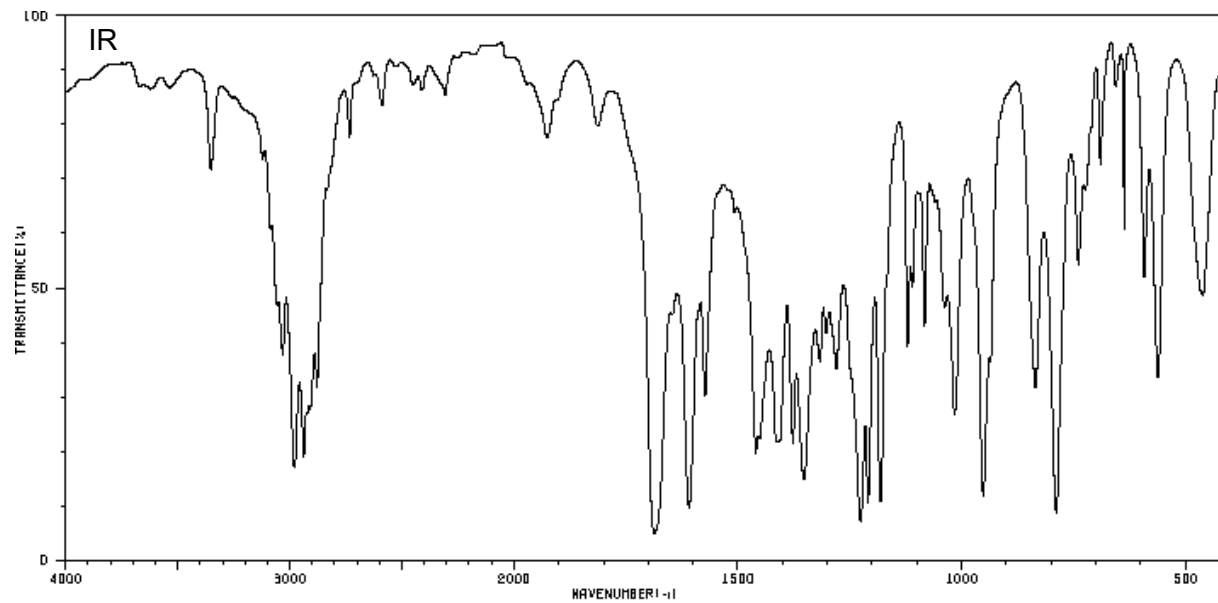
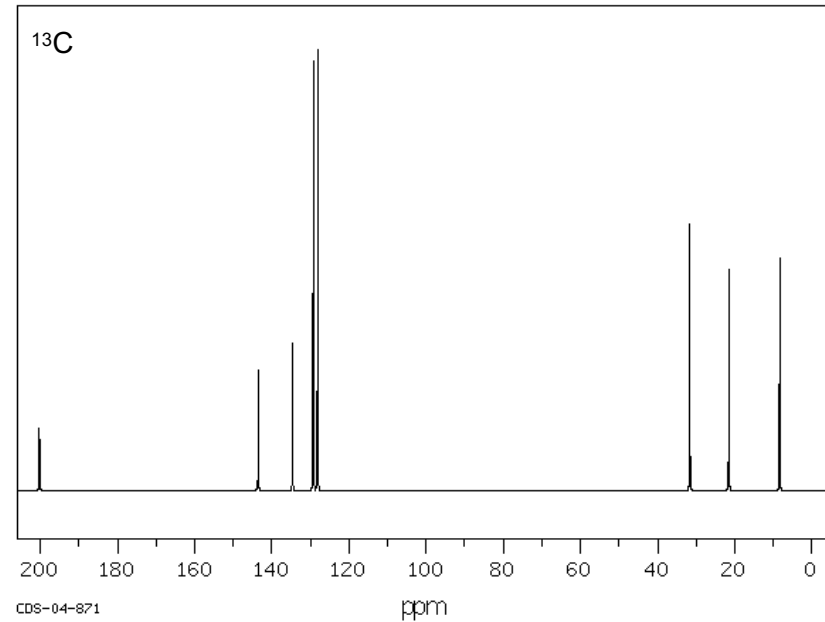
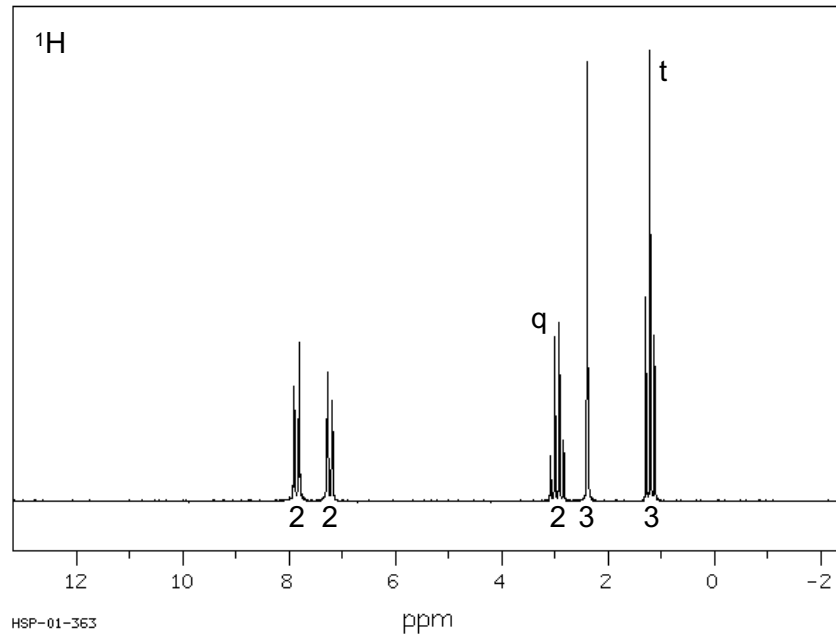
NMR解析演習⑤

以下の ^1H , ^{13}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 ^1H , ^{13}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