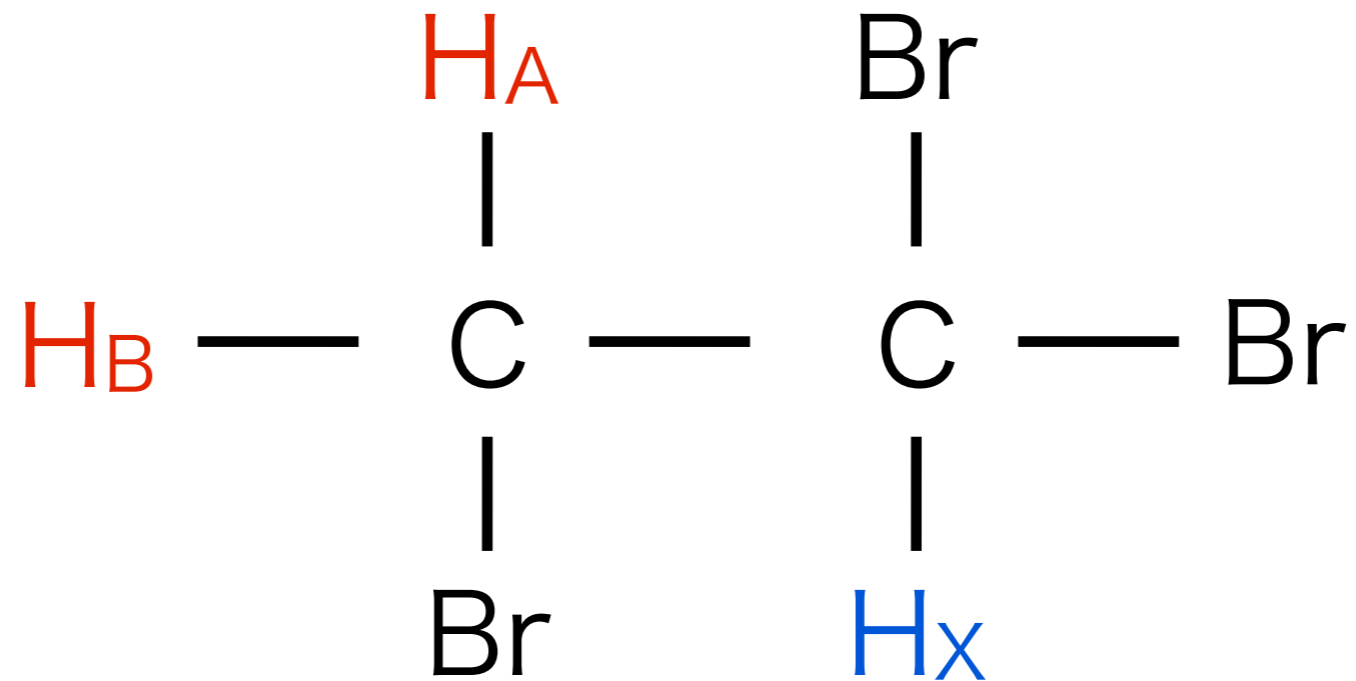
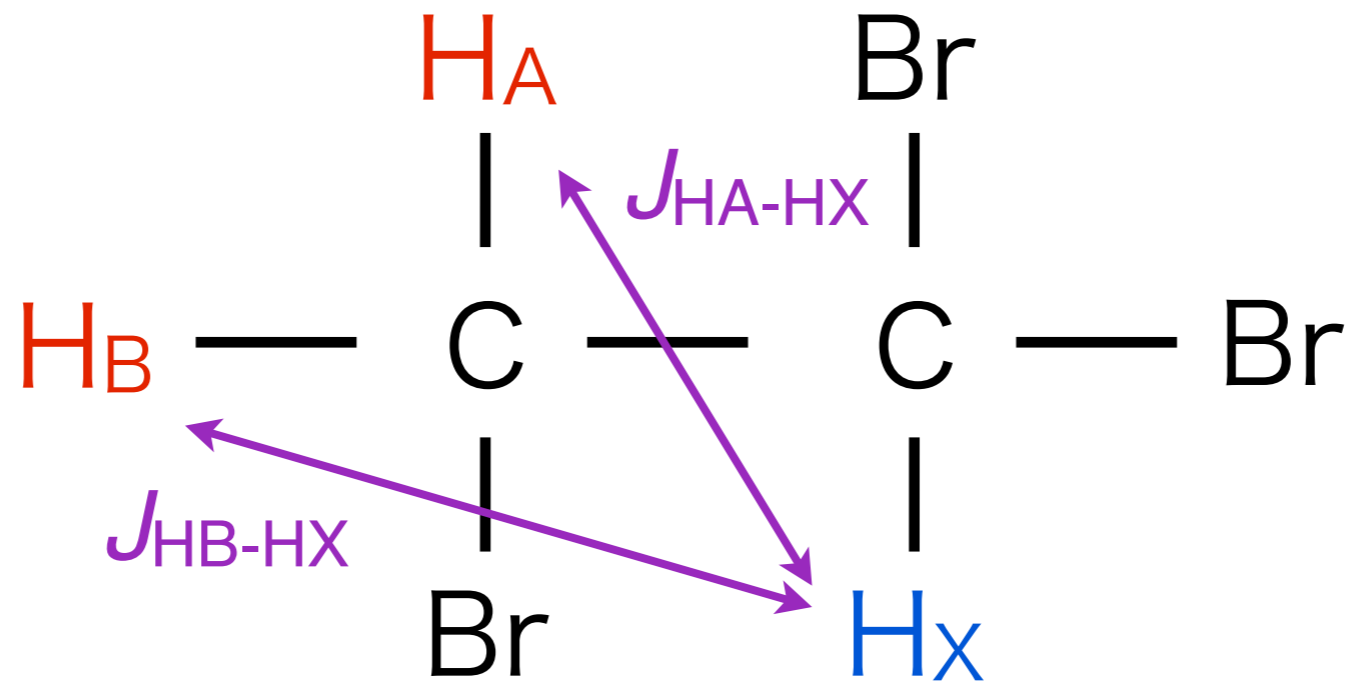


分裂したシグナルの面積比

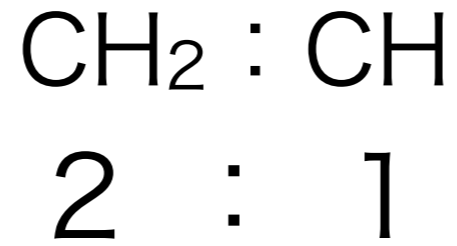


- H_A 、 H_B は等価
- これら2つのプロトンと非等価な H_X が隣接

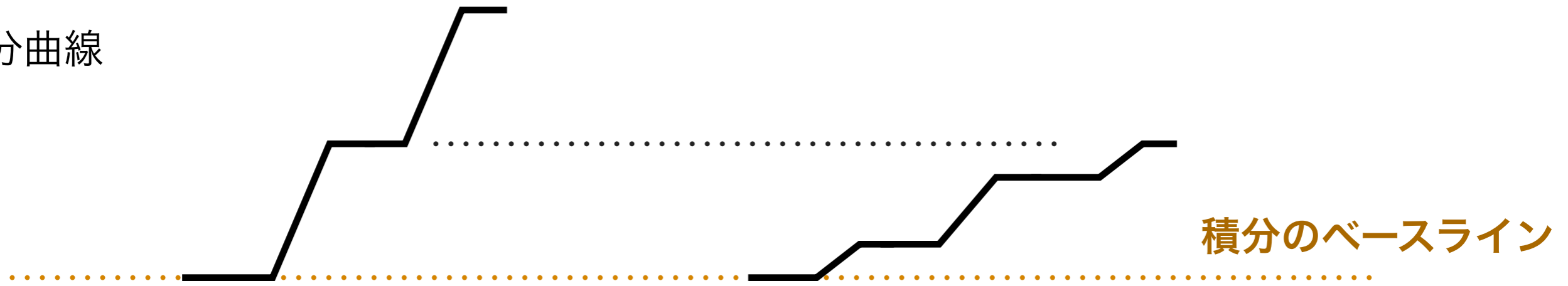


- ① H_A と H_X について考える
それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HA-HX}}$)
- ② H_B と H_X について考える
それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HB-HX}}$)
ここで H_A と H_B は等価なので、
 - ・ H_A と H_B のケミカルシフトは同じ
 - ・ $J_{\text{HA-HX}} = J_{\text{HB-HX}}$
- ③ 分裂後の各ピークを足しあわせる

各ピークの積分比と間隔



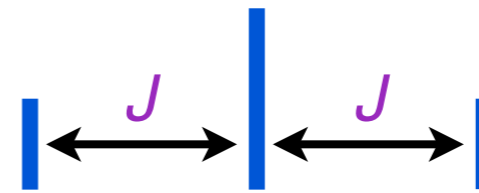
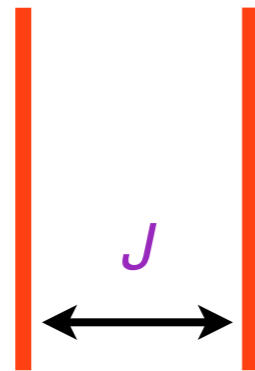
積分曲線



各シグナルが
分裂した
ピークの積分比

1 : 1

1 : 2 : 1



間隔

$$J = J_{\text{HA-HX}} = J_{\text{HB-HX}}$$

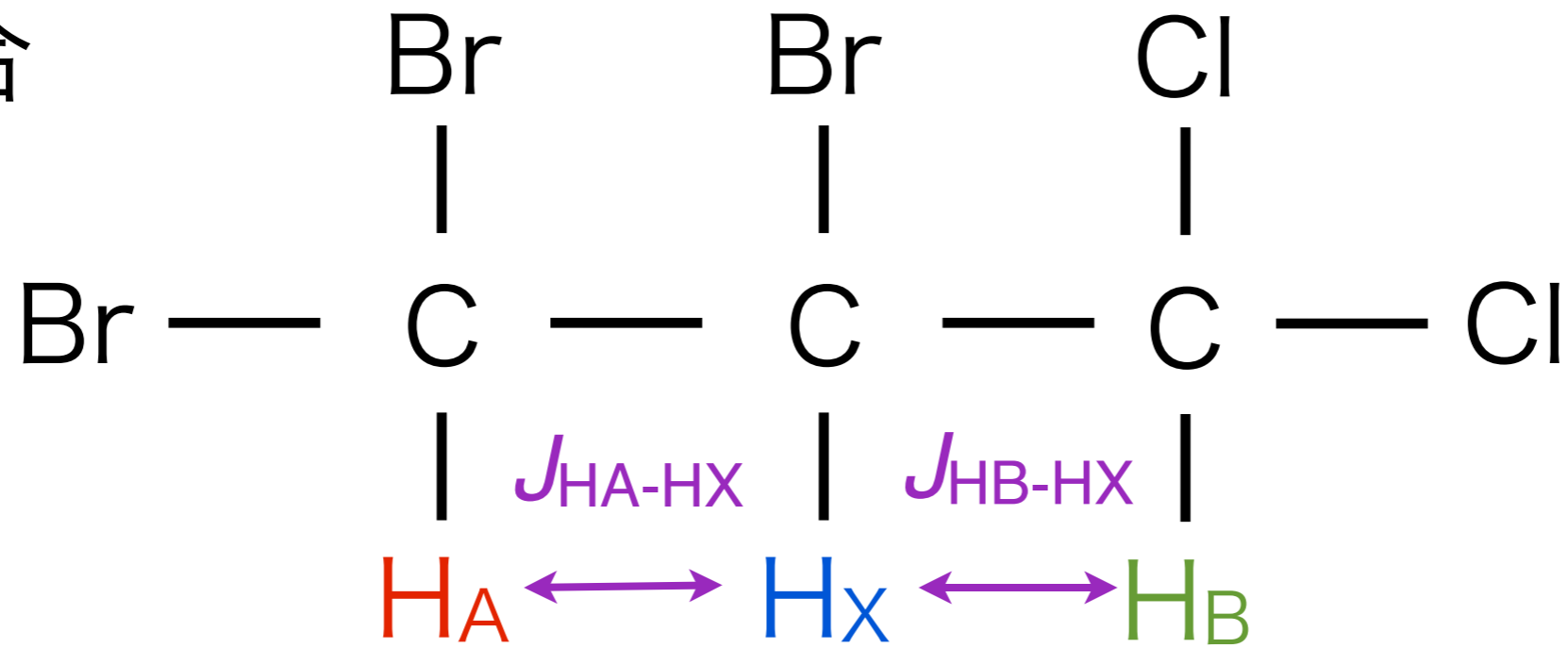
J自体はHzで決まっているので、装置の振動数
(MHz) で割るとppm表示になる

スピン多重度ごとの強度比

隣接する等価な プロトン数	多重度	強度比
0		
1		↓
2		↙ ↘ ↙
3		↙ ↘ ↙ ↘ ↙
4		↙ ↘ ↙ ↘ ↙ ↘ ↙
6		

パスカルの三角形（二項展開の係数）と同じ

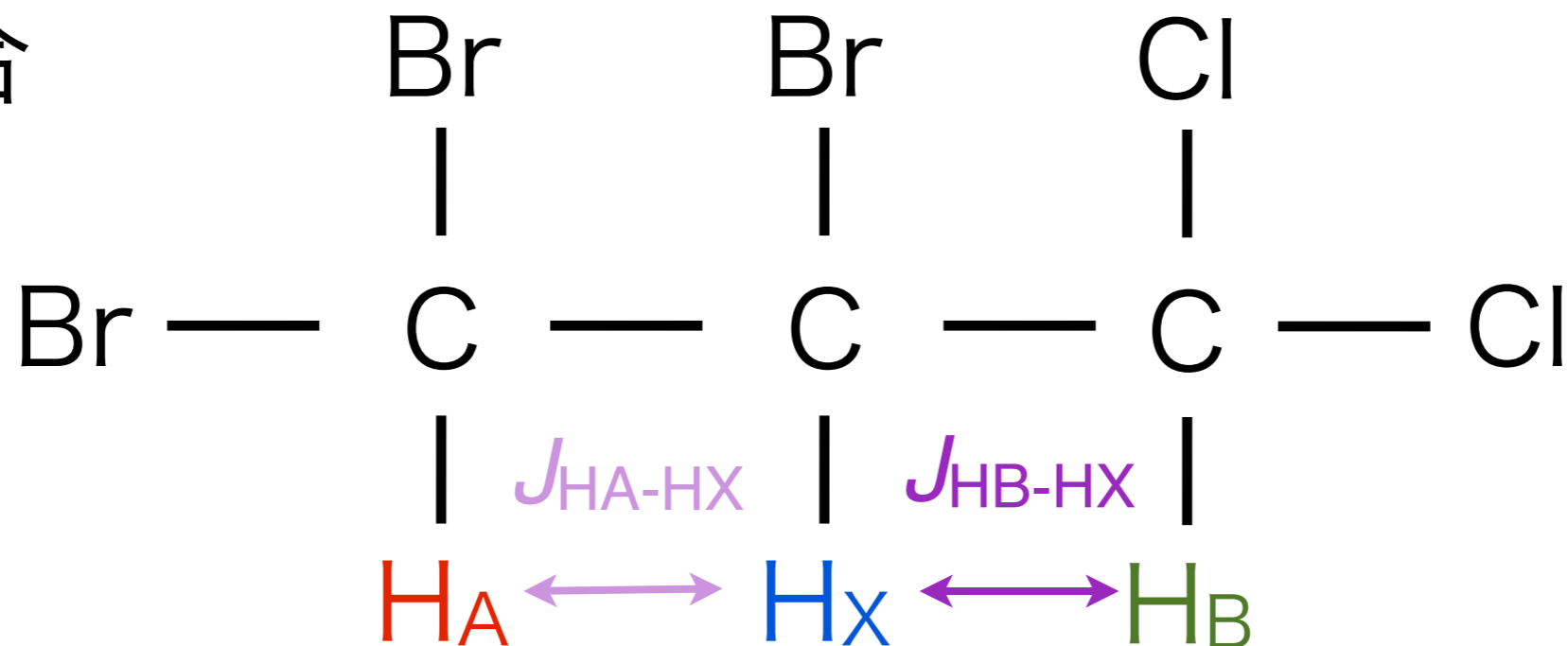
ddの場合



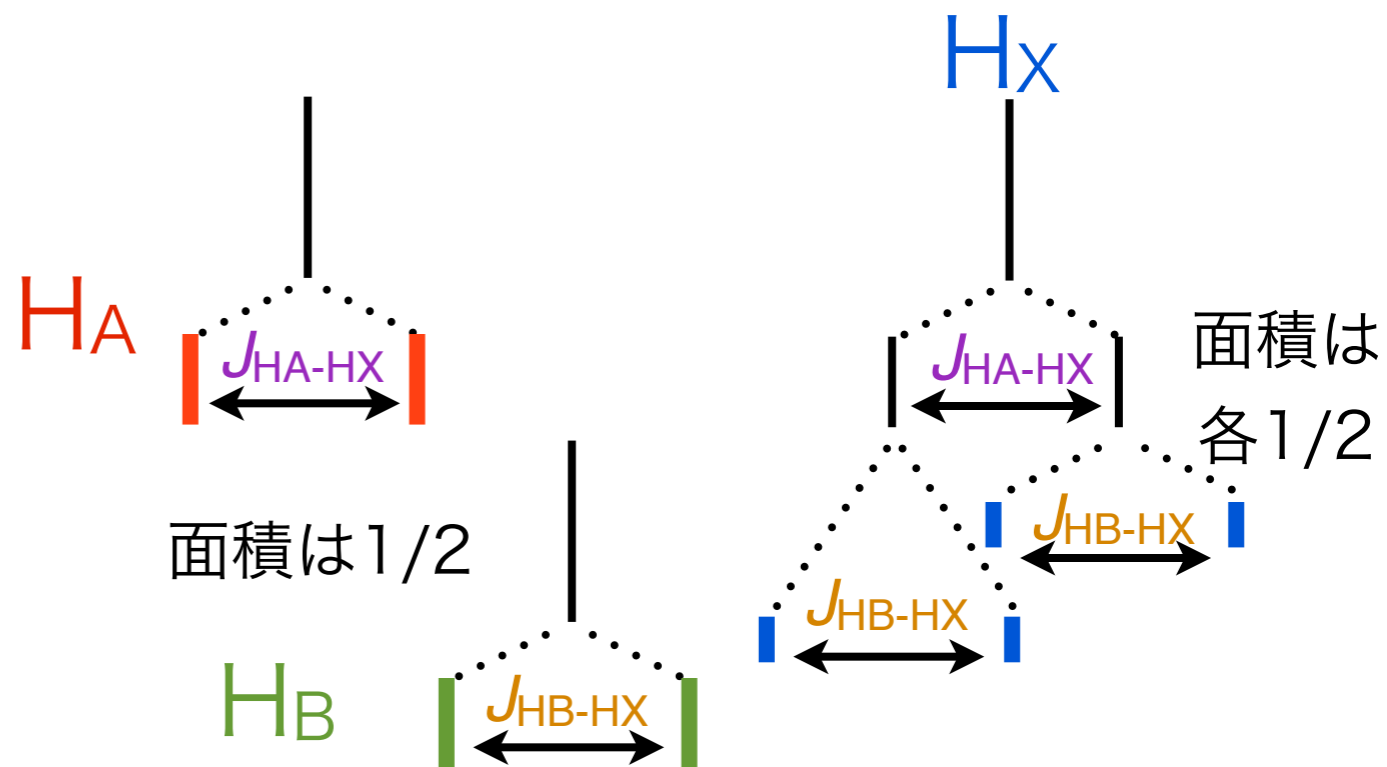
- ① H_A と H_X について考える
 それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HA-HX}}$)



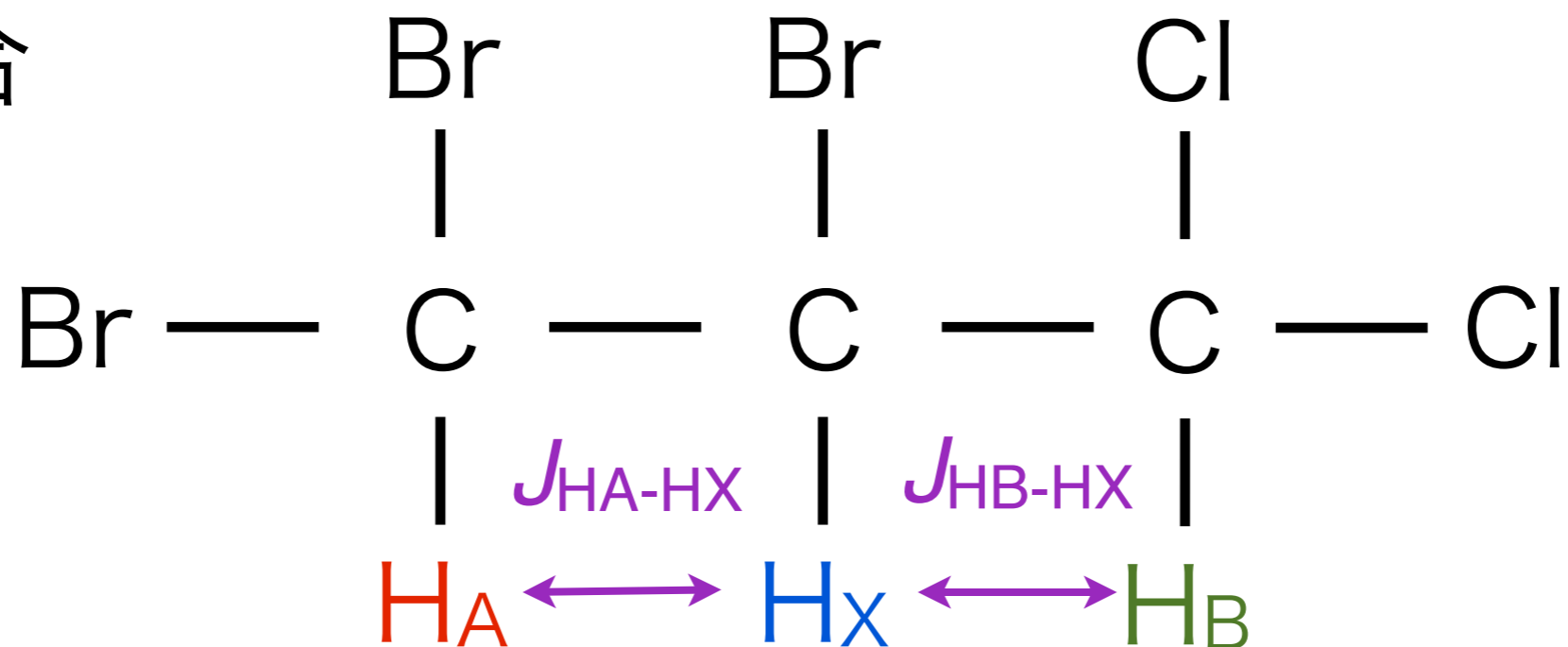
ddの場合



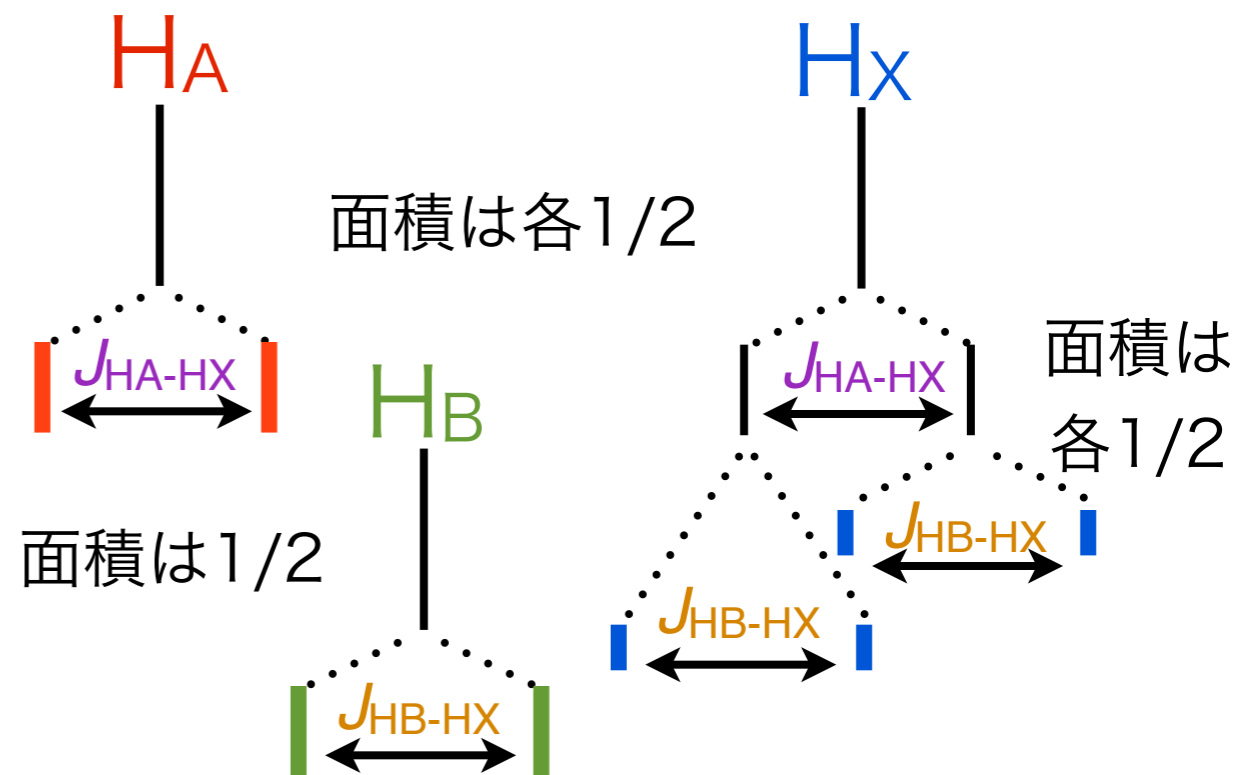
- ① H_A と H_X について考える
 それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HA-HX}}$)
- ② H_B と H_X について考える
 それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HB-HX}}$)
 ここで H_A と H_B は非等価なので、
- H_A と H_B のケミカルシフトは異なる
 - $J_{\text{HA-HX}} \neq J_{\text{HB-HX}}$



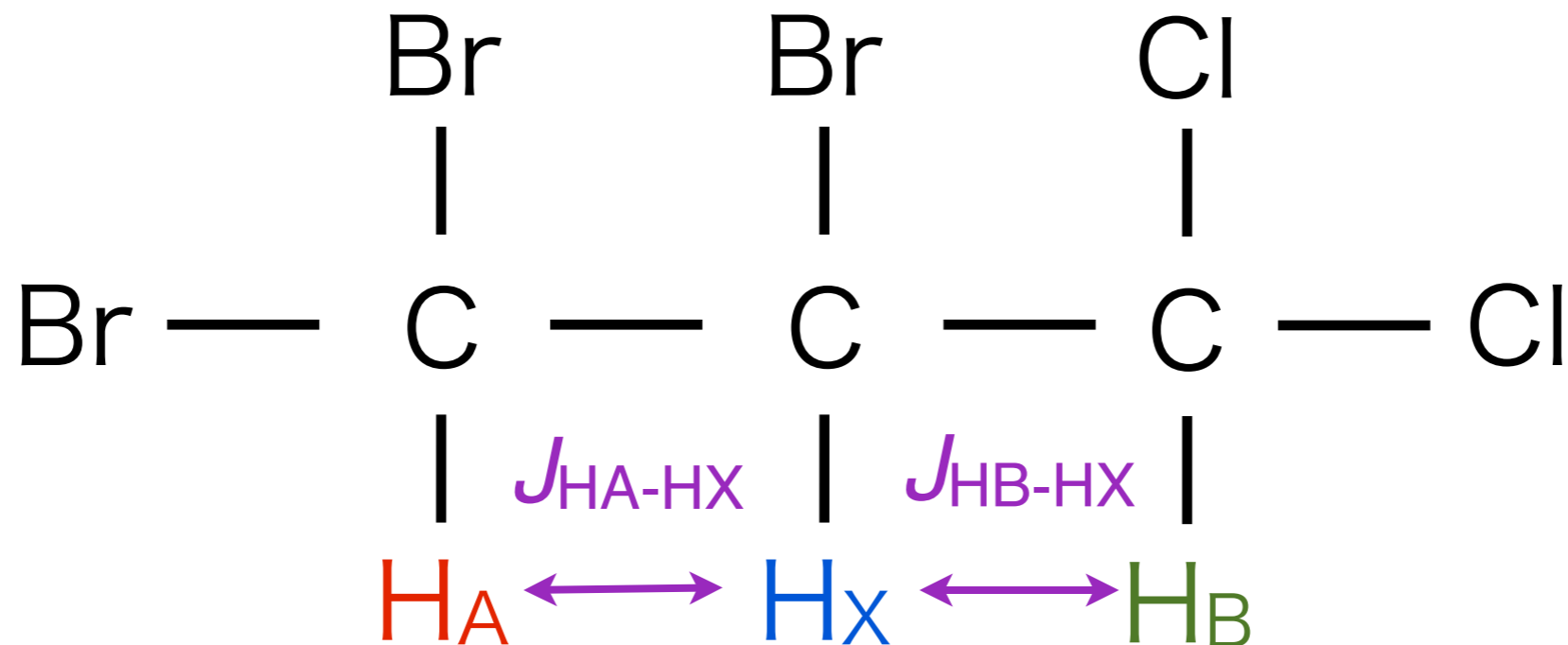
ddの場合



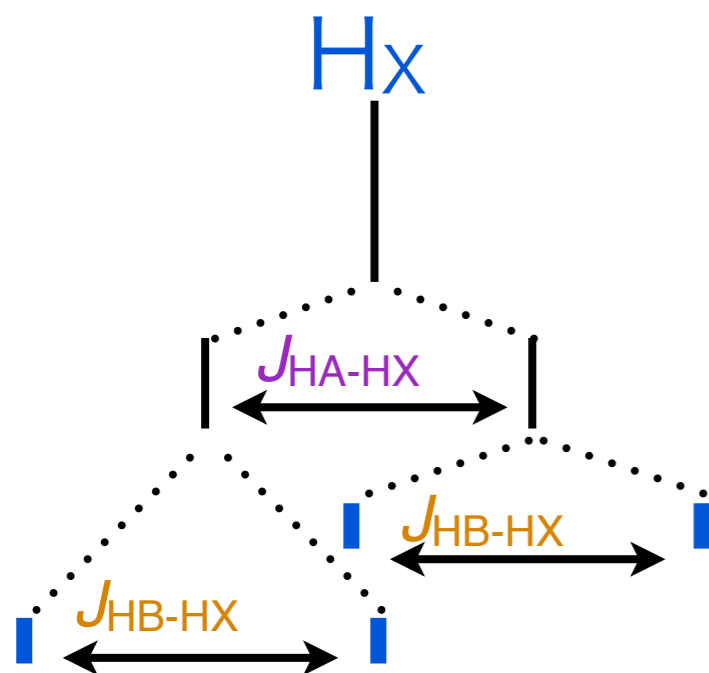
- ① H_A と H_X について考える
 それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HA-HX}}$)
- ② H_B と H_X について考える
 それぞれ一つのプロトン同士なので
 $1 + 1 = 2$ 本に分裂 (間隔は $J_{\text{HB-HX}}$)
 ここで H_A と H_B は非等価なので、
 - ・ H_A と H_B のケミカルシフトは異なる
 - ・ $J_{\text{HA-HX}} \neq J_{\text{HB-HX}}$
- ③ 分裂後の各ピークを足しあわせる



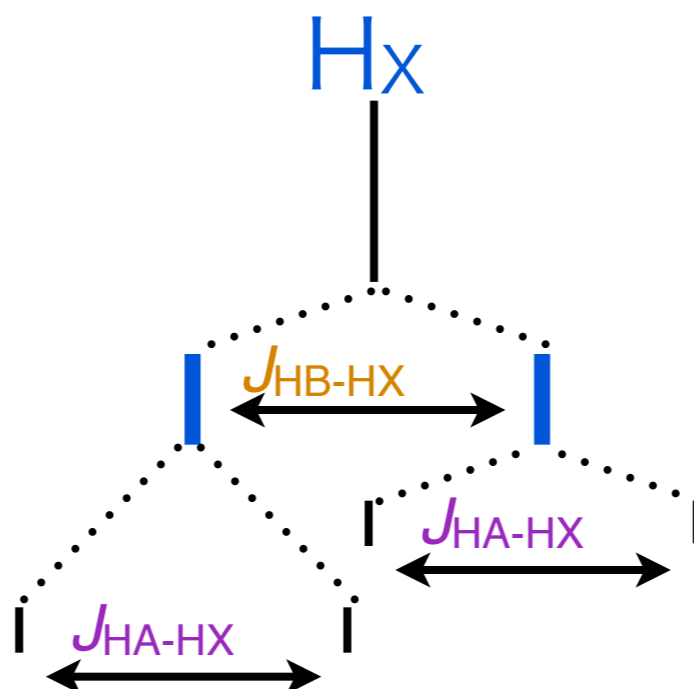
どっちを先に分裂させるの？



$J_{\text{HA-HX}}$ が先



$J_{\text{HB-HX}}$ が先



結果的に数字は同じになる。
わからない人は実際に数字を
入れて計算してみることに。
例えば6Hzと8Hzなど。

各ピークの積分比と間隔

$$H_A : H_B : H_X$$

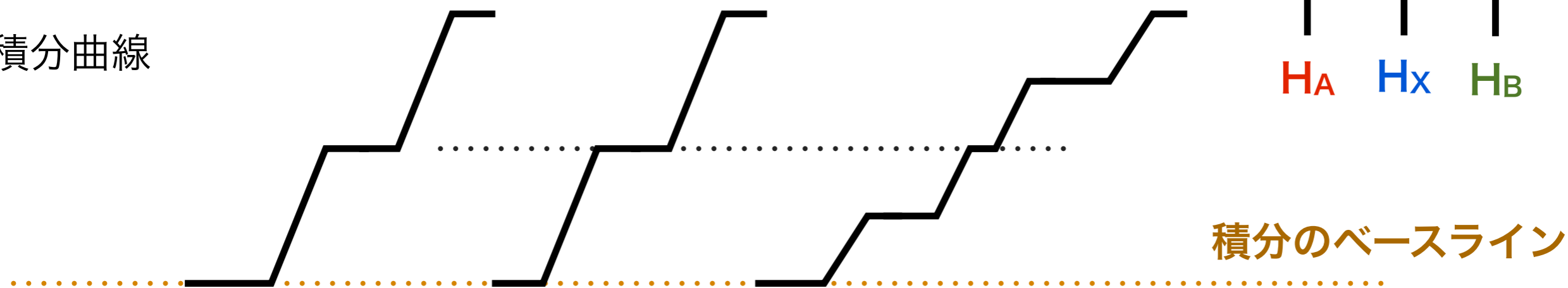
$$1 : 1 : 1$$

Br Br Cl

$$\text{Br}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{Cl}$$

H_A H_X H_B

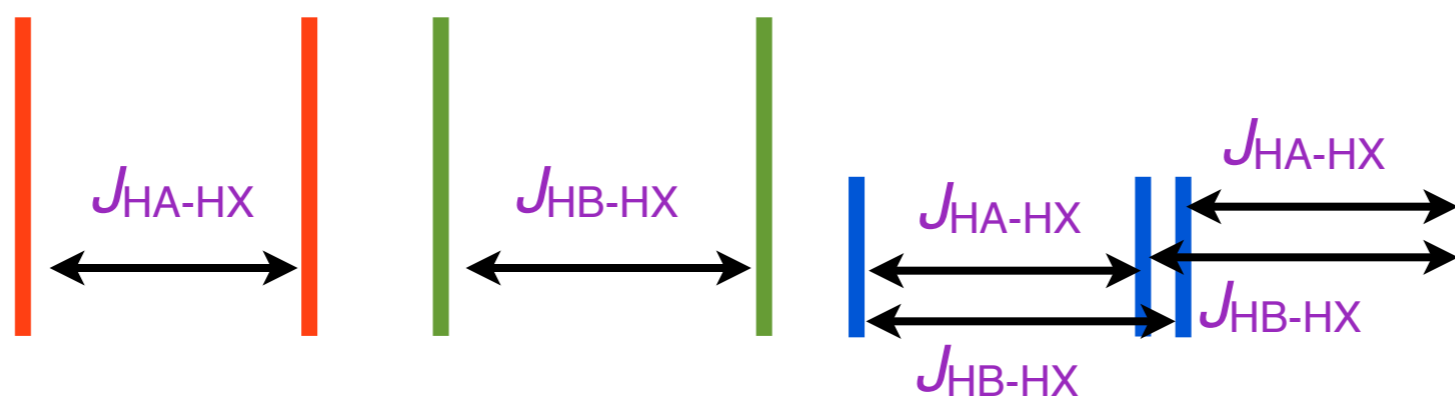
積分曲線



分裂した
ピークの積分比

$$1 : 1$$

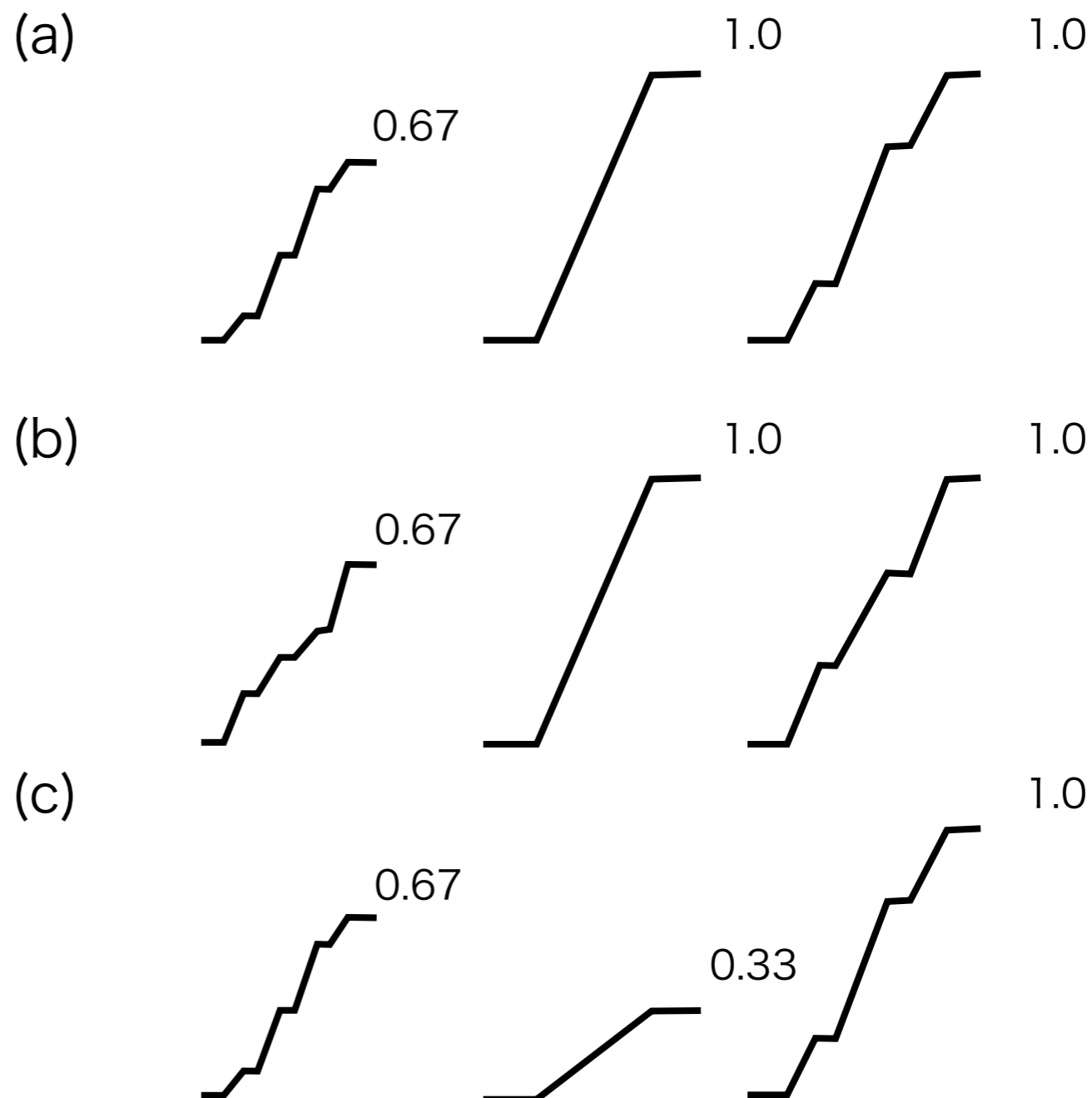
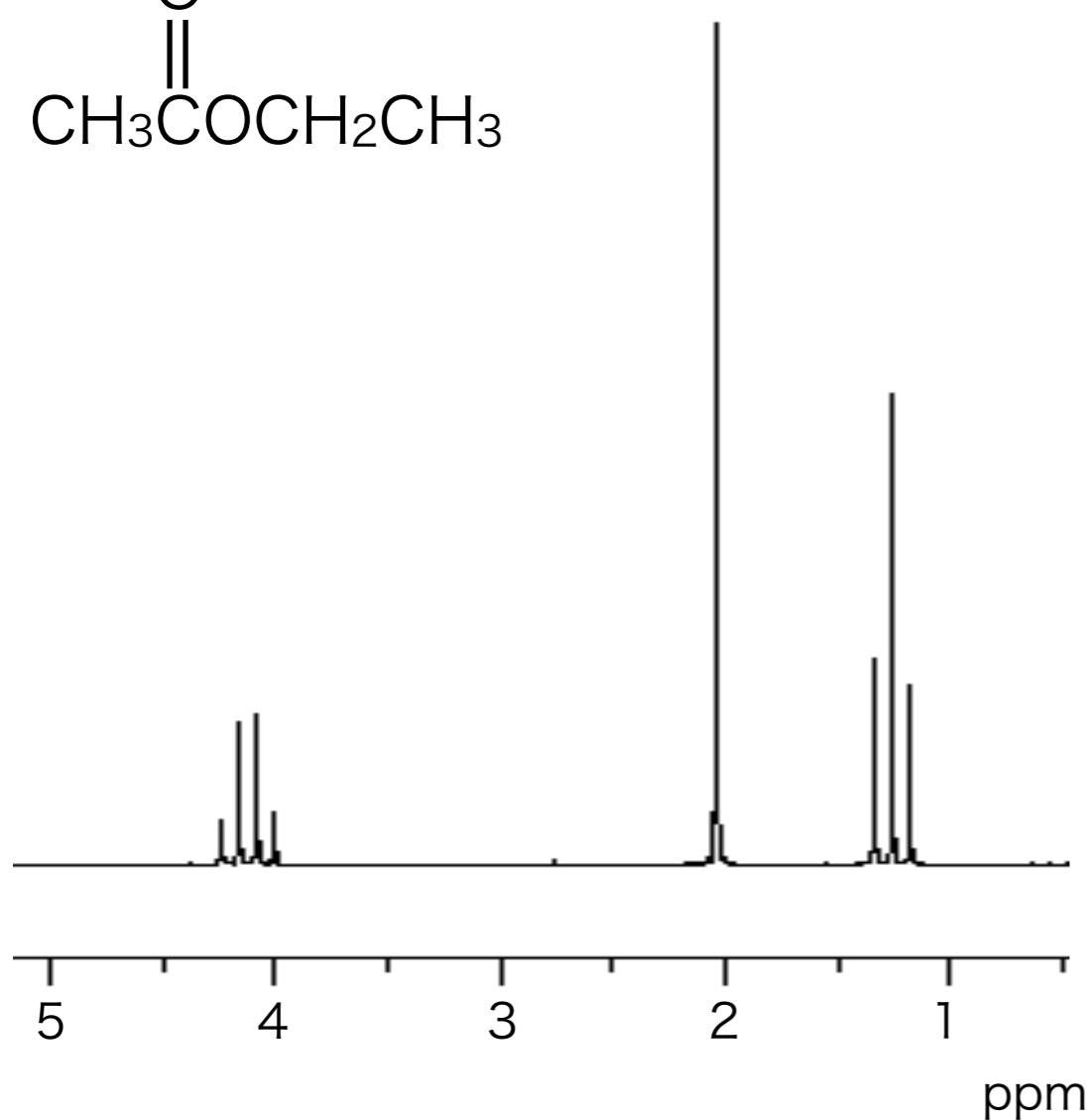
$$1 : 1$$

$$1 : 1 : 1 : 1$$


$J_{HA-HX} \neq J_{HB-HX}$ なので、4本に分裂

(偶然 $J_{HA-HX} = J_{HB-HX}$ なら結果的に t のように3本線となる)

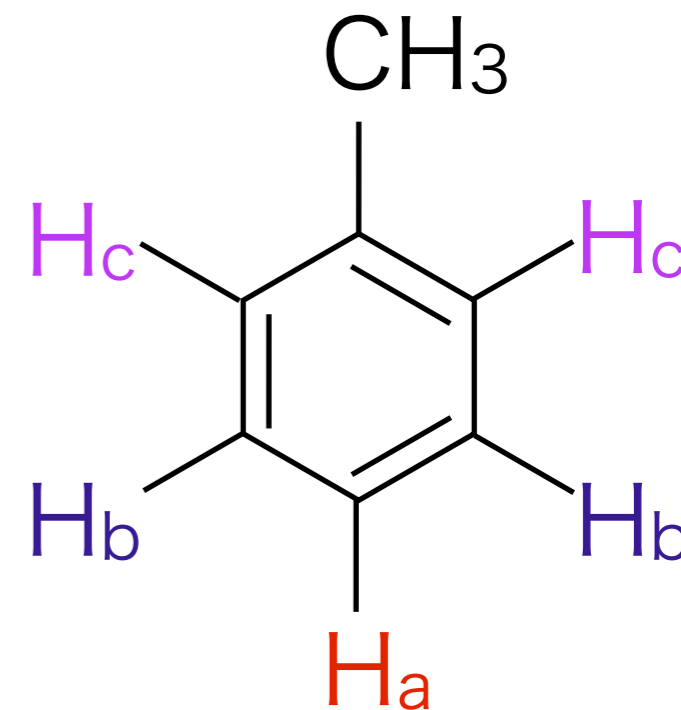
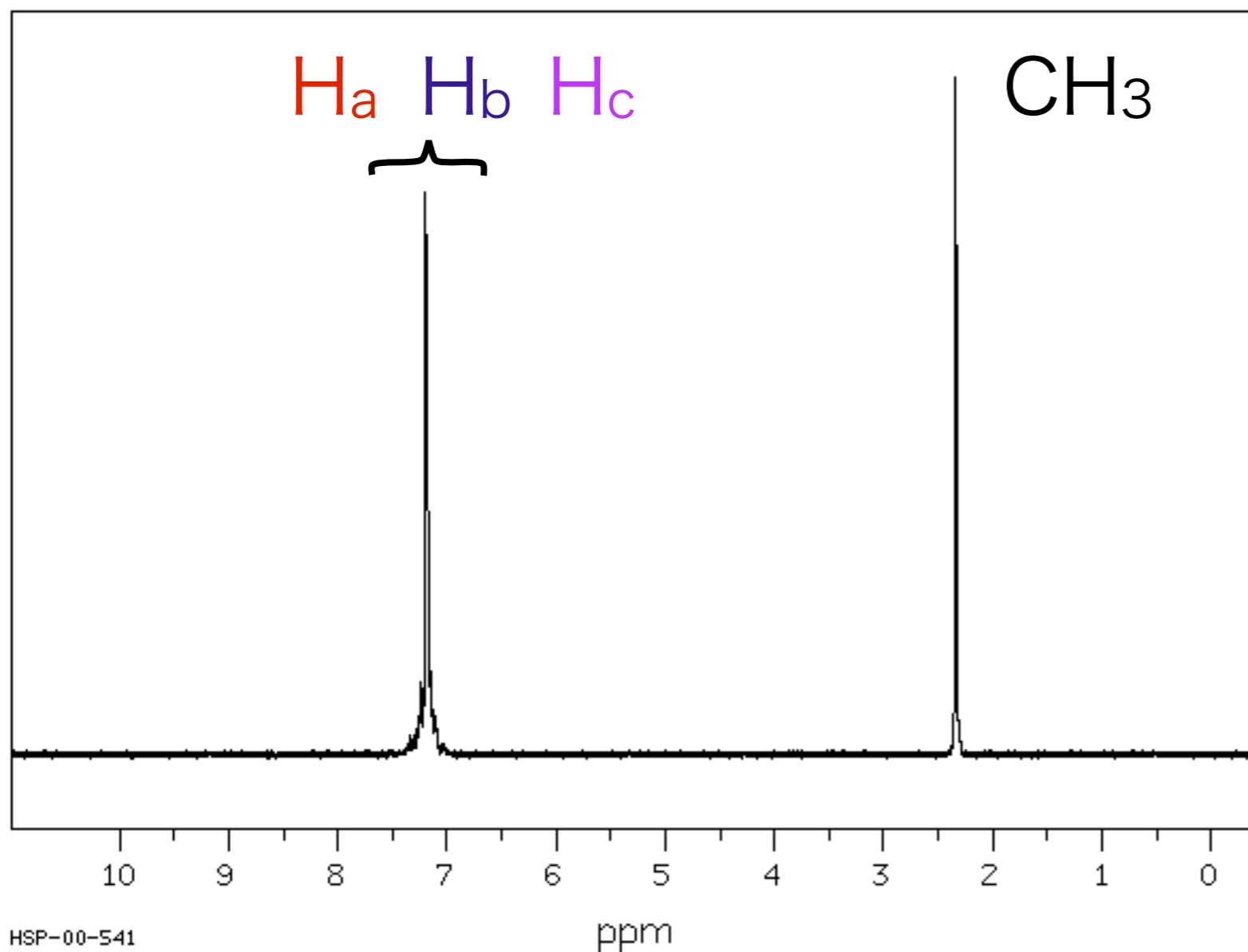
酢酸エチルの $^1\text{H-NMR}$ スペクトルに対して正しい積分曲線の組み合わせを選択せよ。ただし積分曲線の上にある数値は積分比を示している（有効数字2桁）



スペクトルはSDBSより

より複雑なスピン-スピン分裂パターン①

トルエンの $^1\text{H-NMR}$ スペクトル



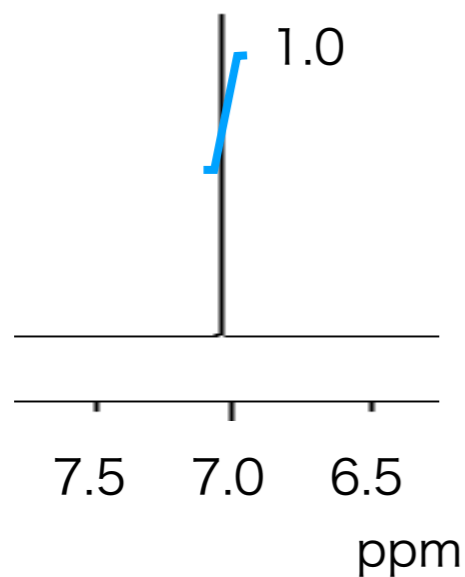
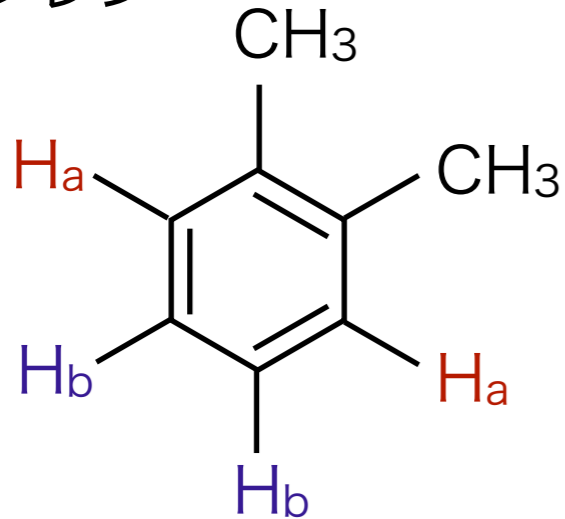
芳香環の3種の非等価なプロトンは
重なり合ったシグナルとして観測される

より複雑なスピン-スピン分裂パターン②

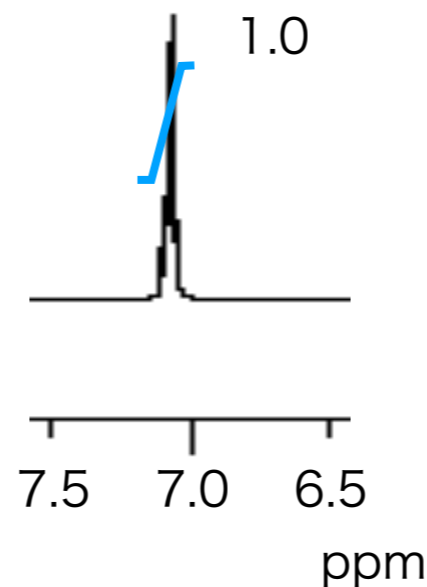
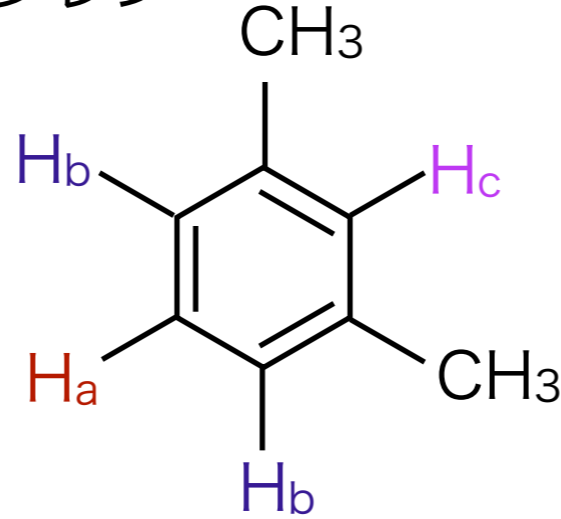
キシレン類の $^1\text{H-NMR}$ スペクトル（芳香族領域のみを拡大）

正しい組み合わせは？

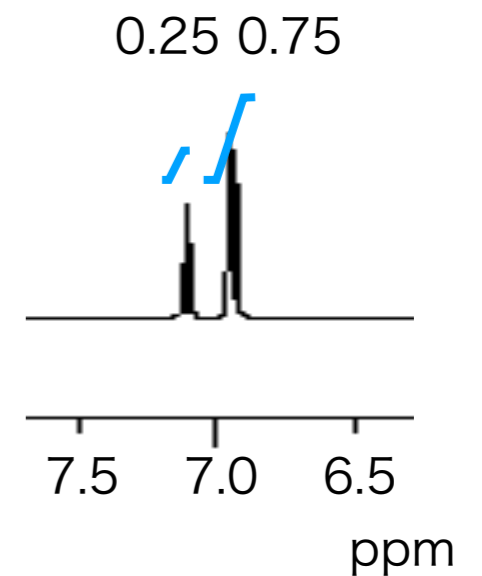
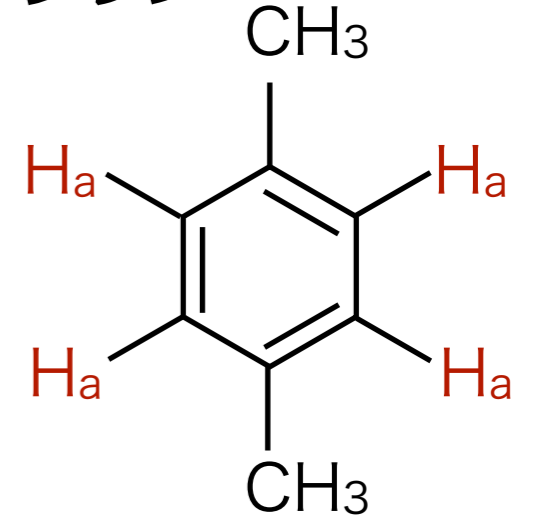
o-キシレン



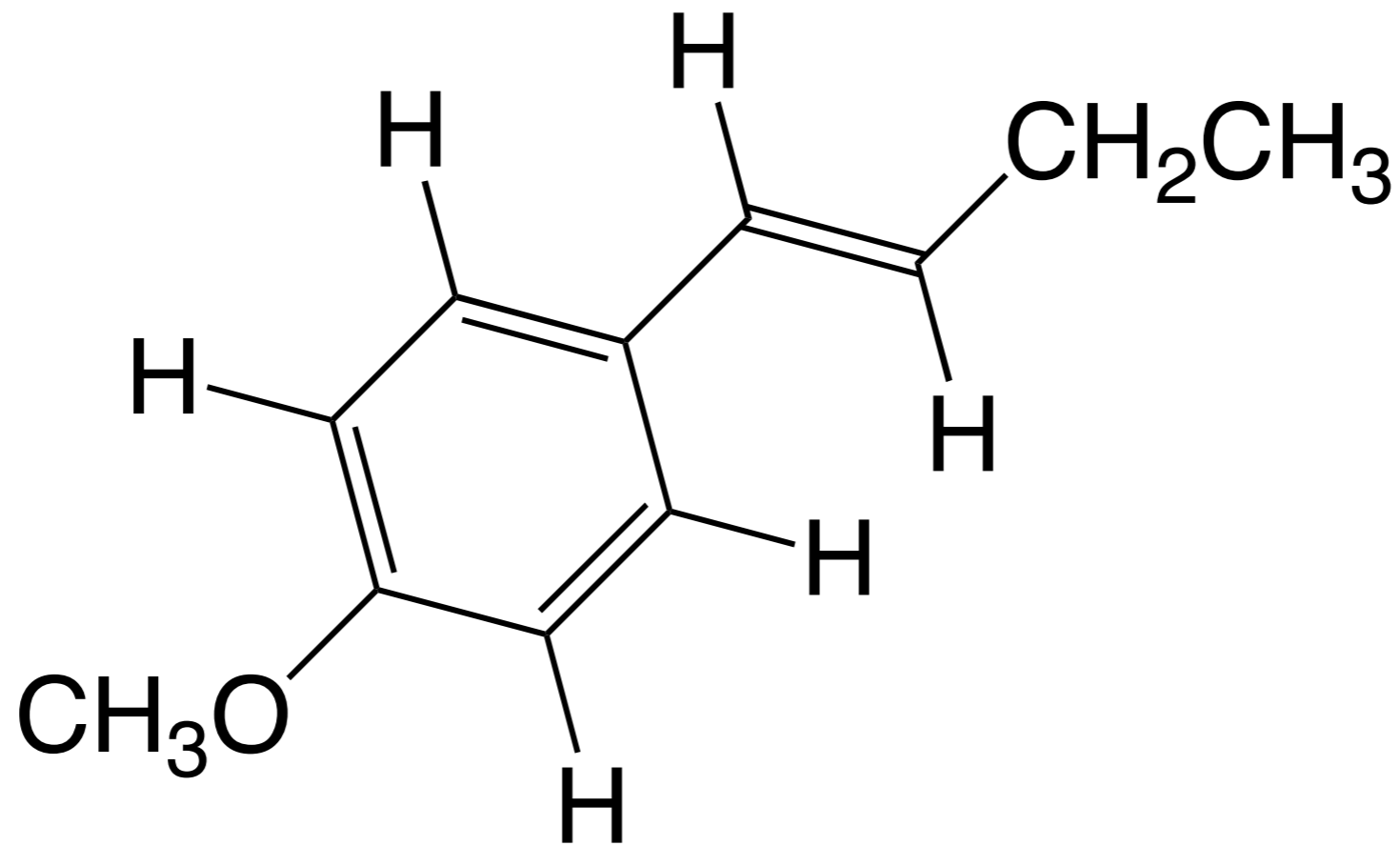
m-キシレン

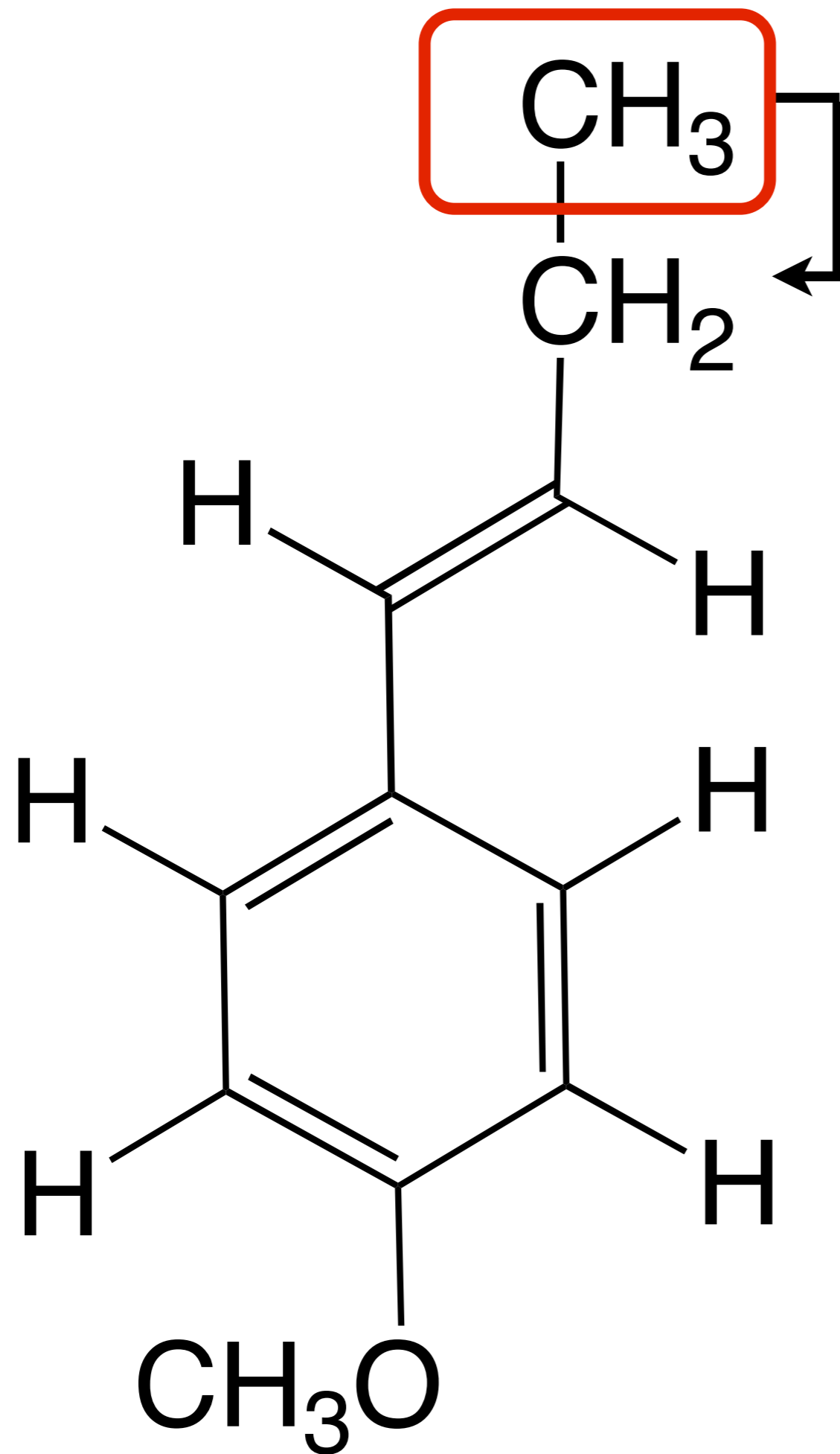


p-キシレン

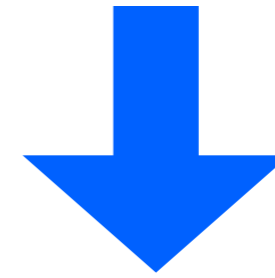


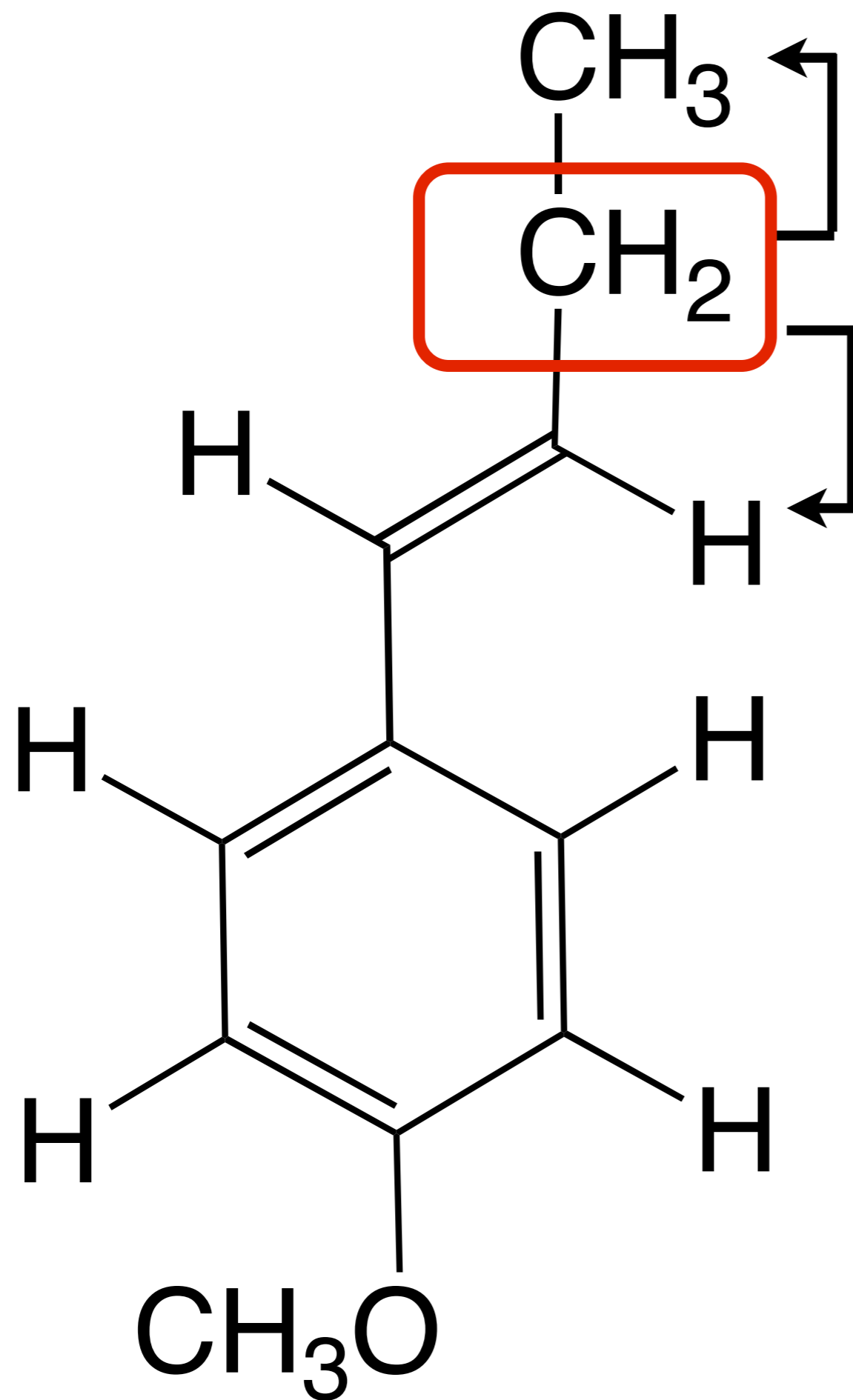
問題13.17 (p.447) の分子について、
それぞれどのような分裂パターンを示すか？



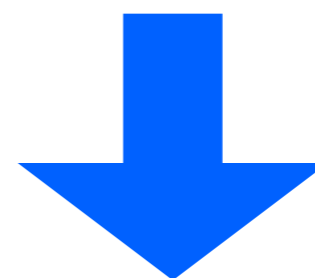
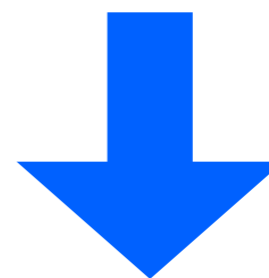


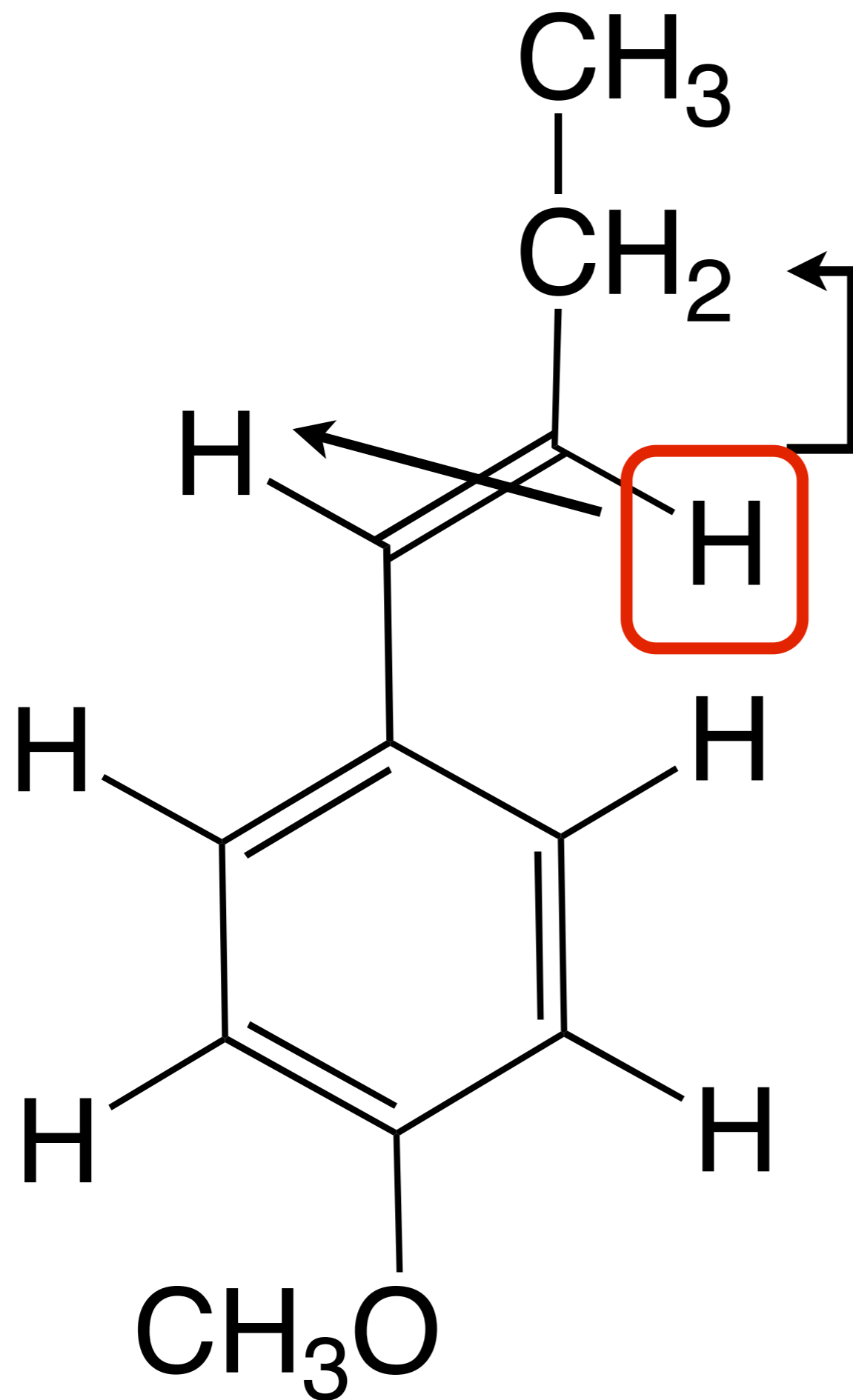
となりは CH_2 のみ



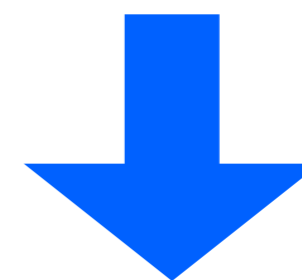
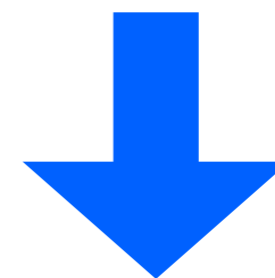


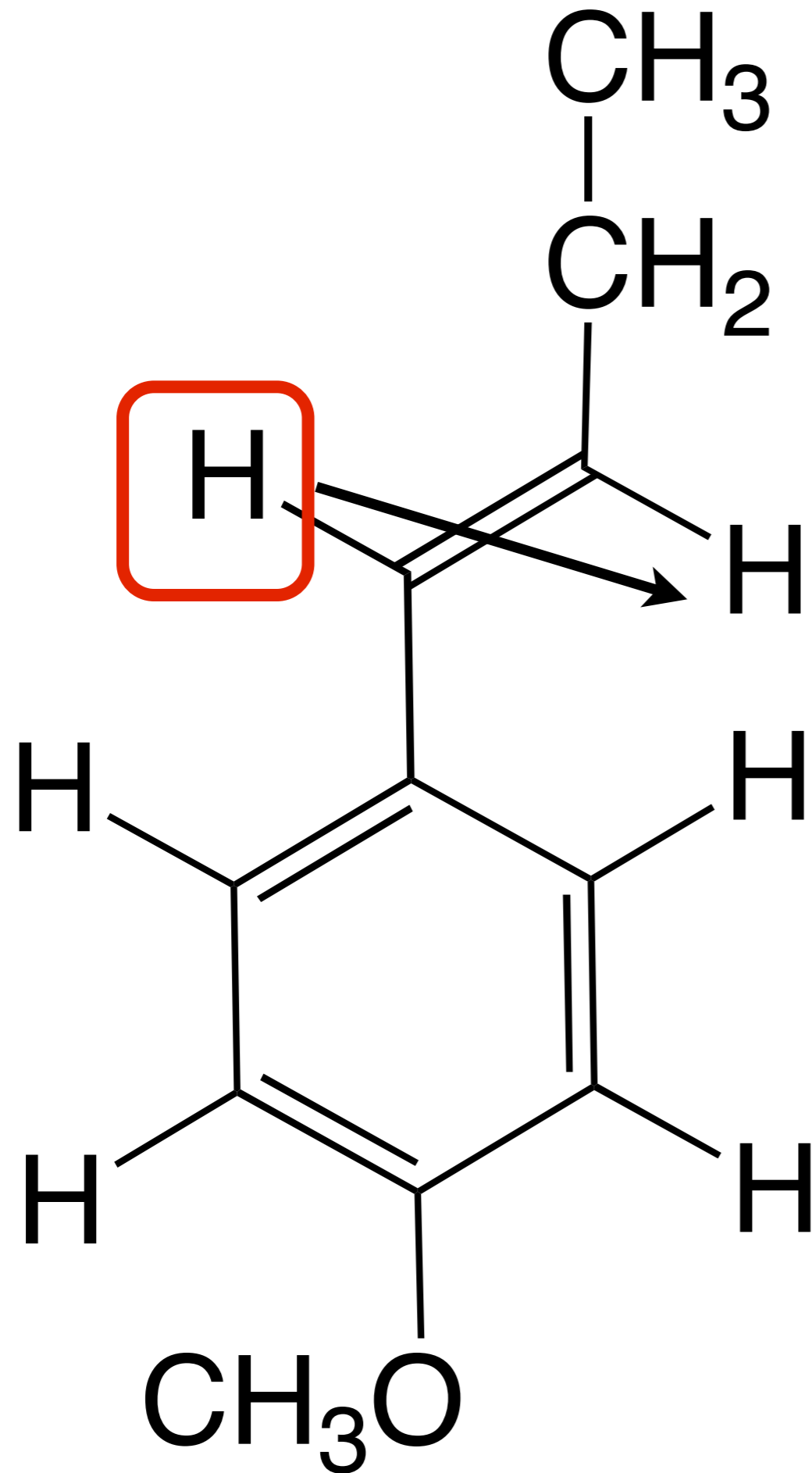
となりは
 CH_3 と CH



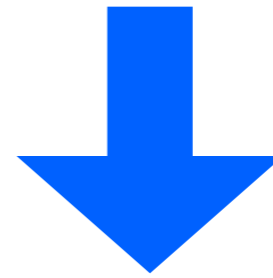


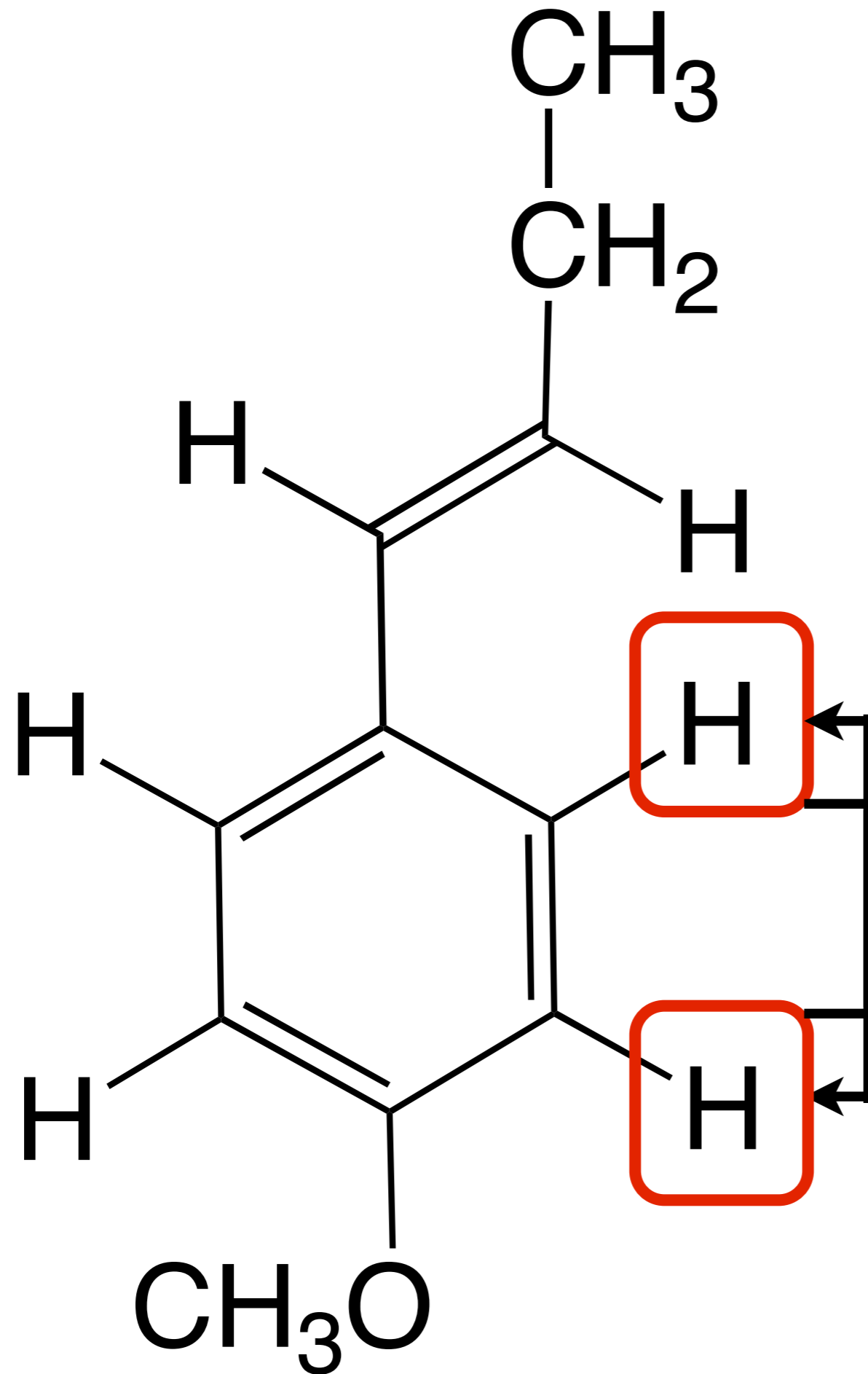
となりは
 CH_2 と CH



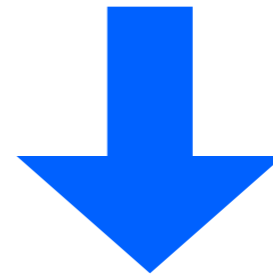


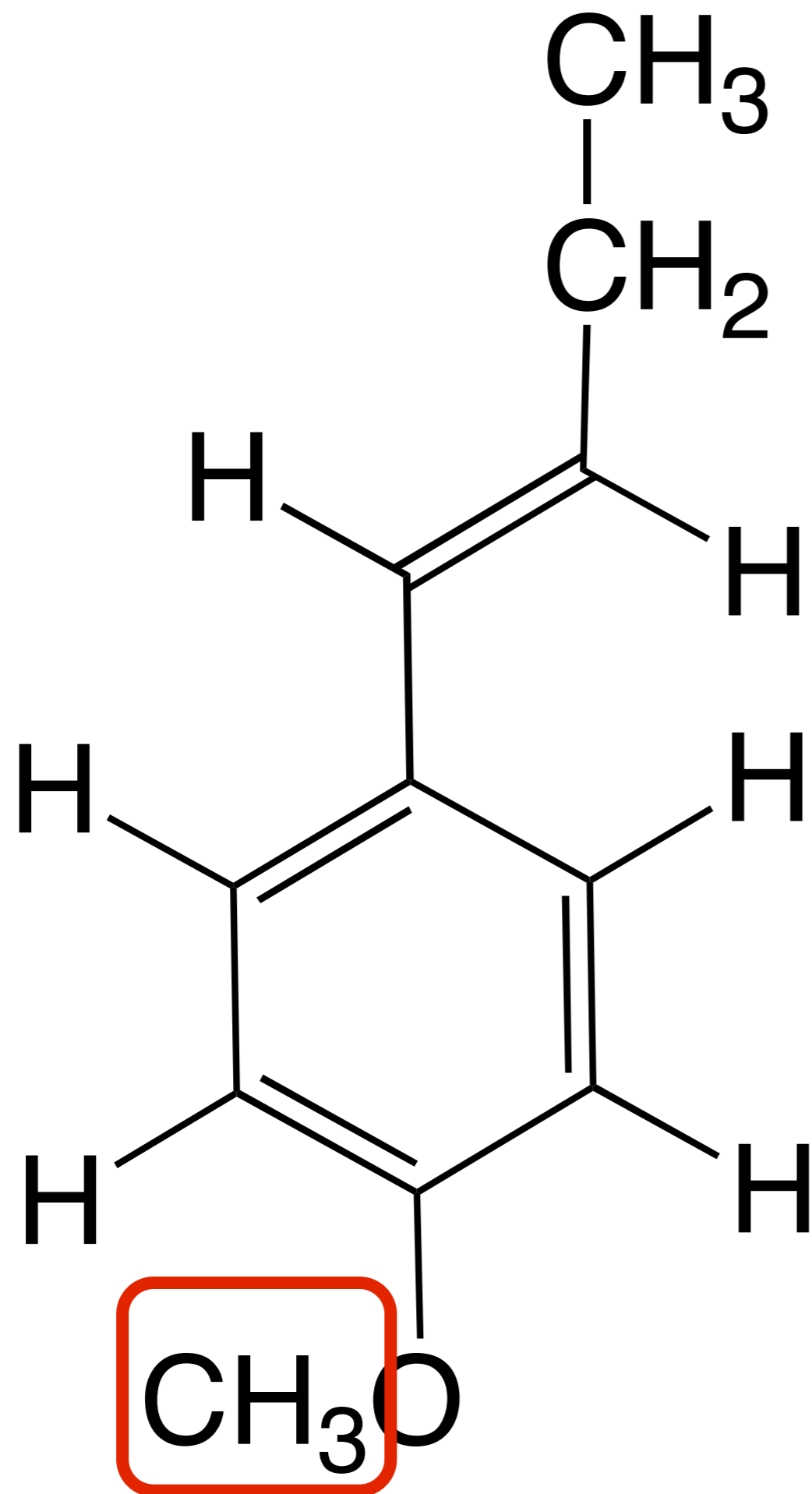
となりは
CHのみ



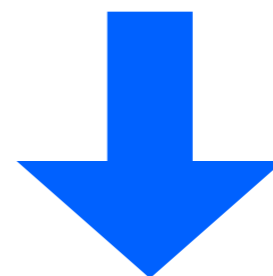


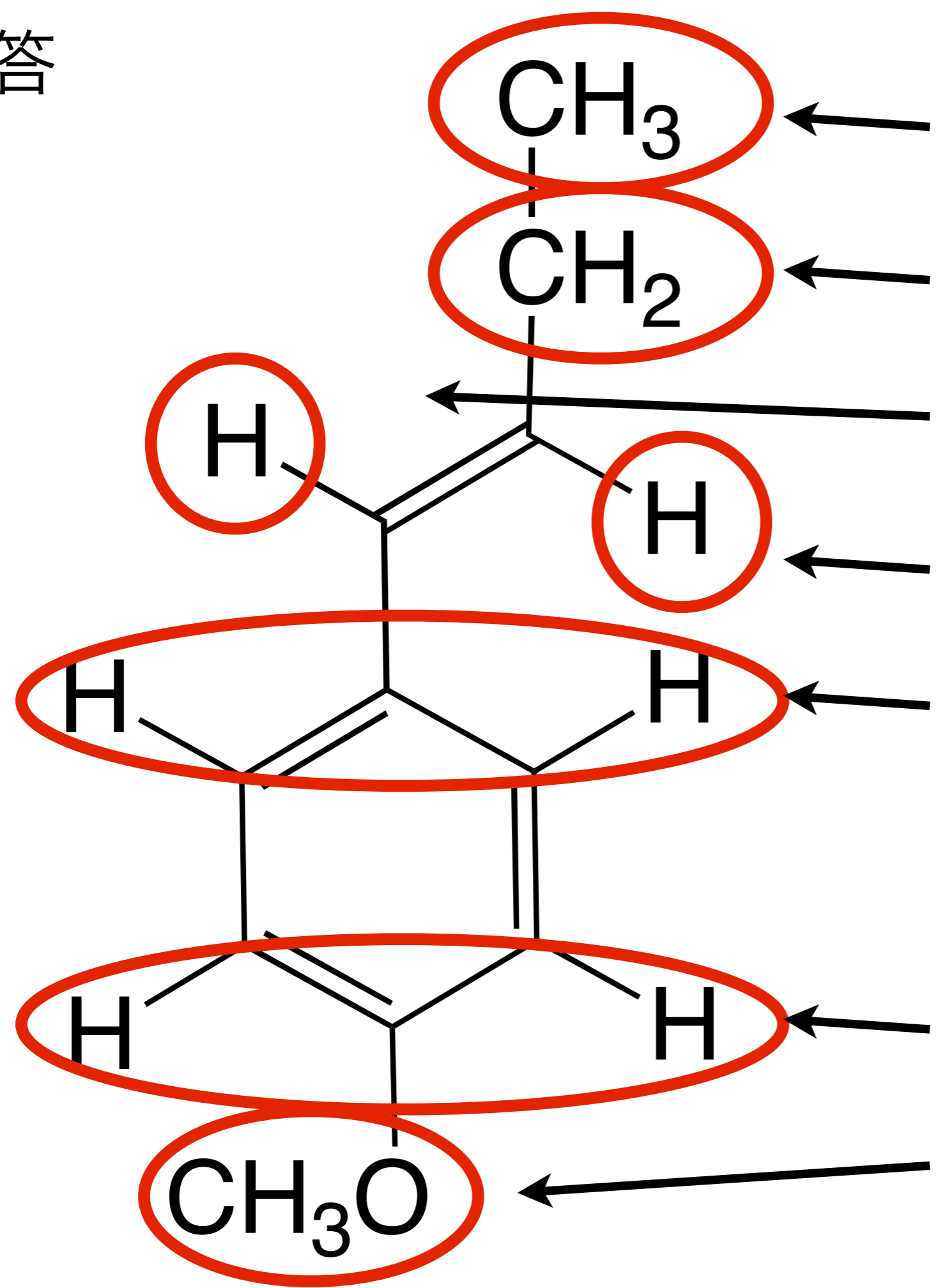
となりは
CHのみ



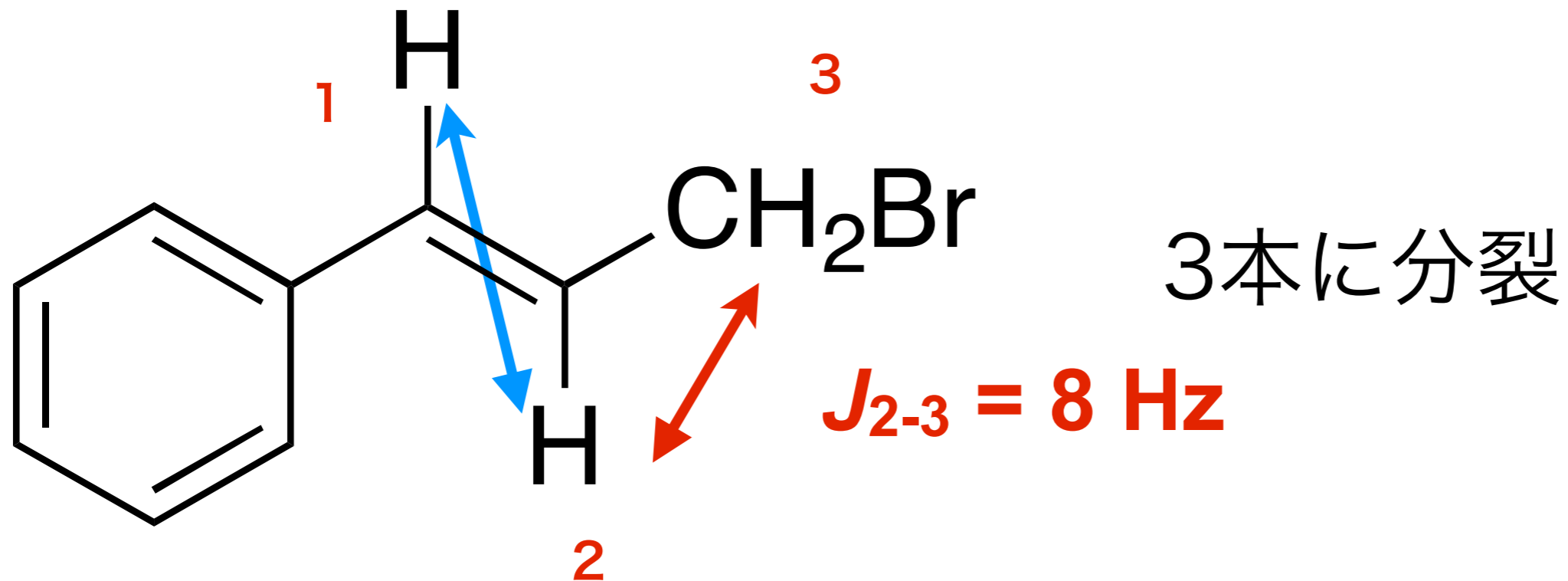


となりにはHがない





13.22解説



$$J_{1-2} = 16 \text{ Hz}$$

2本に分裂

普通はdtなので

2 x 3 = 6本のはず

中間試験（11/22）について

- 教科書類（解答付き機器分析の問題集を除く）、プリント、ノート類、電卓の持ち込みOK
- 入室制限は試験開始45分後まで（逆に終わった人は45分後以降退室OK）
- 携帯電話（インターネット）などの使用は認めない（電卓機能も含む）
- 持ち込みなりの難易度