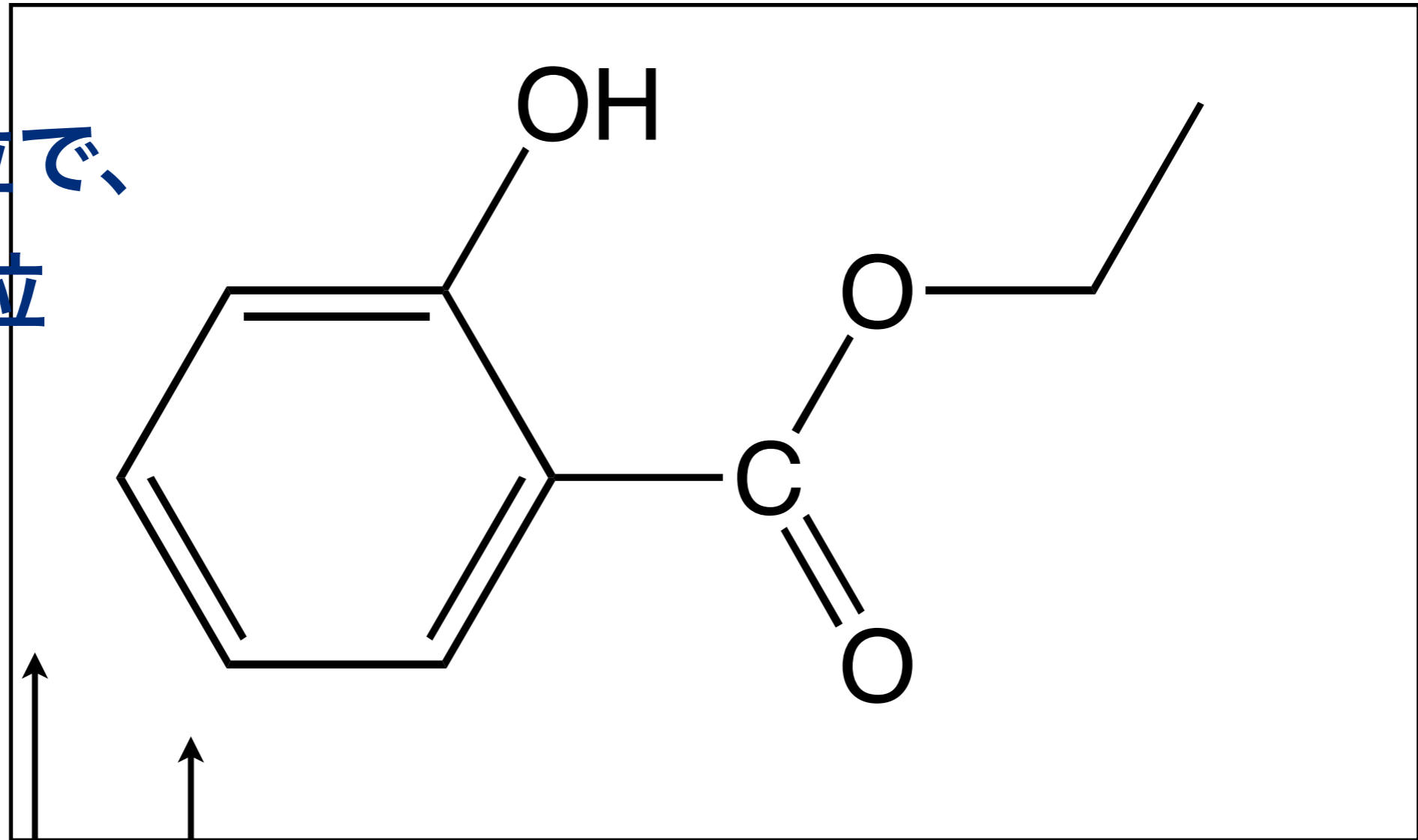


先週の問題の解答

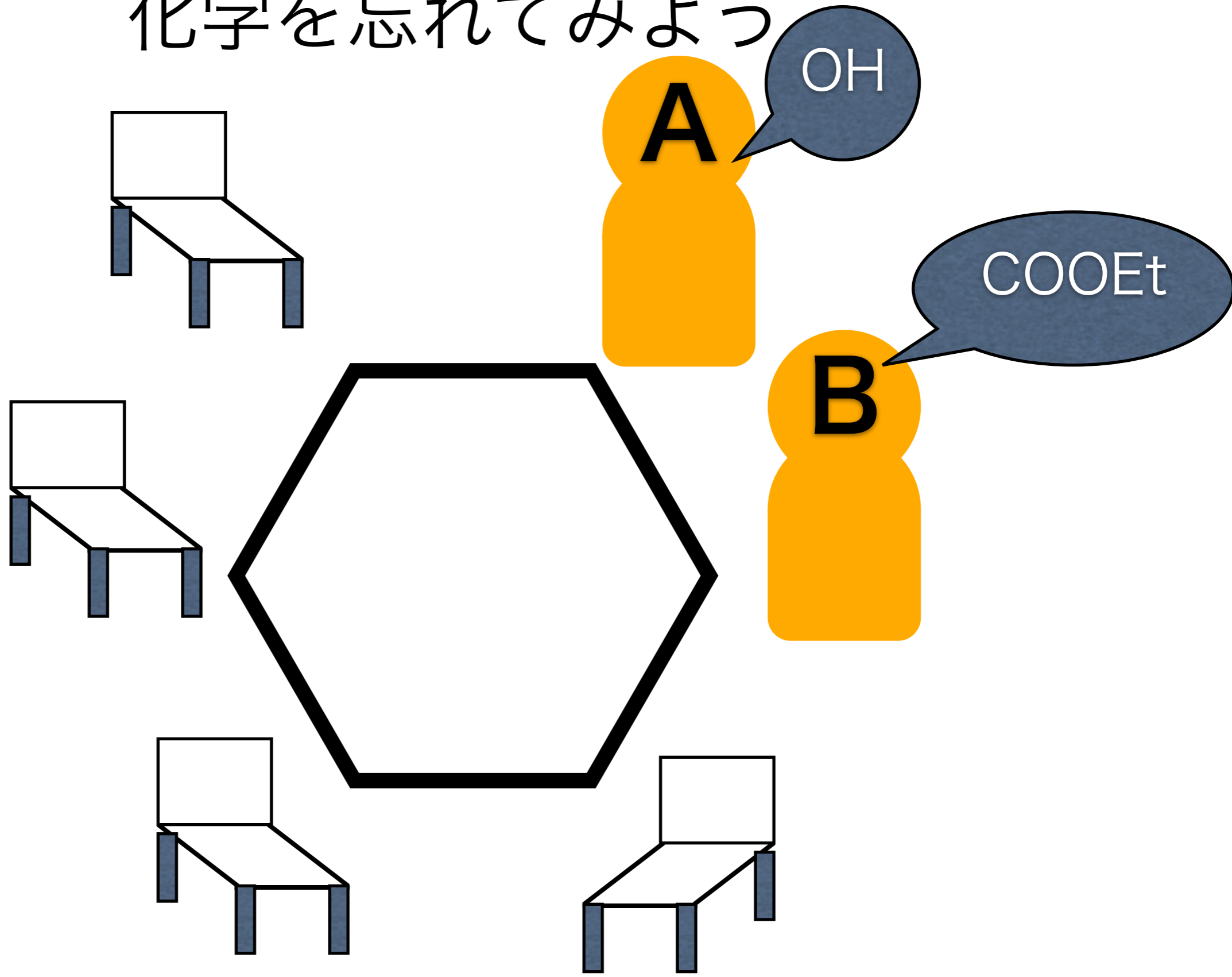
OHの*m*-位で、
C=Oの*p*-位



OHの*p*-位で、C=Oの*m*-位

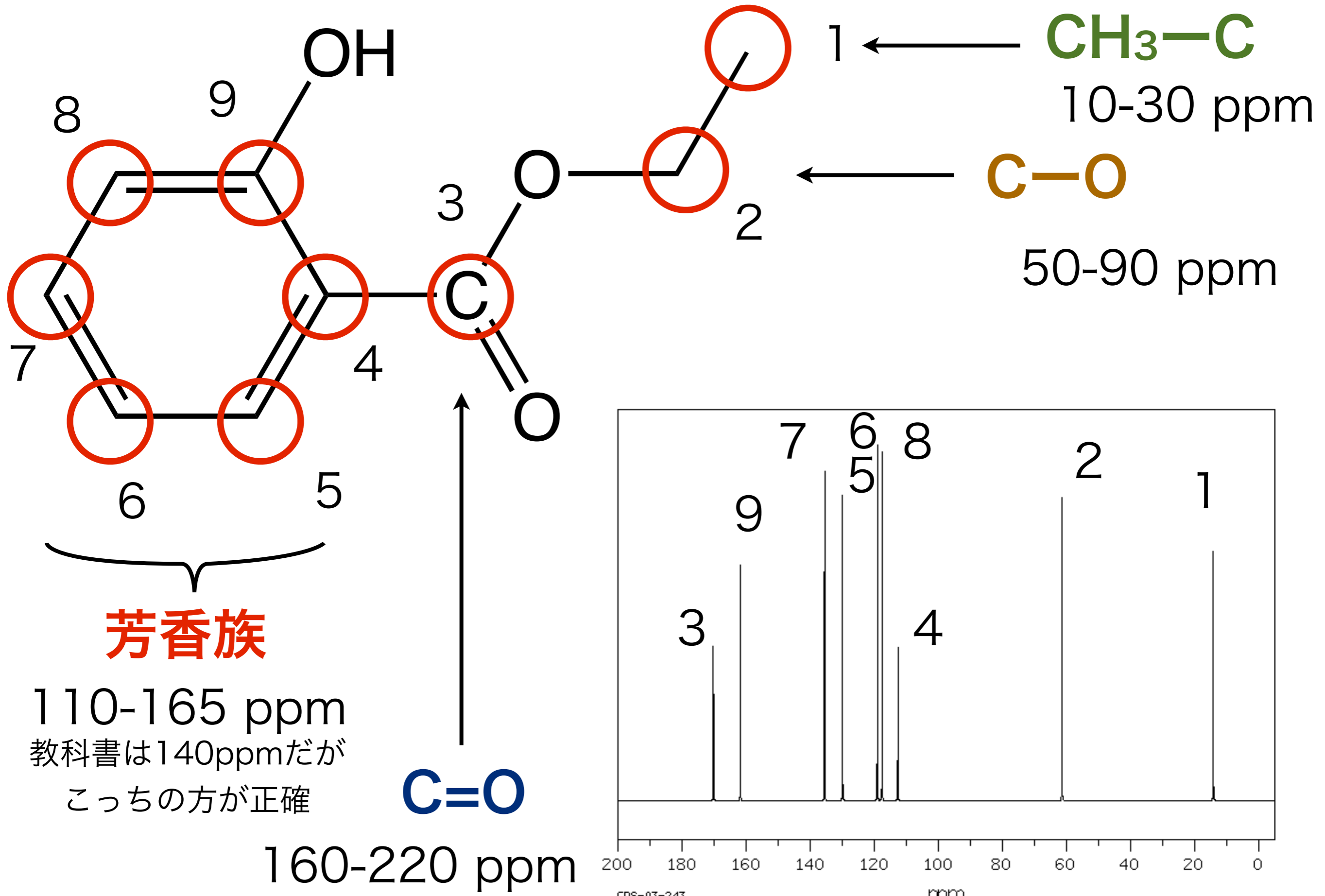
この2つが非等価
な理由は？

化学を忘れてみよう



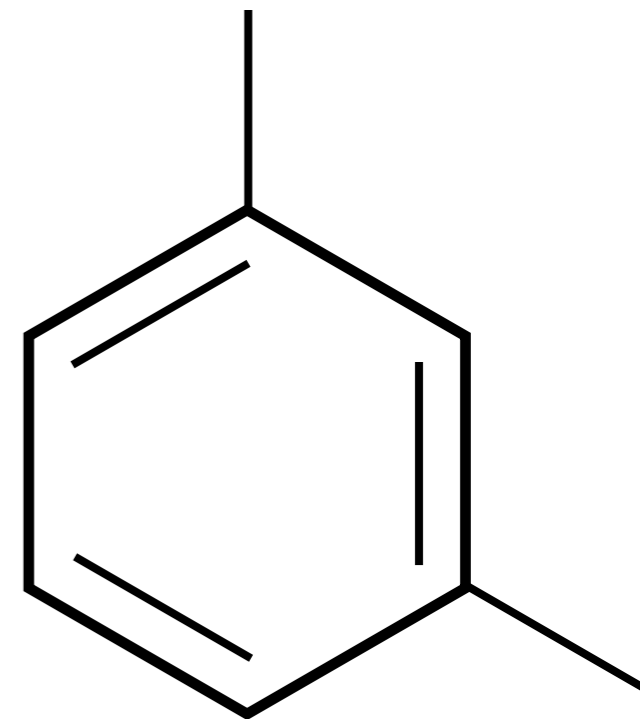
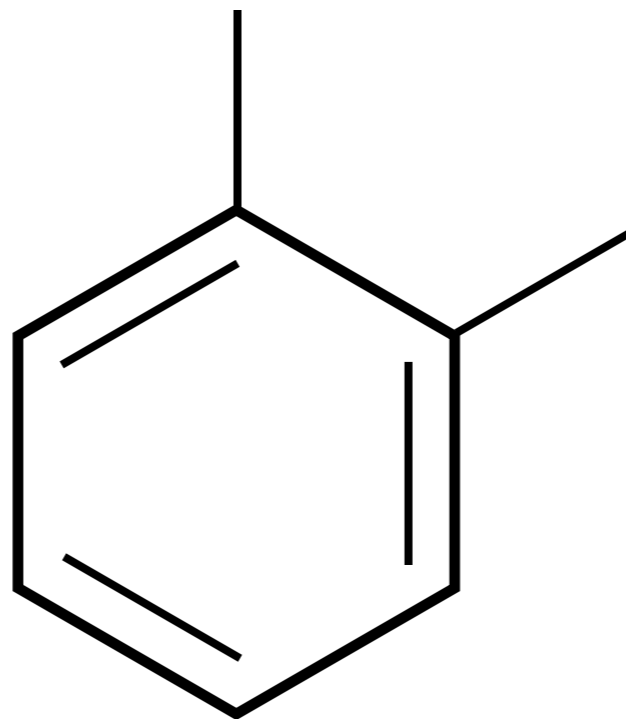
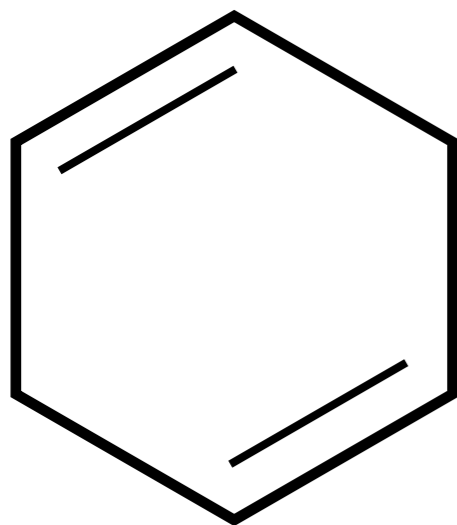
空いてる席のどこに座るか？ってどこでも一緒？

先週の問題の化合物の ^{13}C -NMRスペクトル³



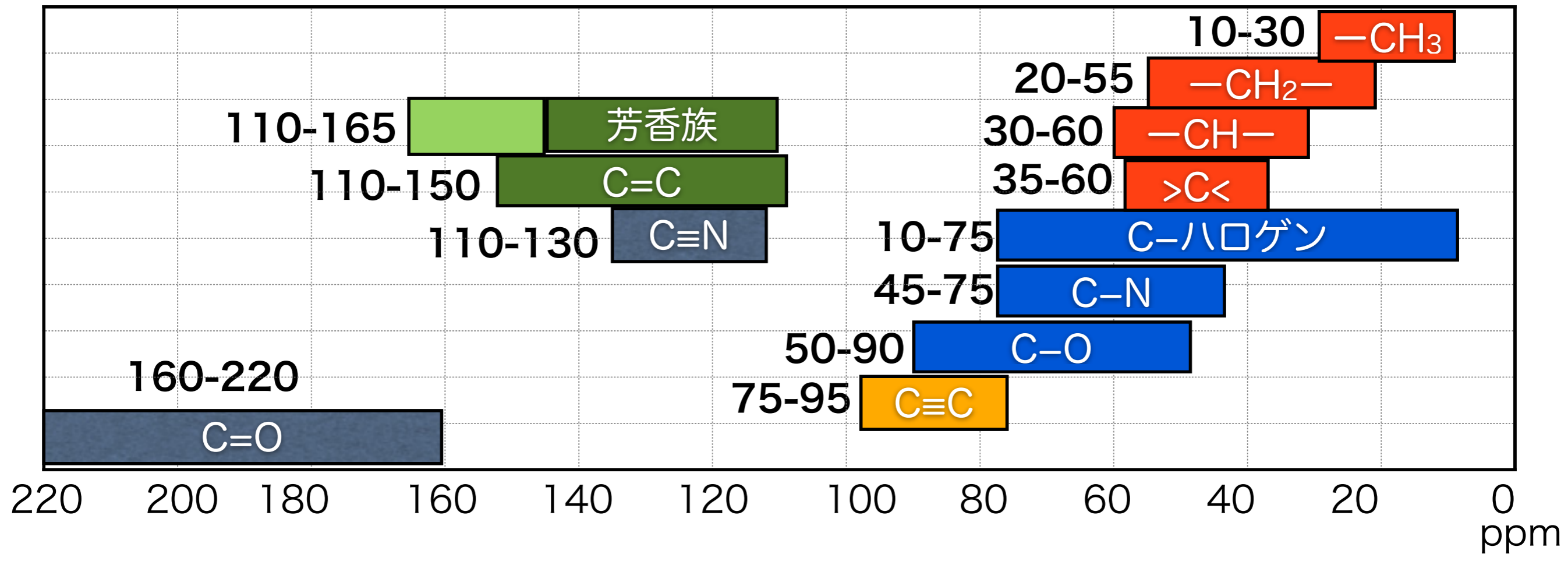
練習問題

以下の化合物の炭素を、等価な炭素の組み合わせごとに分けよ。



^{13}C -NMRの化学シフト相関

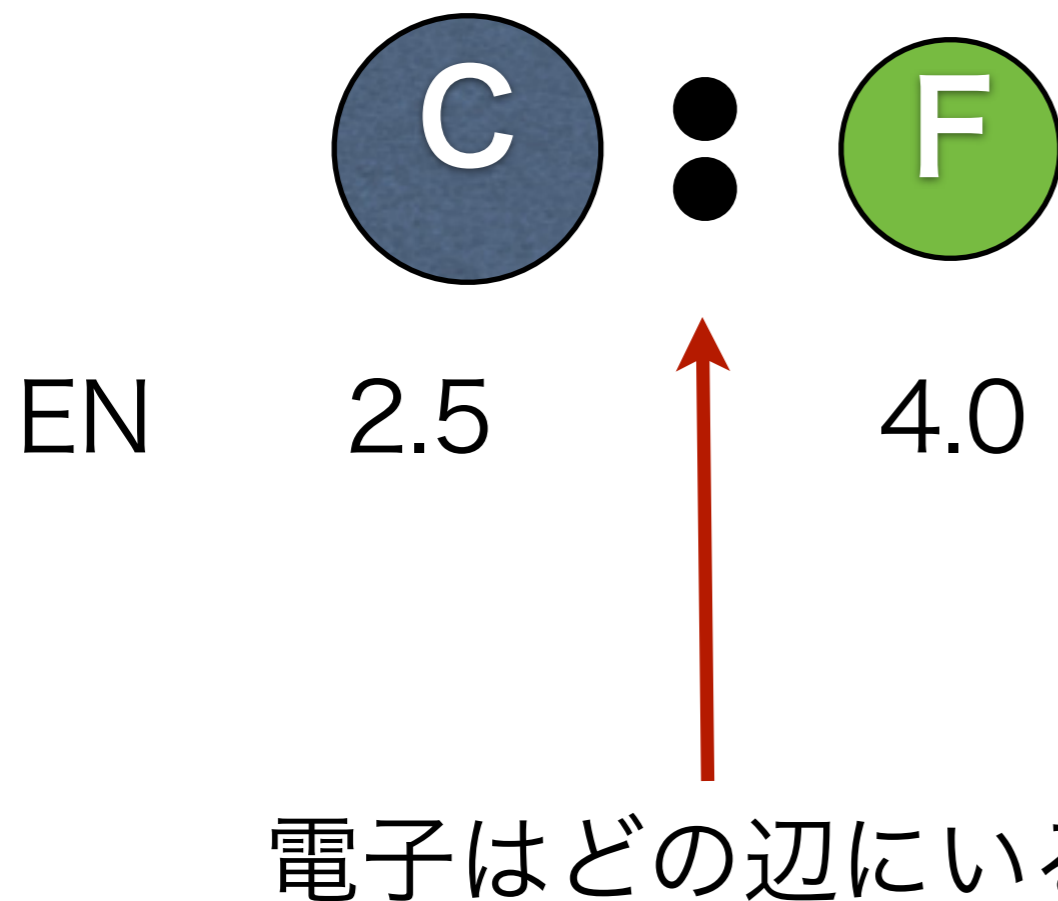
試験の時はこの数値を参照して下さい



電気陰性度と原子の電子密度の関係

電気陰性度 (EN)

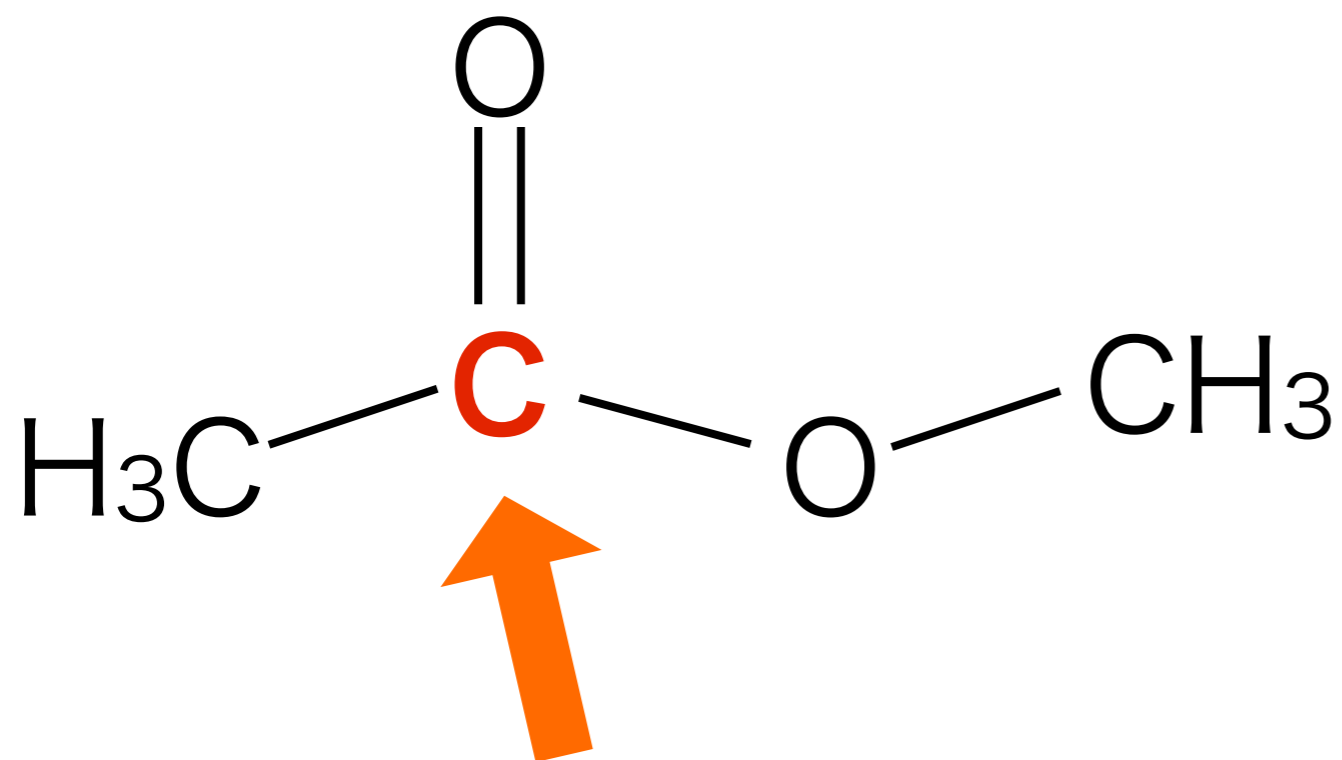
おおざっぱに言うと「電子好き度」※



※ 結合に用いられている電子に対する親和性

化学シフトの予測

スライド番号5の表を元に各炭素がどこに相当するのか
を考える



C=O ?

C-O ?

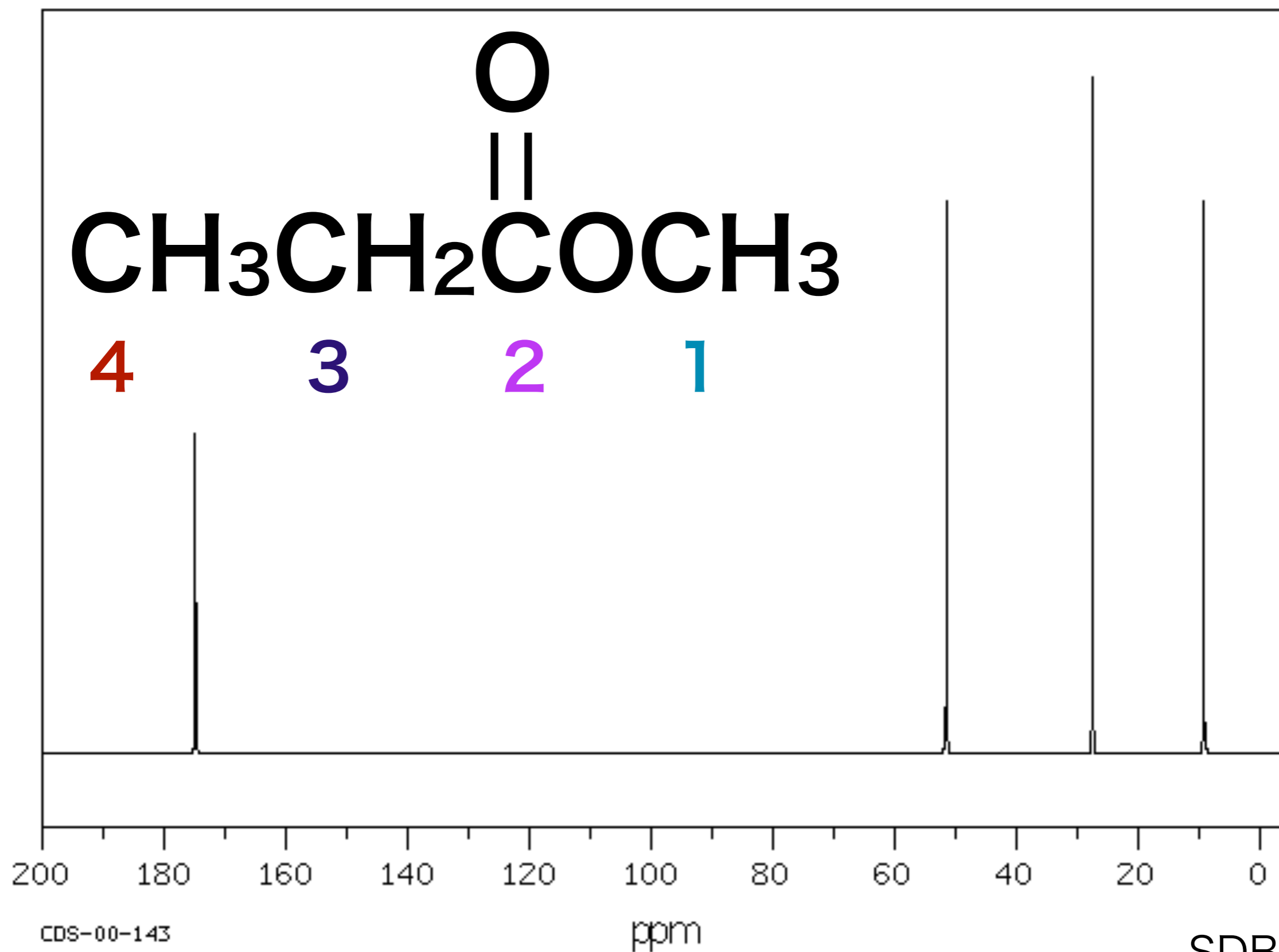
アルキル ?

^{13}C -NMRスペクトルにおいて カルボニル基の観測される領域

カルボニルはテキストでは160-220ppmと
まとまっているが実際には大体以下の領域

アルデヒド	175-210ppm	(一般には195-205ppm)
ケトン	185-220ppm	(一般には195-210ppm)
カルボン酸	155-185ppm	(一般には170-180ppm)
エステル	155-180ppm	(一般には165-180ppm)
アミド	160-180ppm	(170-180ppmが多い)

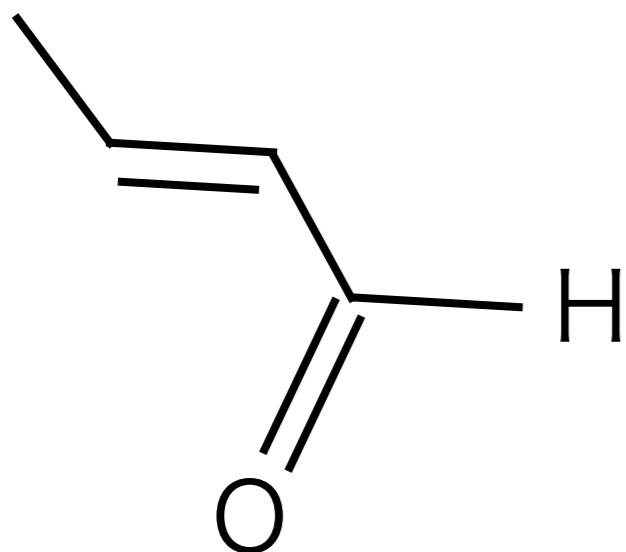
プロパン酸メチルの ^{13}C -NMRスペクトル



SDBSより

練習問題（中間試験過去問を改題）

以下の化合物の ^{13}C -NMRスペクトルにおける各炭素の化学シフトを予測せよ。ただし、等価な炭素の組み合わせがある場合は、○で囲むなど分かるように示すこと。



^{13}C -NMRの特徴 3 (p.464)

水素数が多い炭素の方が強く観測される傾向はある（絶対ではないので参考程度）

^1H -NMRでは積分比（ピーク面積比）が対応する水素の存在比を反映している

^{13}C -NMRにおけるDEPT法

^{13}C -NMRの一種で によって、

- シグナルが観測されない
- 上向きに観測される
- 下向きに観測される

と分かれる測定法



CH_3 、 CH_2 、 CH 、4級の区別が付く

	CH ₃	CH ₂	CH	4級
DEPT45				
DEPT90				
DEPT135				

通常の¹³C測定とDEPT135でだいたいの予測はつけられるが、DEPT90を組み合わせれば全ての級数が確実に分けられる

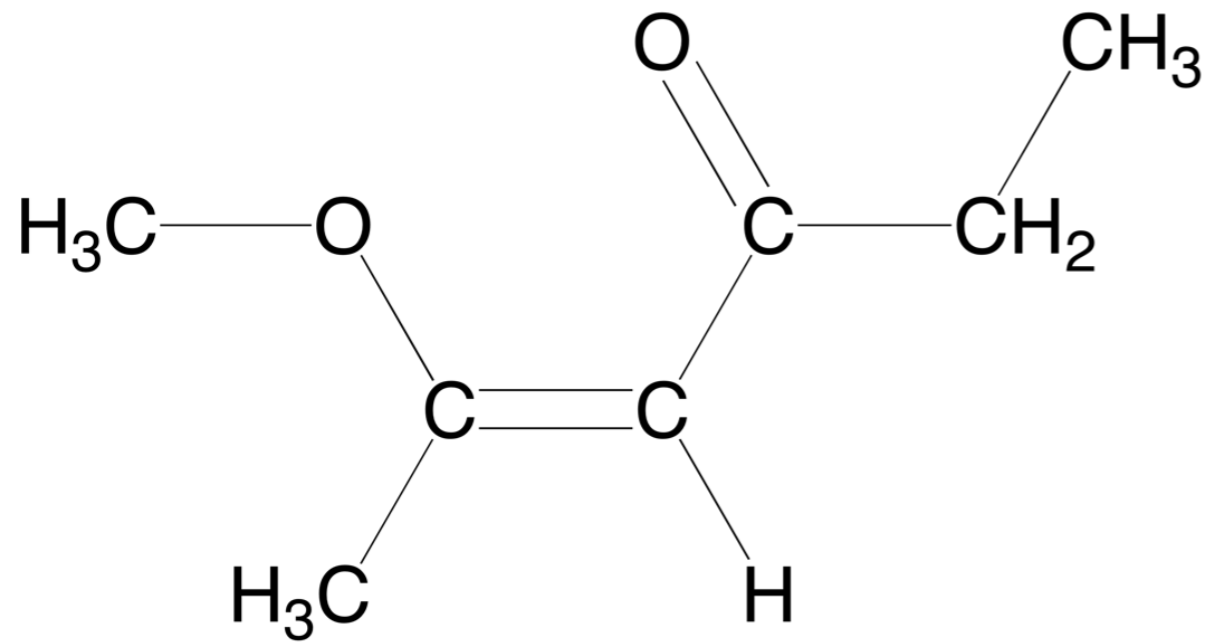
(DEPT135の方が測定が簡単。DEPT90は条件設定をきちんとしないと消え残りが出る事有り)

その他に

重水素化溶媒のピークはいずれも観測されなくなる
通常の¹³C測定よりも高感度

といったメリットもある

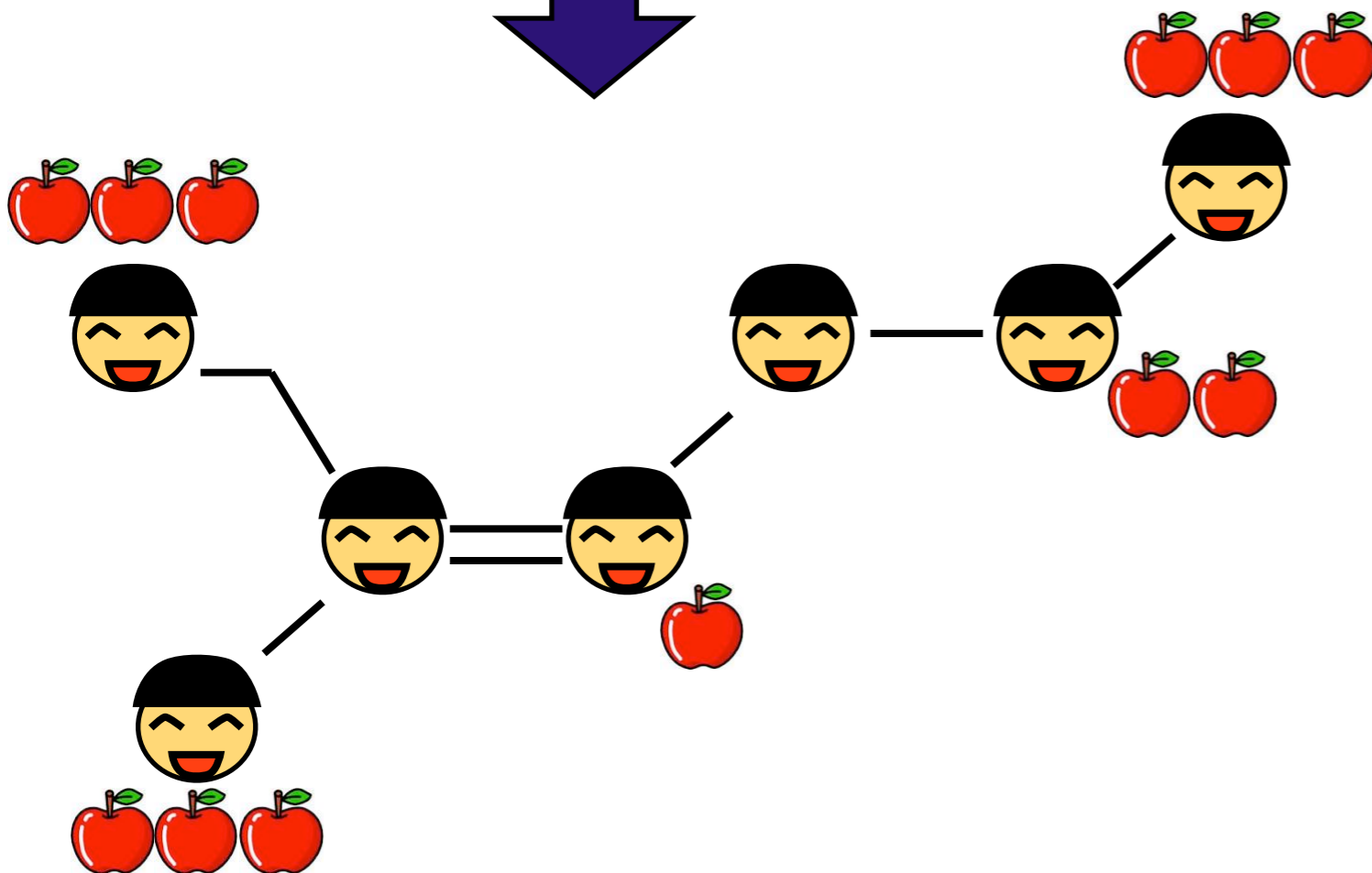
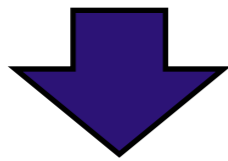
DEPTの説明 ～幼稚園生向け編～



Cを 

Hを 

その他は省略

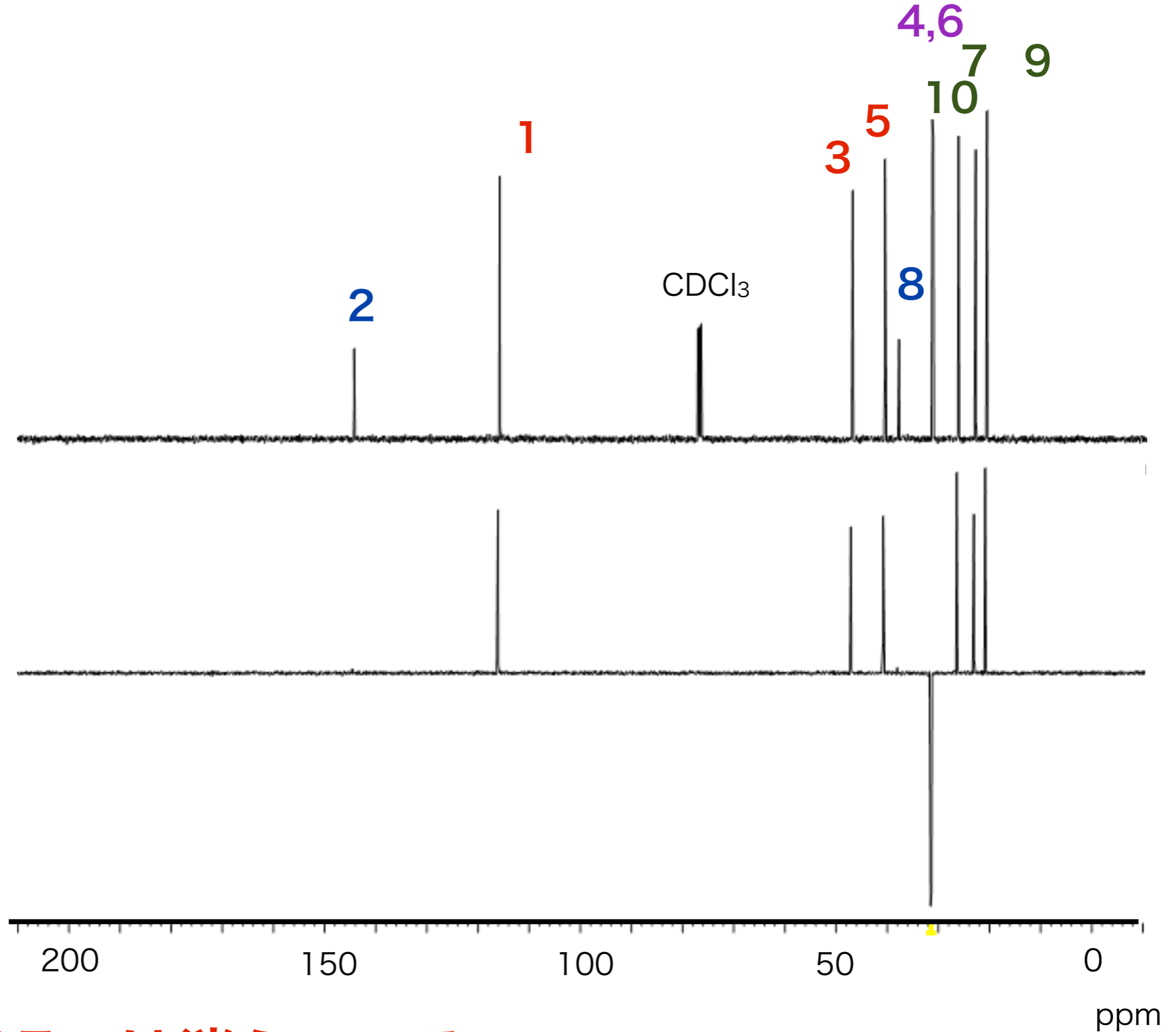
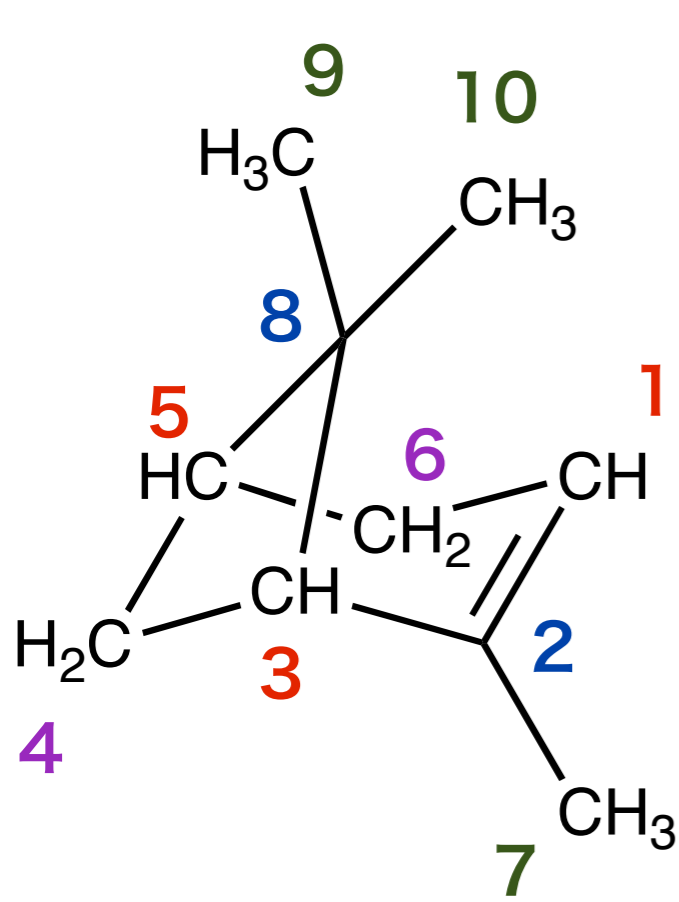


DEPT135

リンゴを3個持っている子と1個持っている子の横に ↑ を、2個持っている子に ↓ を書きましょう。

リンゴを持っていない子には何も書いちゃダメだよ

実際の¹³C-NMRおよびDEPT135スペクトル



2,8はDEPT135では消えている

4,6はDEPT135では下向き

参考：重水素化溶媒（重溶媒）って？

NMRを測定するに当たって、一般には目的の試料を溶媒に溶かして、その溶液として測定することが多い。しかし、溶媒の量は試料に対して非常に多い（標準的な試料濃度は5-10mg/mLなど）。従って、例えば ^1H -NMRスペクトルを測定する際に普通の溶媒を用いてしまうと、目的の試料のシグナル強度は溶媒のもの $1/100$ 程度など非常に低くなってしまふ。そこで、 ^1H を持たない分子が溶媒として用いられる。

現在のNMRは、重水素でロック※をかけるため、基本的には ^1H を重水素で置換した溶媒を用いる。

例： CDCl_3 , d_6 -DMSO, D_2O , CD_3OD など

ちなみに CDCl_3 は普通のクロロホルムの3倍くらい高いが、これが最も価格差が小さい。

※ ロックとは磁場の変動を常に補正するための仕組みで、これに重水素をもちいる