

ウオーレン 3 章章末問題の解答例:

1. (a) M^+ (100%) に対して $(M+2)^+$ (100%)
 (c) M^+ (100%) に対して $(M+2)^+$ (133%), $(M+4)^+$ (33%)

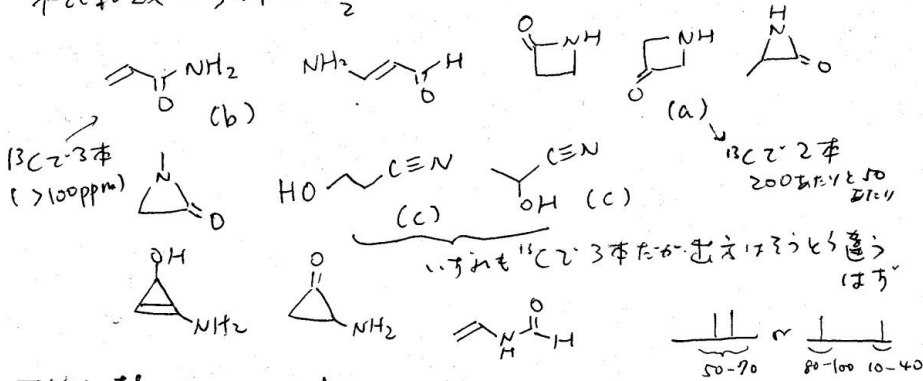
4. 不飽和数 = $2 + 1 - \frac{(3+3)}{2} = 0$

Cl_2CH-CH_2Cl か Cl_3C-CH_3 のどちらか。これに
 $CDCl_3$ が 77 ppm 2 重線と Σ 重線と π 重線の 3 重線も
 95 ppm に 1 重線と Σ 重線と π 重線の 3 重線も
 1 重線と Σ 重線と π 重線の 3 重線も 1H NMR が良いはず。1 本しか
 2, 7, 7 に 1 重線と Σ 重線と π 重線の 3 重線も

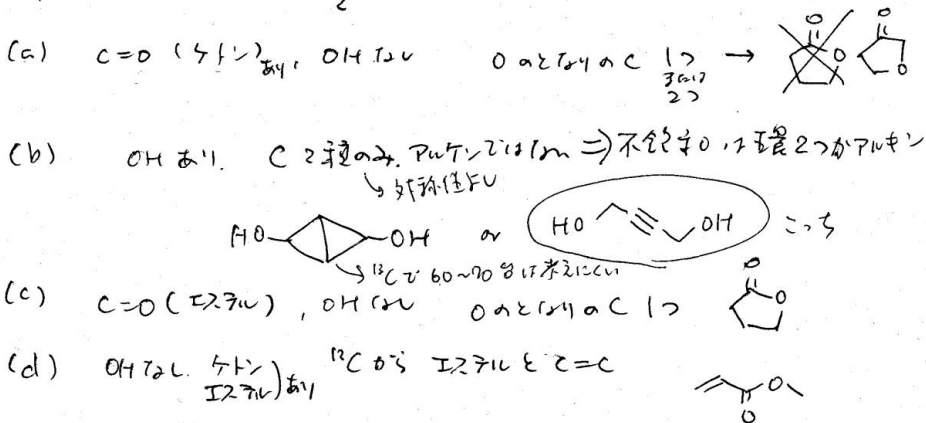
5. $\mu_{OH} = \frac{16 \times 1}{16 + 1} = 0.94$ $\mu_{OD} = \frac{16 \times 2}{16 + 2} = 1.78$ $\mu_{SH} = \frac{32 \times 1}{32 + 1} = 0.97$

理由 $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{F}{\mu}}$ であり、 μ が異なると f が同じ比率で置換して
 ν は同じ値となる。(cf. 結合エネルギー - $O-H$ 439 kJ/mol に
 対して $S-H$ 367 kJ/mol、結合エネルギーと力の定数は異なりはるかに異なる)

6. 不飽和数 = $3 + 1 - \frac{5-1}{2} = 2$



7. 不飽和数 = $4 + 1 - \frac{6}{2} = 2$



8. MS 115 (奇数) → 奇数個のN (たぶん CH₃N由来)

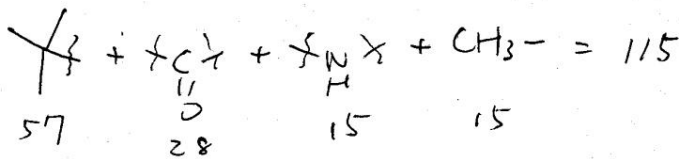
(難) COH MW 74, CH3CN MW 41 2つを丁度 115.

つまりこれらが 1:1 でくっついたものと想定される。

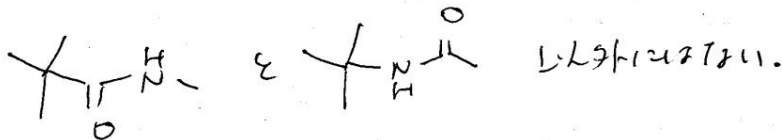
IR 1686 と ¹³C 169 は C=O の存在を示す。

また IR 3435 は OH と NH の存在を示す。ここで O があれば C=O の O に使われてしまうと NH ということができない。

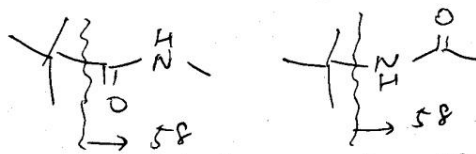
¹³C の 29, 25 と ¹H の 1.8, 1.4 は 2 種類の炭素基。つまり tBu 基の 3 つの等価な炭素、もう一つは CH3CN に由来するメチルの存在を意味する。



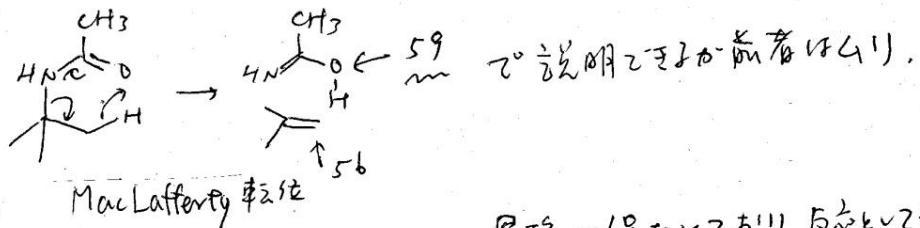
これらの組み合わせは



MS で最大のフラグメントは 58。これは



このうちどちらを説明するか。前者は 59 は、後者は

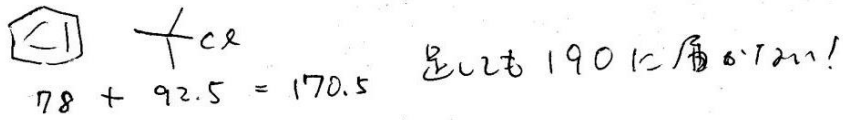


また、後者は CH3CN の C-C-N の骨格が保たれており、反応して H-2+7il. (実際は 3.12 ¹³C の 50 ppm (CH3)2C=N がより大きいフラグメントと見られる) 以上

9. A. 2 B. 2 C. 3 D. 2 E. 3

対称性考慮.


10.





是れも 190 に属する!

H はベンゼン同様に 1 本, X の H は 2 本

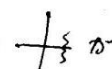
つまり,  と  はあり得る。そのうち

 が対称性を持つのは MW 134 しかない。

したがって  が λ である。例として  だと

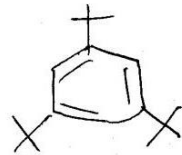
MW 190 と一致する。他に o, m-置換もある。

対称性から考えてこの p-体である。

次の MW 246 は。H の数は  が λ である。

対称性から考えて

↓
 $^1\text{H NMR}$ をみる



である。

以上