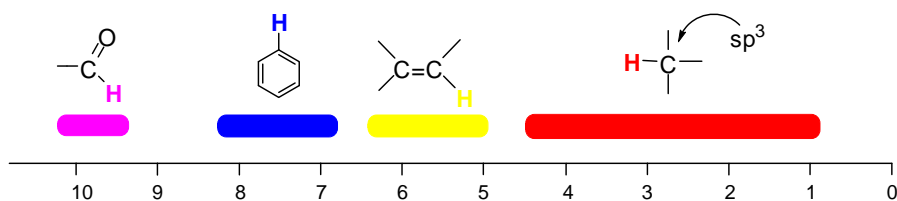


問題 26 NMR 分光分析

¹H-NMR 分光分析

¹H-NMR (¹H-核磁気共鳴法) は有機分子の水素原子を同定することを可能とする。そのシグナルの位置 (化学シフトといわれる) と分裂のパターンから、その水素原子のタイプと結合形態 (訳注: 水素原子同士が分子内で並んでいる順番のことを指していると思われる) を知ることができる。いくつかの特徴的な原子の共鳴シグナルの位置 (化学シフト) を下図に示す。 (訳注 同定: 原子が分子構造のどの部分に存在するかを決定すること)

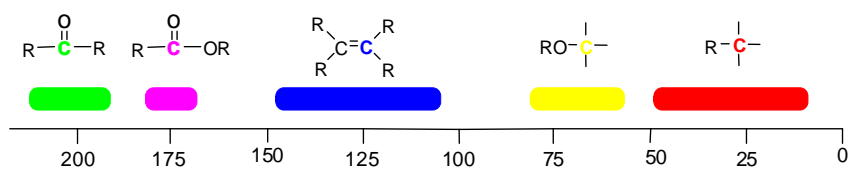


¹H-NMR Resonance ranges of typical functional groups in ppm relative to TMS

代表的な官能基の ¹H-NMR 共鳴シグナルの位置 (TMS: テトラメチルシランの化学シフトを基準にして ppm で表した)

¹³C-NMR 分光分析

¹³C-NMR 分光分析法も ¹H-NMR と同様に、有機分子中の炭素原子の同定を可能にする。与えられた分子の ¹³C-NMR にはその分子中の異なる種類の炭素原子と同数のシグナル (1 本線) が現れる。すべての種類の炭素 (第一級, 第二級, 第三級, および第四級) のシグナルの相対強度は同じとみなす。いくつかの特徴的な炭素原子の共鳴 (化学シフト) を下図に示す。



¹³C-NMR Resonance ranges of typical functional groups in ppm relative to TMS

代表的な官能基の ¹³C-NMR 共鳴シグナルの位置 (TMS: テトラメチルシランの化学シフトを基準にして ppm で表した)

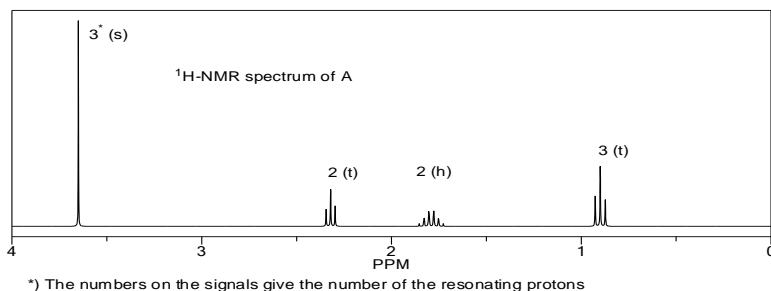
6 種類の互いに構造異性体である化合物 (**A**, **B**, **C**, **D**, **E** 及び **F**) がある. 分子式は $C_5H_{10}O_2$ であり, 以下の特徴を持つ.

- どの化合物も枝分かれしていない.
- これら異性体の赤外スペクトルには O-H の吸収は見られない.
- それぞれの化合物において一つの酸素原子は sp^2 -, もう一つは sp^3 -混成である.

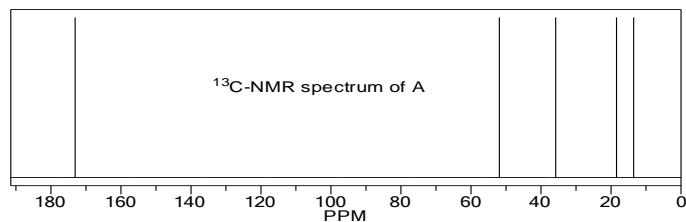
上に示した特徴を用いて, 下に示した 1H - と ^{13}C -NMR を解析し, すべての異性体の構造を決定しなさい.

略号: s = 一本線, d = 二本線, t = 三本線, q = 四本線, qui = 五本線, h = 六本線.

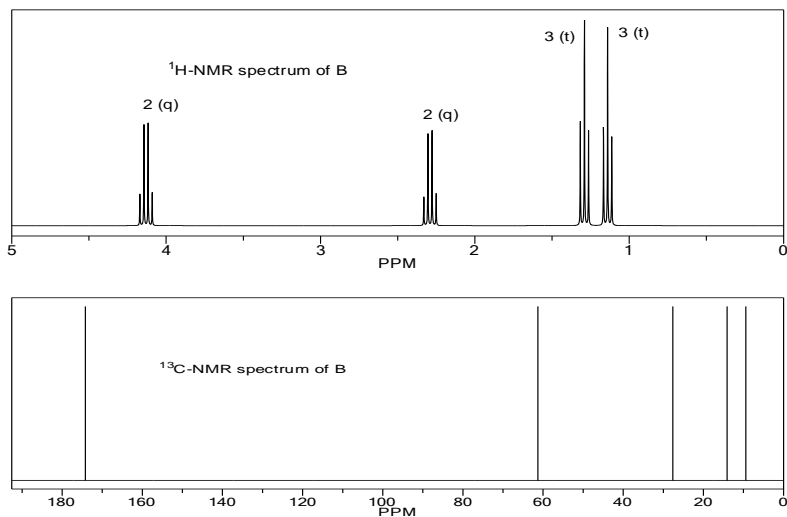
化合物 A



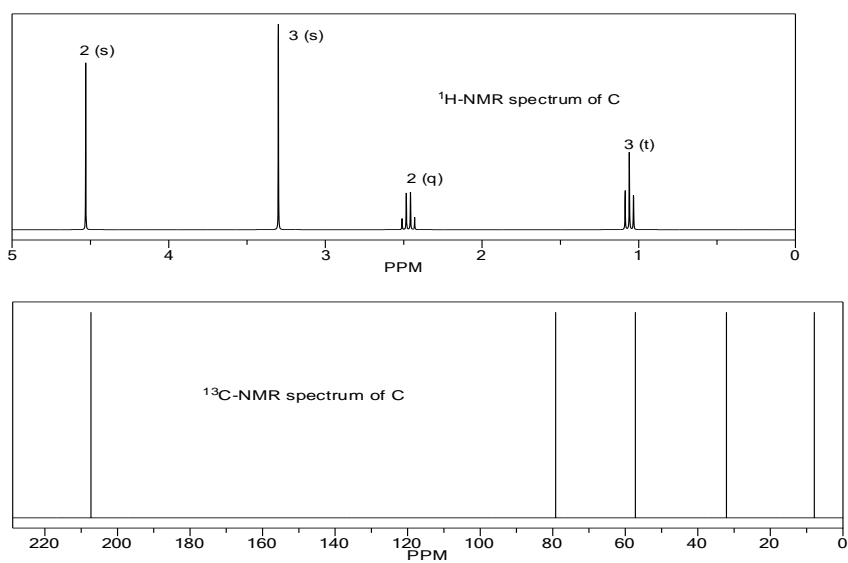
図の説明: シグナルの上の数字は共鳴している (訳注: このシグナルが示している) 水素原子の数を表す.



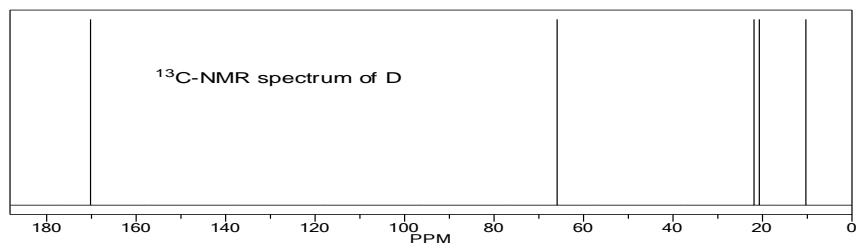
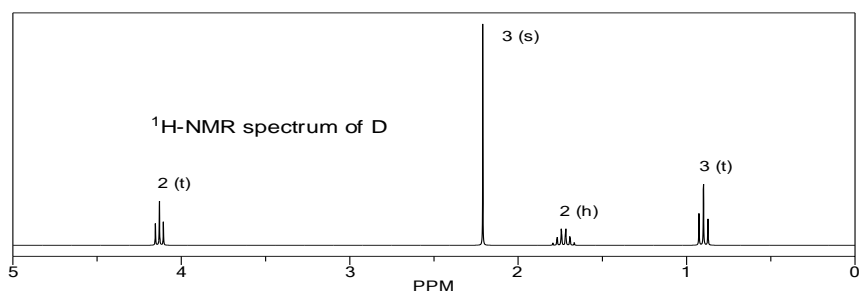
化合物 B



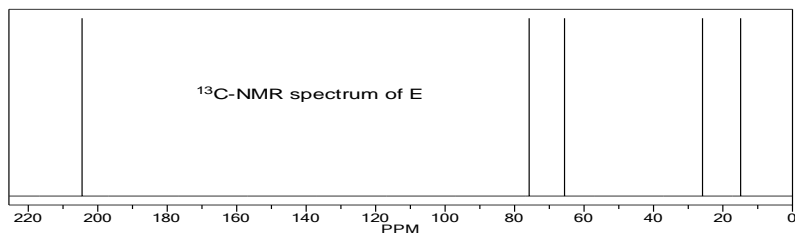
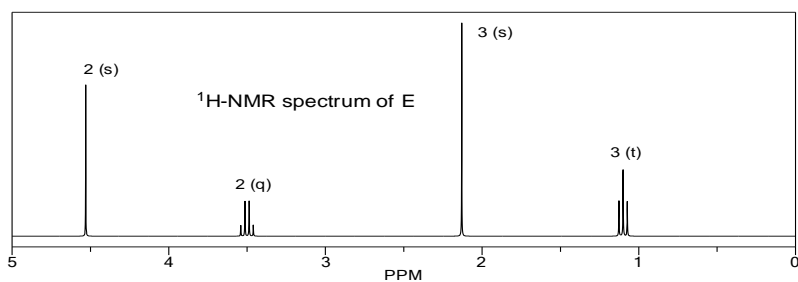
化合物 C



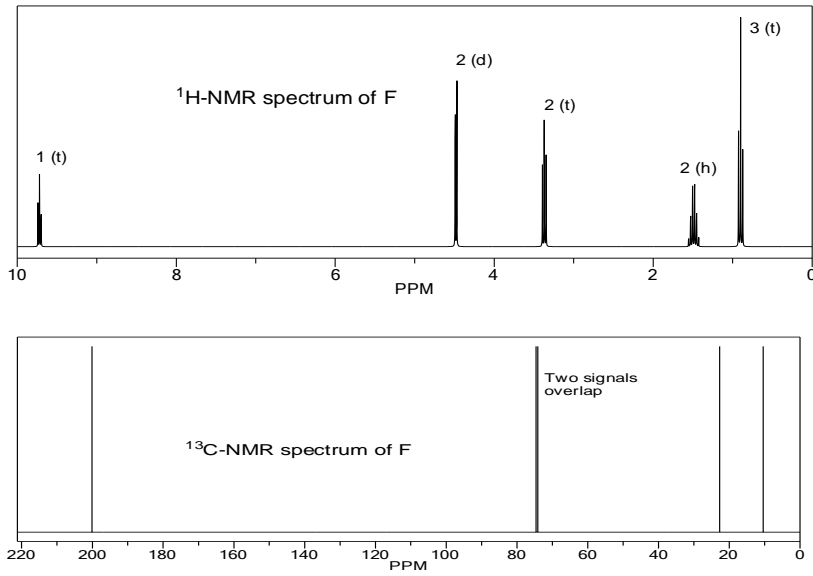
化合物 D



化合物 E



化合物 F



図中のコメント：二本のシグナルが重なっている