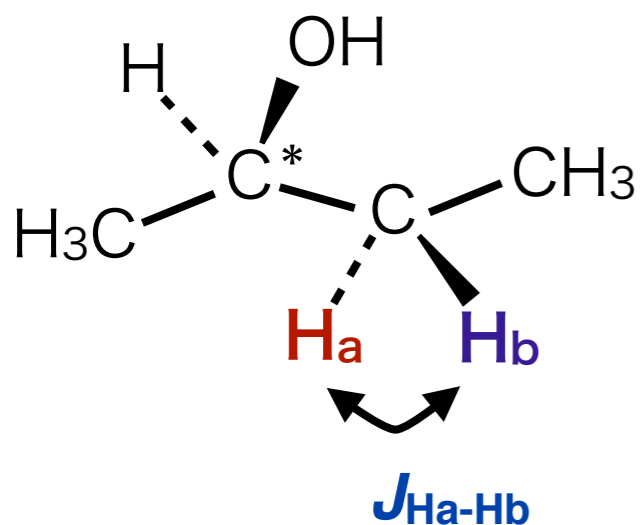


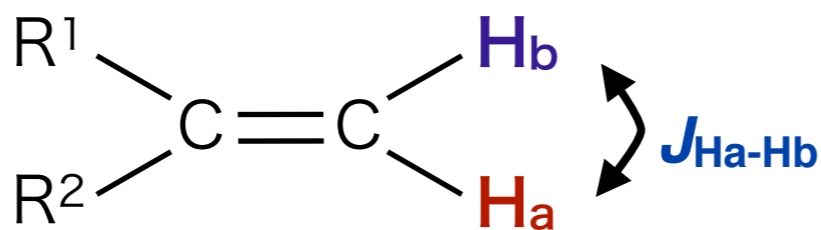
より複雑なスピン-スピン分裂パターン③

直接結合している炭素に非等価なプロトンがある場合
互いに電子的環境が異なるのでカップリングが生じる

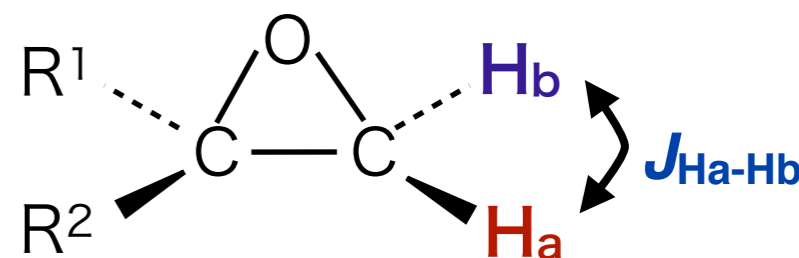
キラル化合物



アルケン

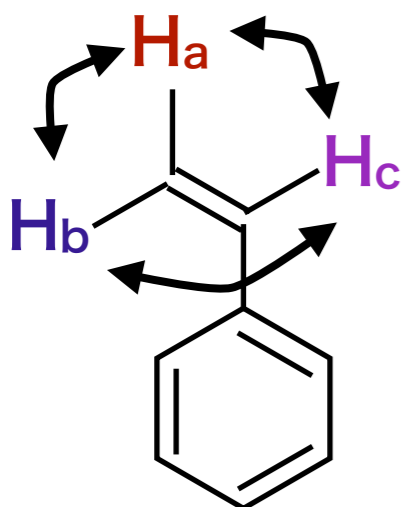


環状化合物



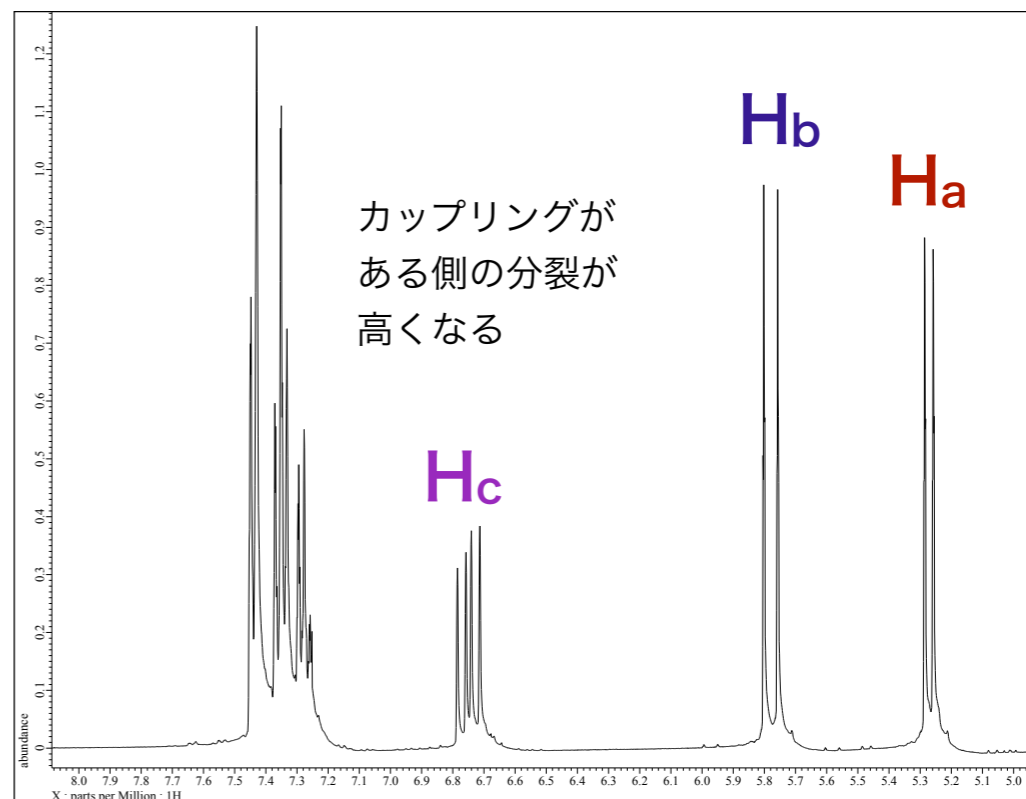
R¹ ≠ R²なら H_a と H_b は非等価 (回転しないので)

例：スチレンの場合

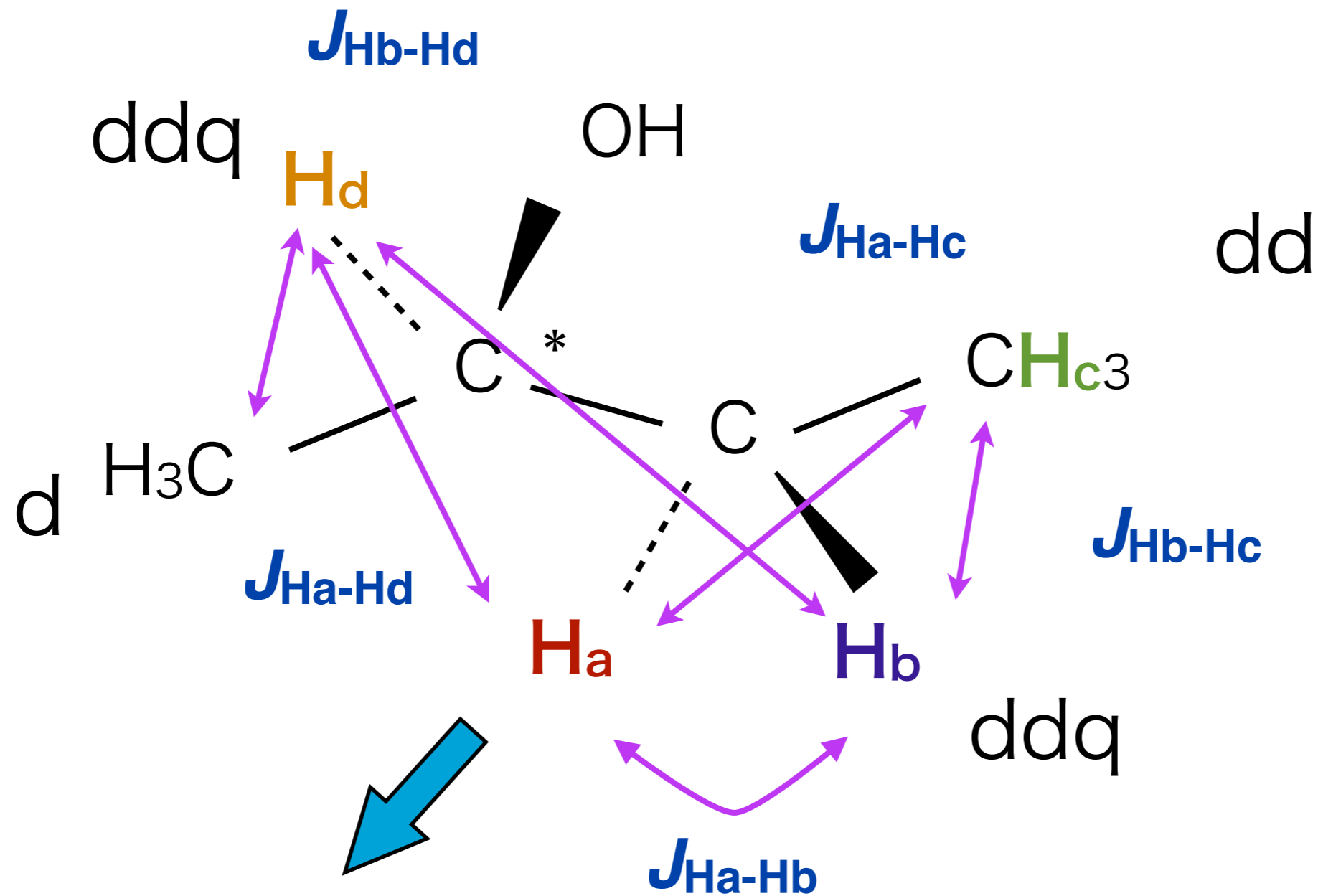


全部ddになる

(ただし $J_{\text{Ha-Hb}}$ は一般に小さい)



実際にはどう分裂するの？



H_b 1H → 1+1=2 → d
H_c 3H → 3+1=4 → q
H_d 1H → 1+1=2 → d

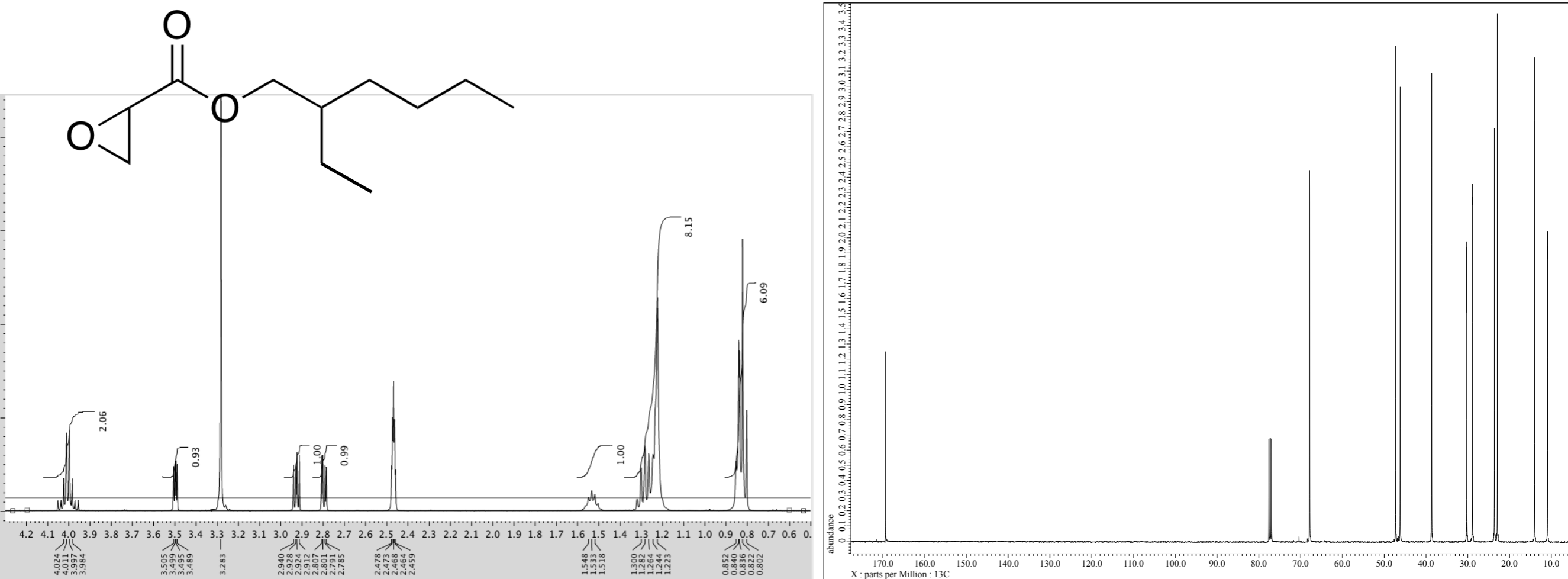
ddq

大体解析できなくて、

表記される

と

参考：論文などでのNMRデータの記述方法



¹H NMR (*d*₆-DMSO, 400 MHz, δ in ppm): 4.18–4.05 (m, 2H, —COOCH₂—), 3.53 (dd, 1H, *J* = 2.4 and 4.0 Hz, —OCHCOO—), 2.96 (dd, 1H, *J* = 4.0 and 6.4 Hz, —OCH₂CHCOO—), 2.83 (dd, 1H, *J* = 2.4 and 6.4 Hz, —OCH₂CHCOO—), 1.60–1.50 (m, 1H, CH₃CH₂CH<), 1.35–1.24 (m, 2H, —CH(CH₂CH₃)(CH₂)₃—), 0.87 (3H, t, *J* = 6.8 Hz, —CH(CH₂CH₃)), 0.86 (3H, t, *J* = 7.6 Hz, —(CH₂)₃CH₃).

¹³C NMR (CDCl₃, 100 MHz, δ in ppm): 169.4 (>C=O), 67.8 (—COOCH₂—), 47.3 (—CHCH₂— in epoxy ring), 46.2 (—CHCH₂— in epoxy ring), 38.6 (CH₃CH₂CH<), 30.2 (CH₃CH₂CH₂CH₂—), 28.8 (CH₃CH₂CH₂—), 23.6 (CH₃CH₂CH<), 22.9 (CH₃CH₂CH₂—), 14.0 (CH₃(CH₂)₃—), 10.9 (CH₃CH₂CH<).

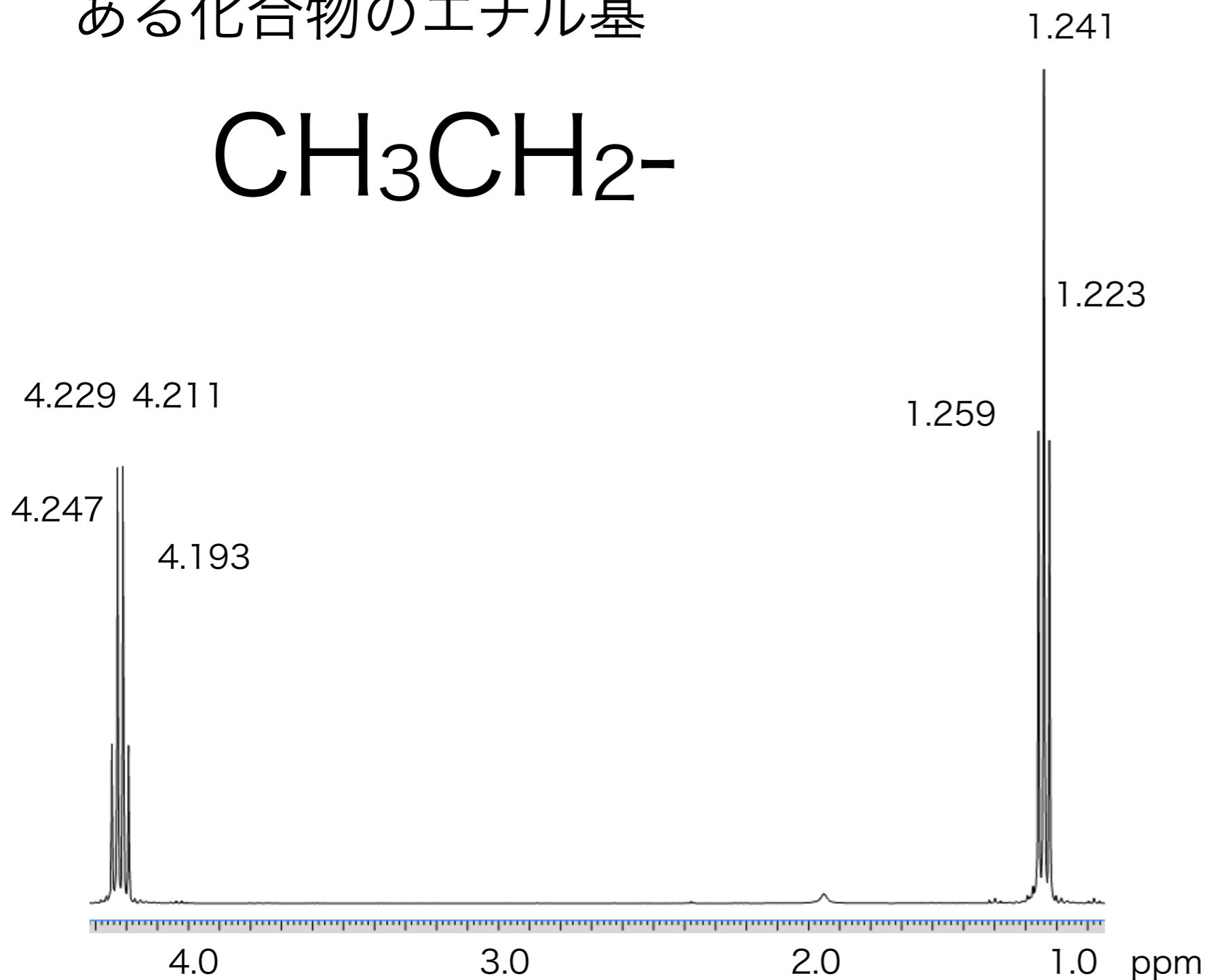
CH₃、CH₂、CHが複数種あるが、判別できるように記述してある。

昇順、降順は雑誌によったり、個人の好みによったりする。

かなりマニアックな化合物ですが、参考まで……

スペクトルからJ値を求める (t)

ある化合物のエチル基



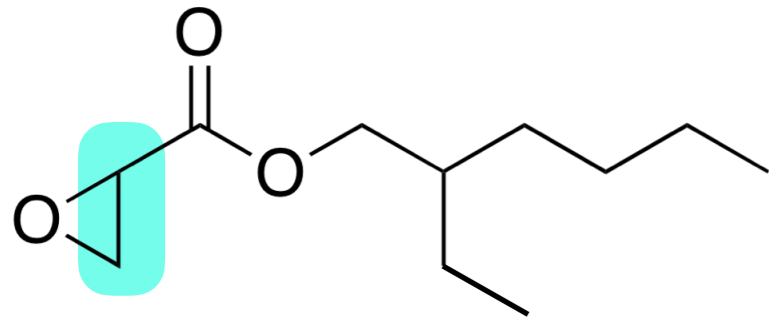
メチル基から
求めてみる

1.259 1.241 1.223

400MHzの装置の
場合のJ値は

$J =$

スペクトルからJ値を求める (dd)



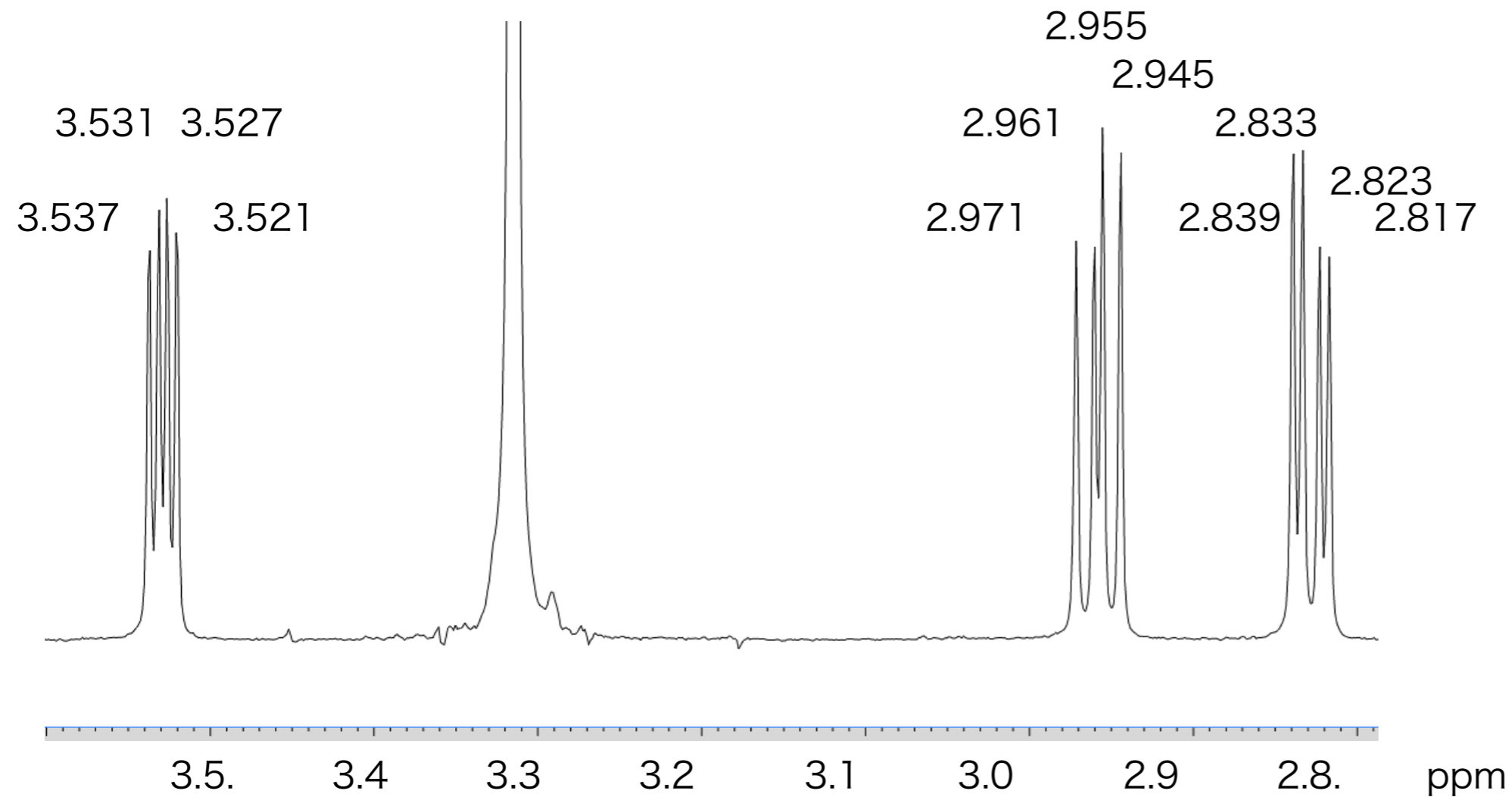
3.53 (dd, 1H, $J = 2.4$ and 4.0 Hz, —OCHCOO—)

2.96 (dd, 1H, $J = 4.0$ and 6.4 Hz, $\text{—OCH}_2\text{CHCOO—}$)

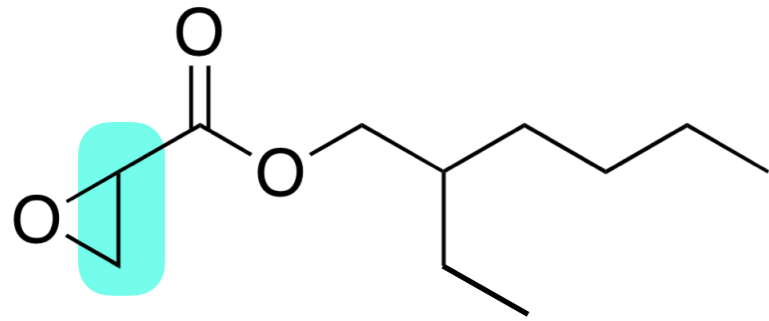
2.83 (dd, 1H, $J = 2.4$ and 6.4 Hz, $\text{—OCH}_2\text{CHCOO—}$)

このデータは

どうやって
これから
出したの？



スペクトルからJ値を求める (dd)

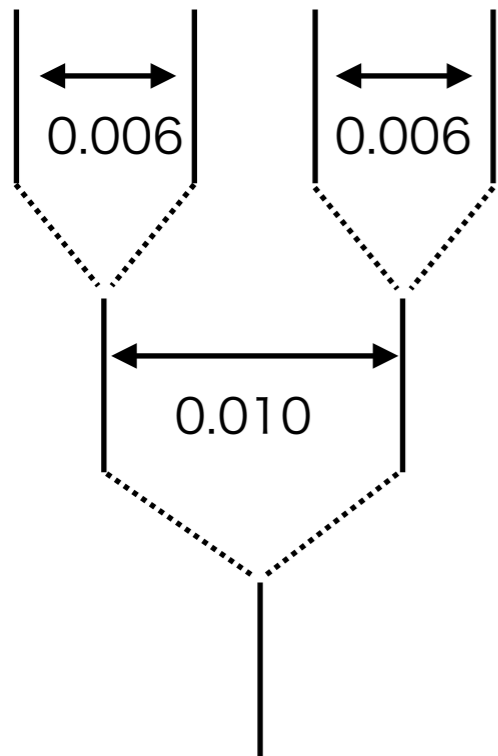


3.53 (dd, 1H, $J = 2.4$ and 4.0 Hz, —OCHCOO—)

2.96 (dd, 1H, $J = 4.0$ and 6.4 Hz, —OCH₂CHCOO—)

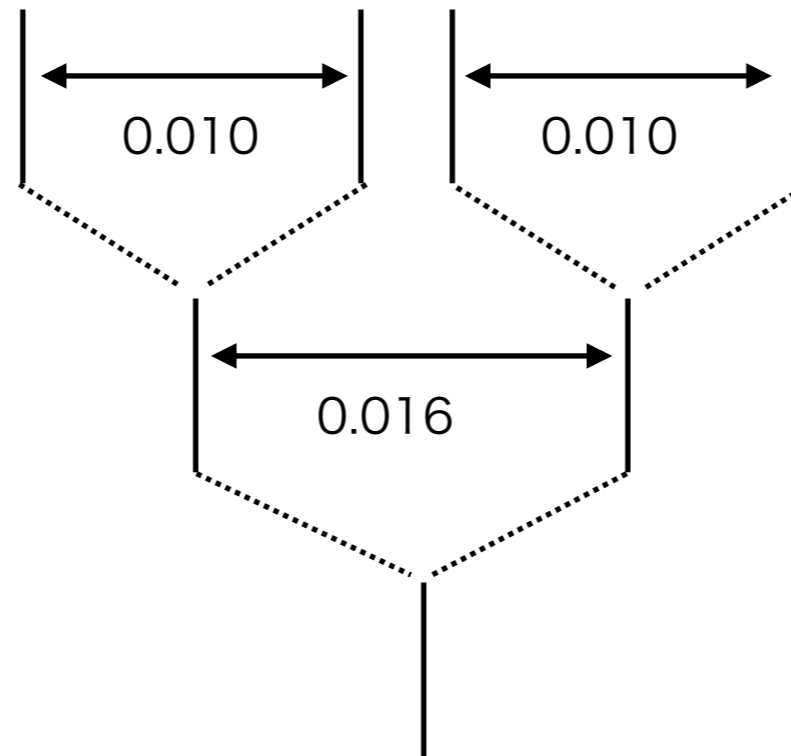
2.83 (dd, 1H, $J = 2.4$ and 6.4 Hz, —OCH₂CHCOO—)

3.537 3.531 3.527 3.521



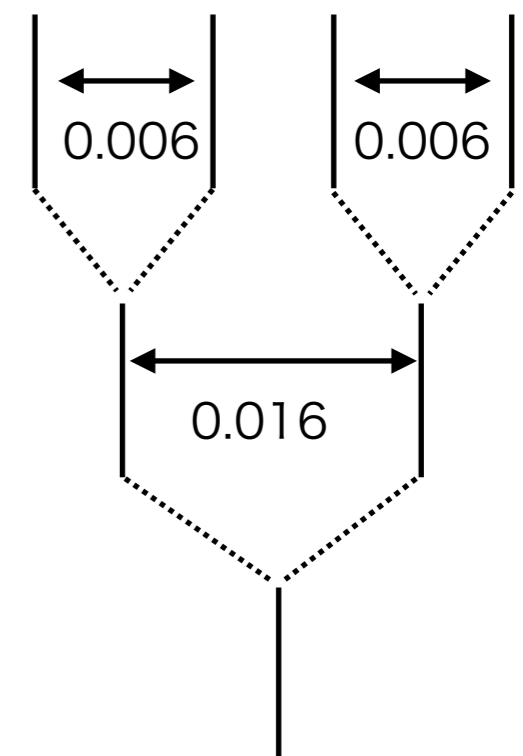
H_A

2.971 2.961 2.955 2.945



H_B

2.839 2.833 2.823 2.817



H_C

$J =$

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