

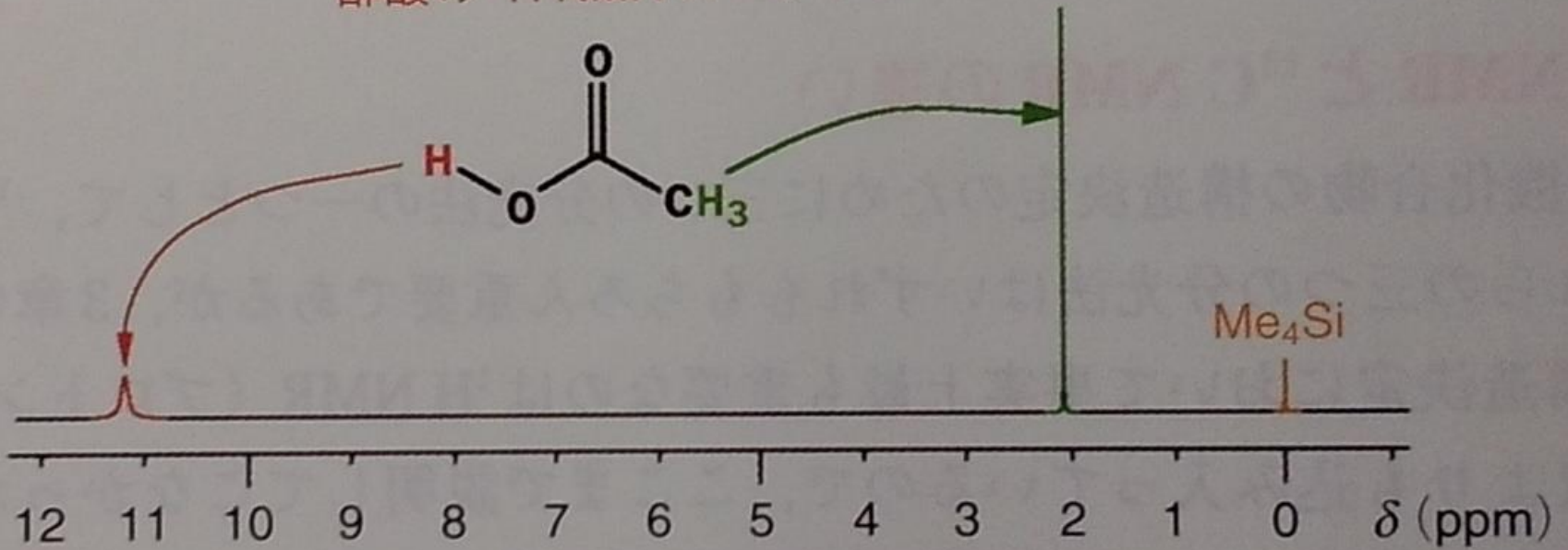
プロトンNMR

プロトンNMR (^1H NMR)

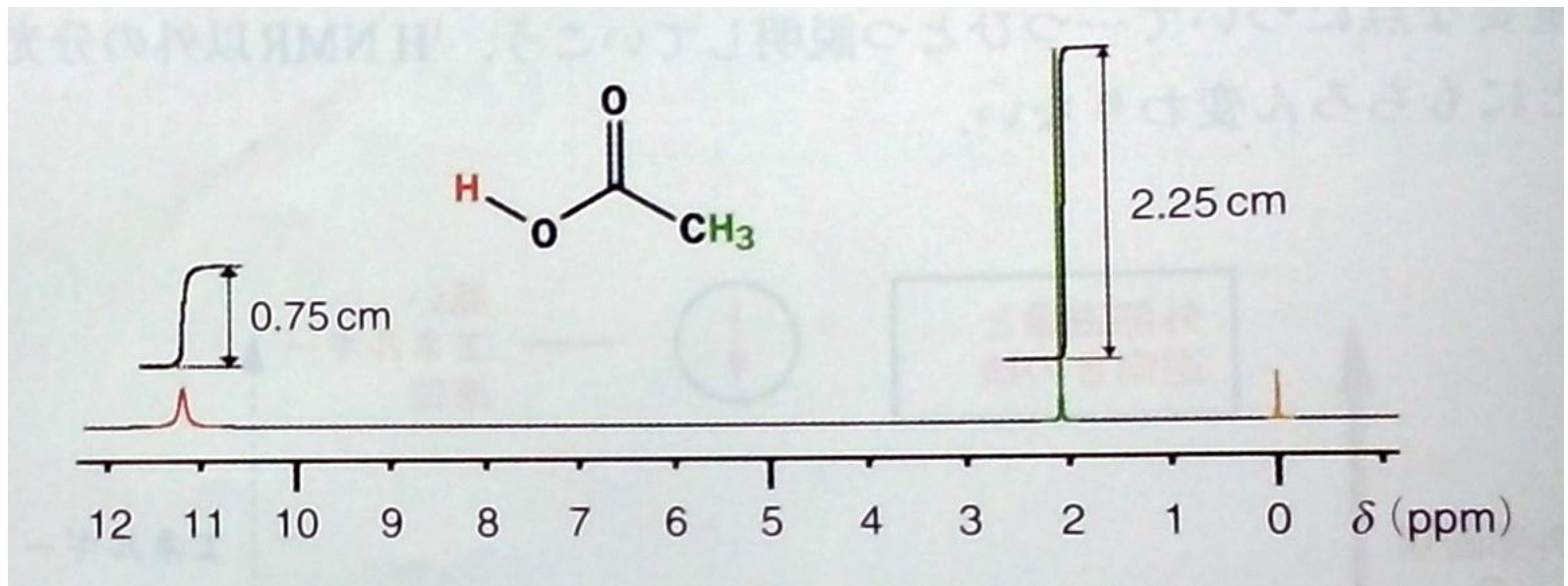
- ・プロトンとは、酸のことではなく、水素原子の原子核を指している。
- ・天然存在比>99.9%の核なので、十分なシグナル強度がとれる。
サンプル量1 mg以下でもOK。
- ・ピーク面積に定量性があり、プロトンの個数(の比率)が分かる。
- ・スピン結合(カップリング)によって隣の炭素上の水素の数が分かる。
- ・化学シフトの傾向は ^{13}C NMRとおおむね似ている。

^1H NMRの例

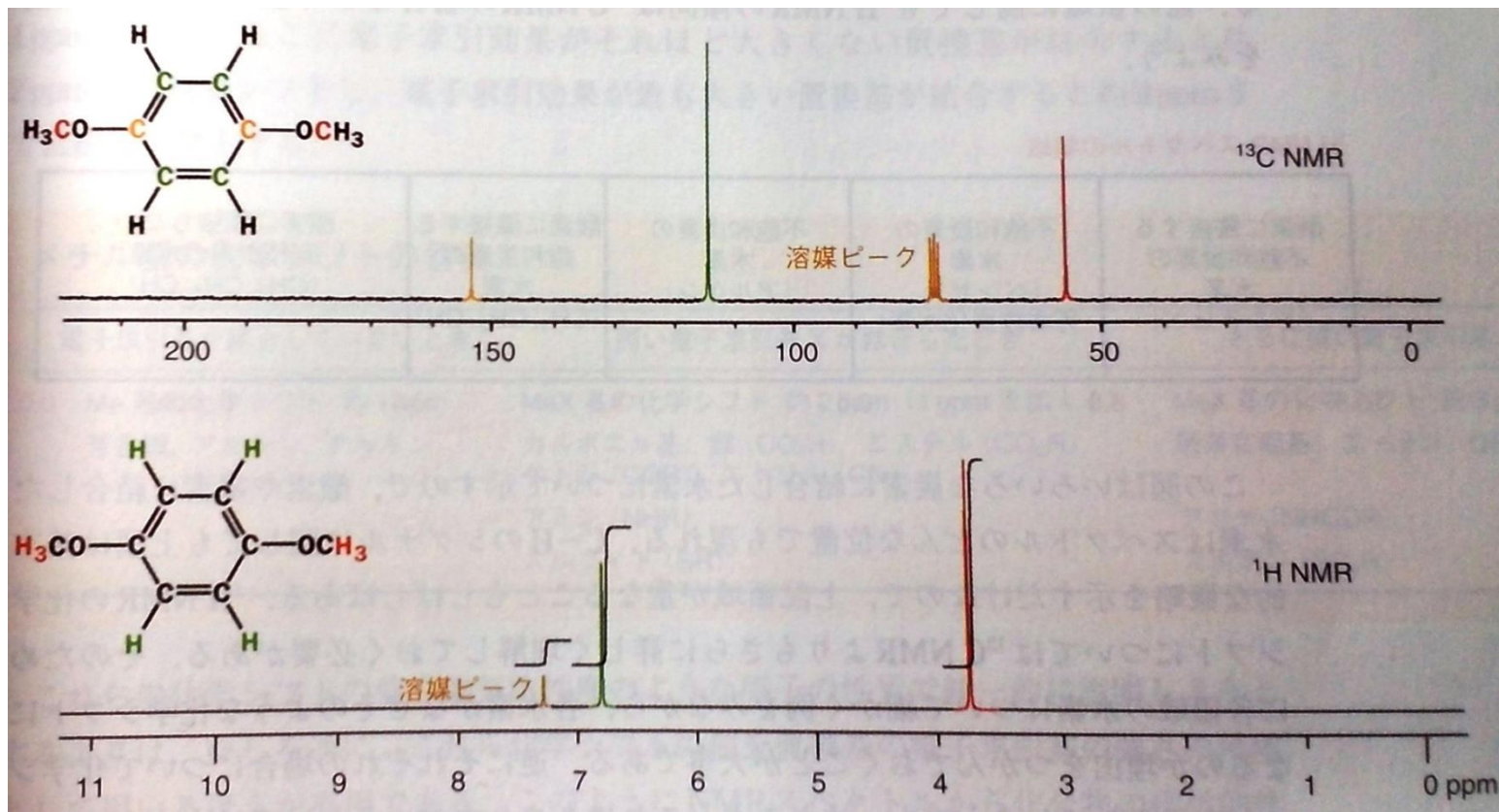
酢酸の ^1H NMR スペクトル



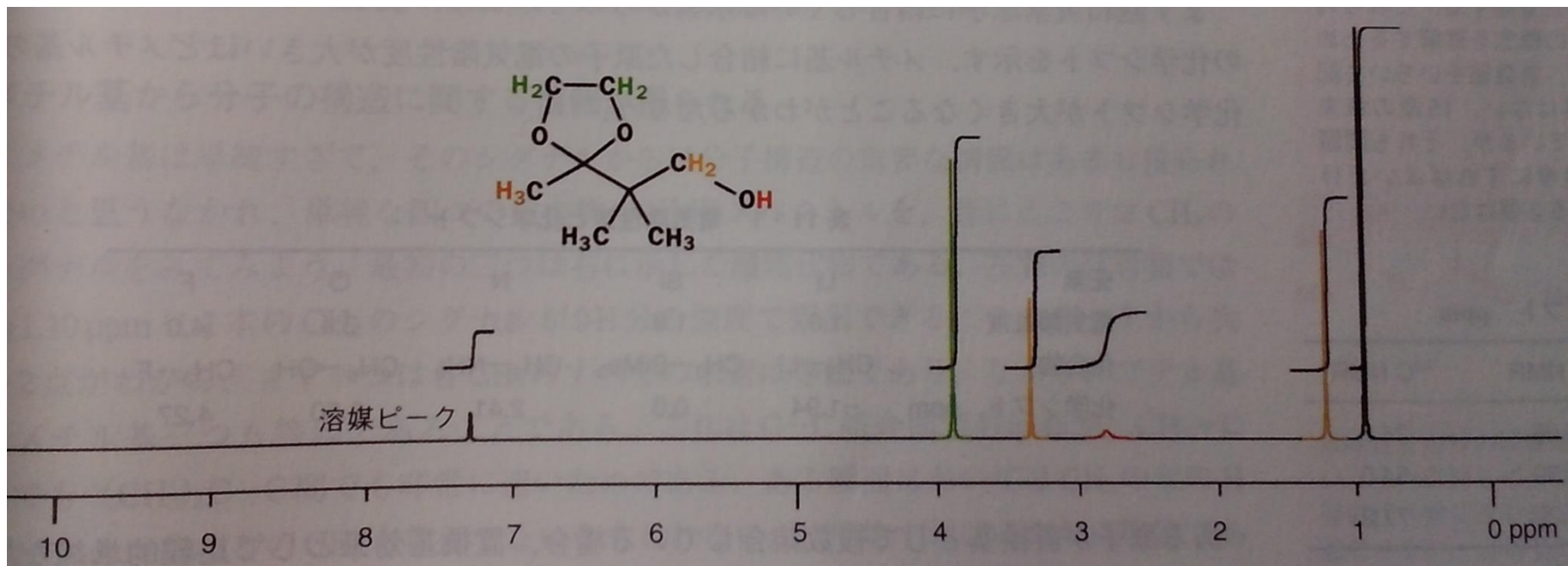
ピークの面積(積分値)



化学シフト (^{13}C NMRとの比較)



プロトンの微視的環境と化学シフト

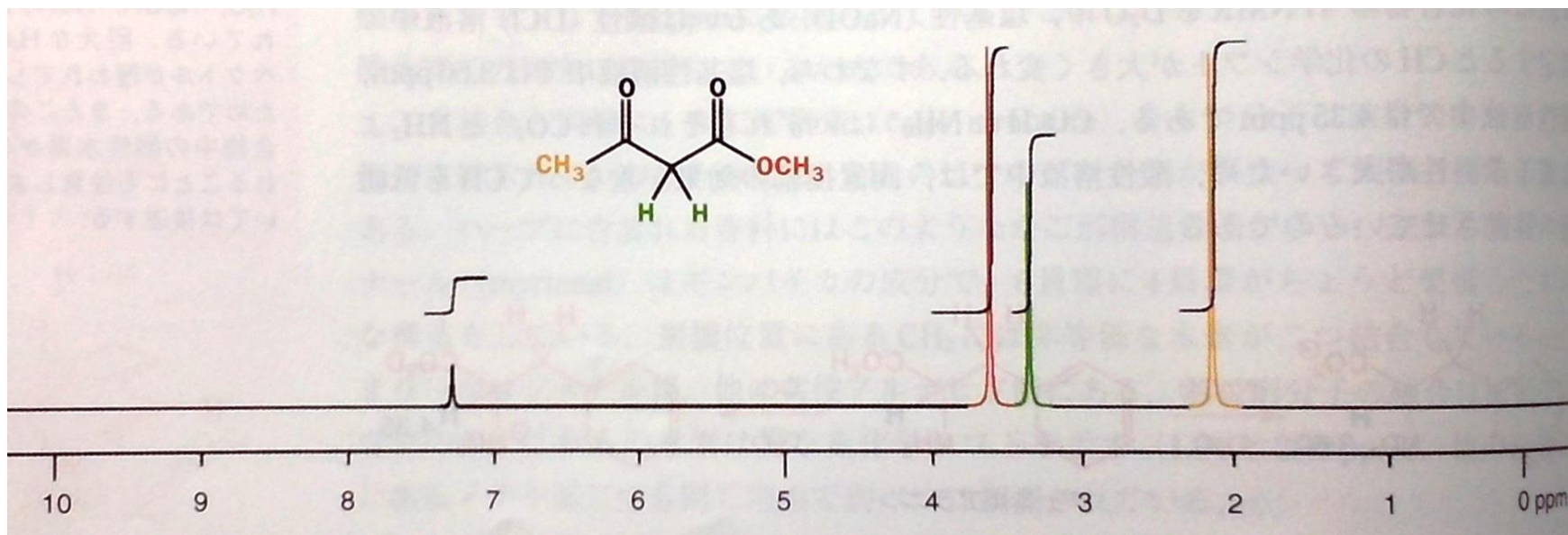


プロトンの微視的環境と化学シフト (2)

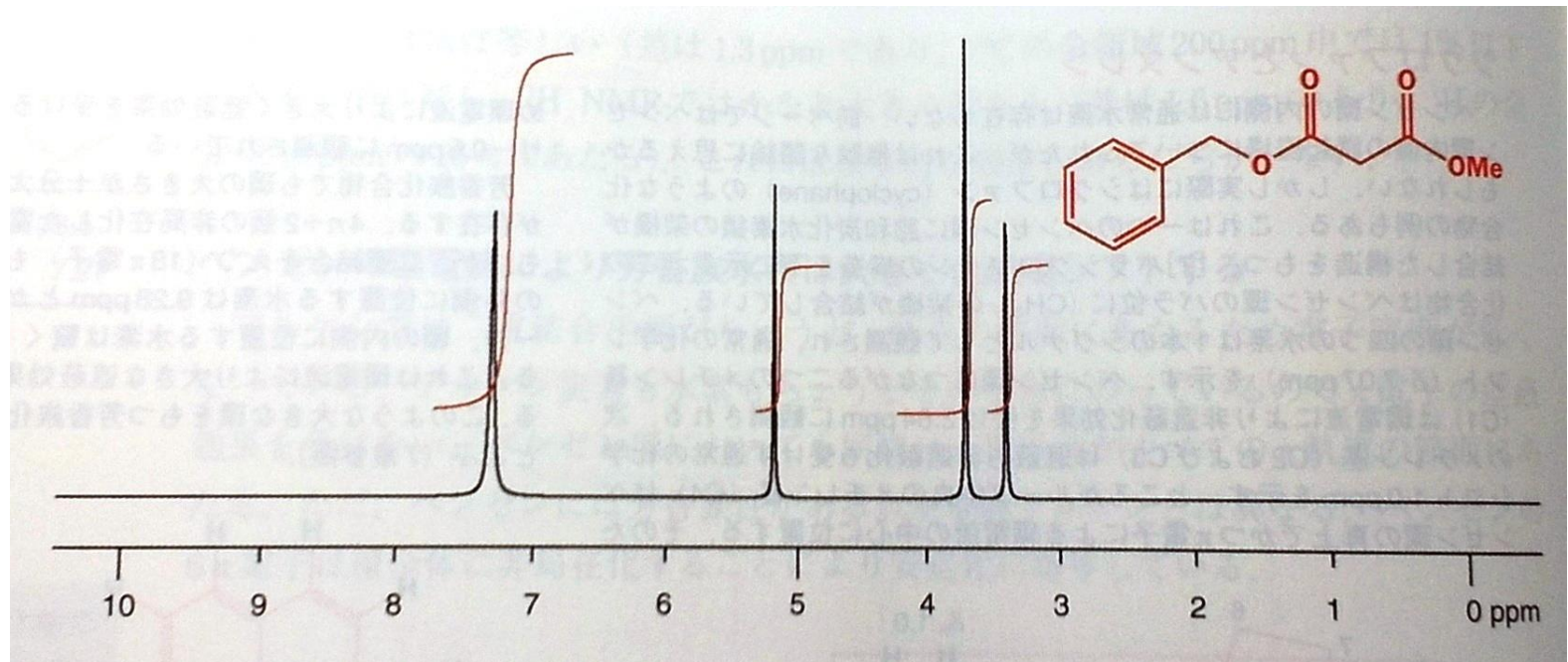
表 11・1 電気陰性度と化学シフト

元素	Li	Si	N	O	F
電気陰性度	1.0	1.9	3.0	3.4	4.0
化合物	CH ₃ -Li	CH ₃ -SiMe ₃	CH ₃ -NH ₂	CH ₃ -OH	CH ₃ -F
化学シフト, ppm	-1.94	0.0	2.41	3.50	4.27

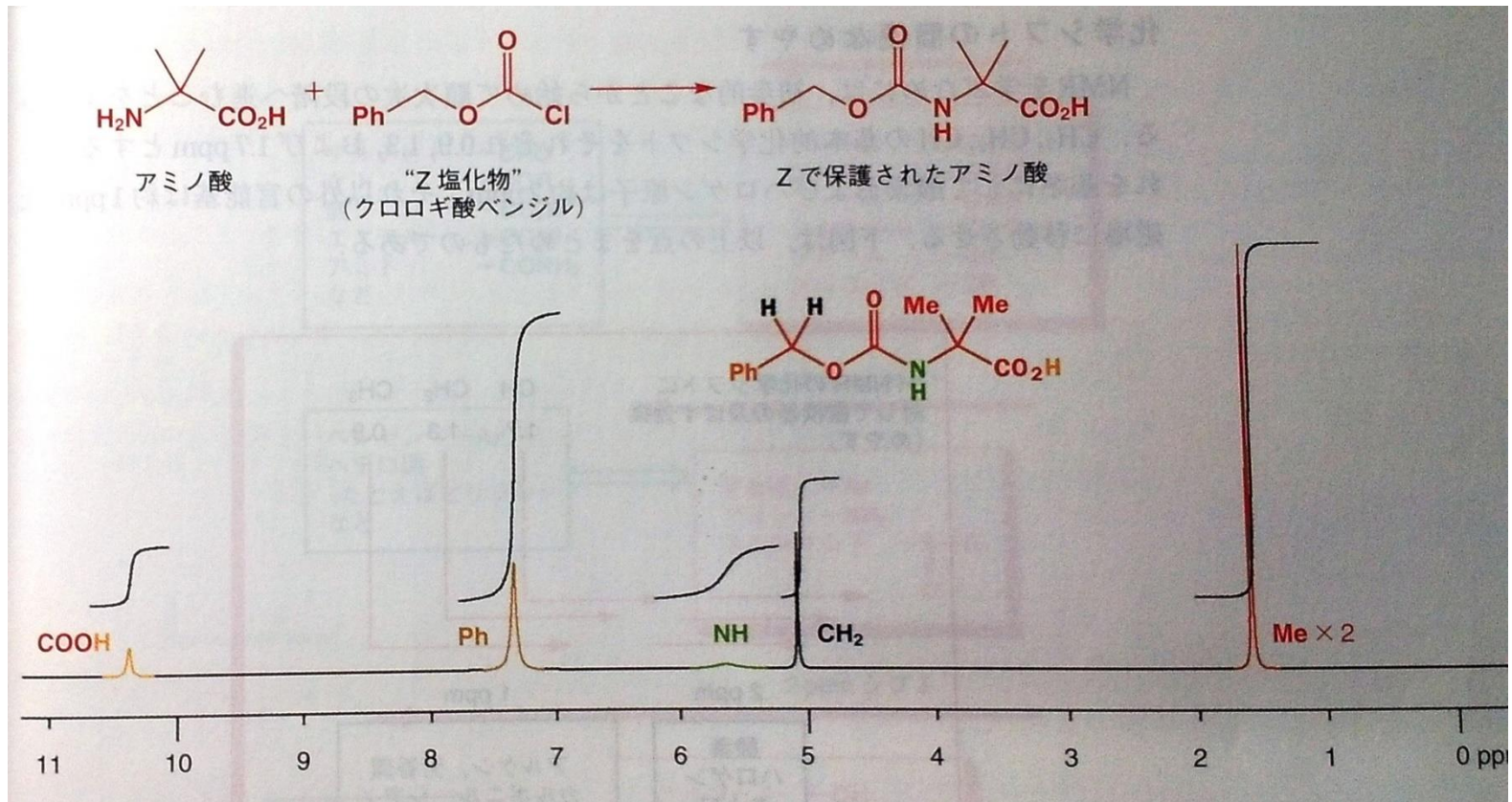
プロトンの微視的環境と化学シフト (3)



プロトンの微視的環境と化学シフト (4)

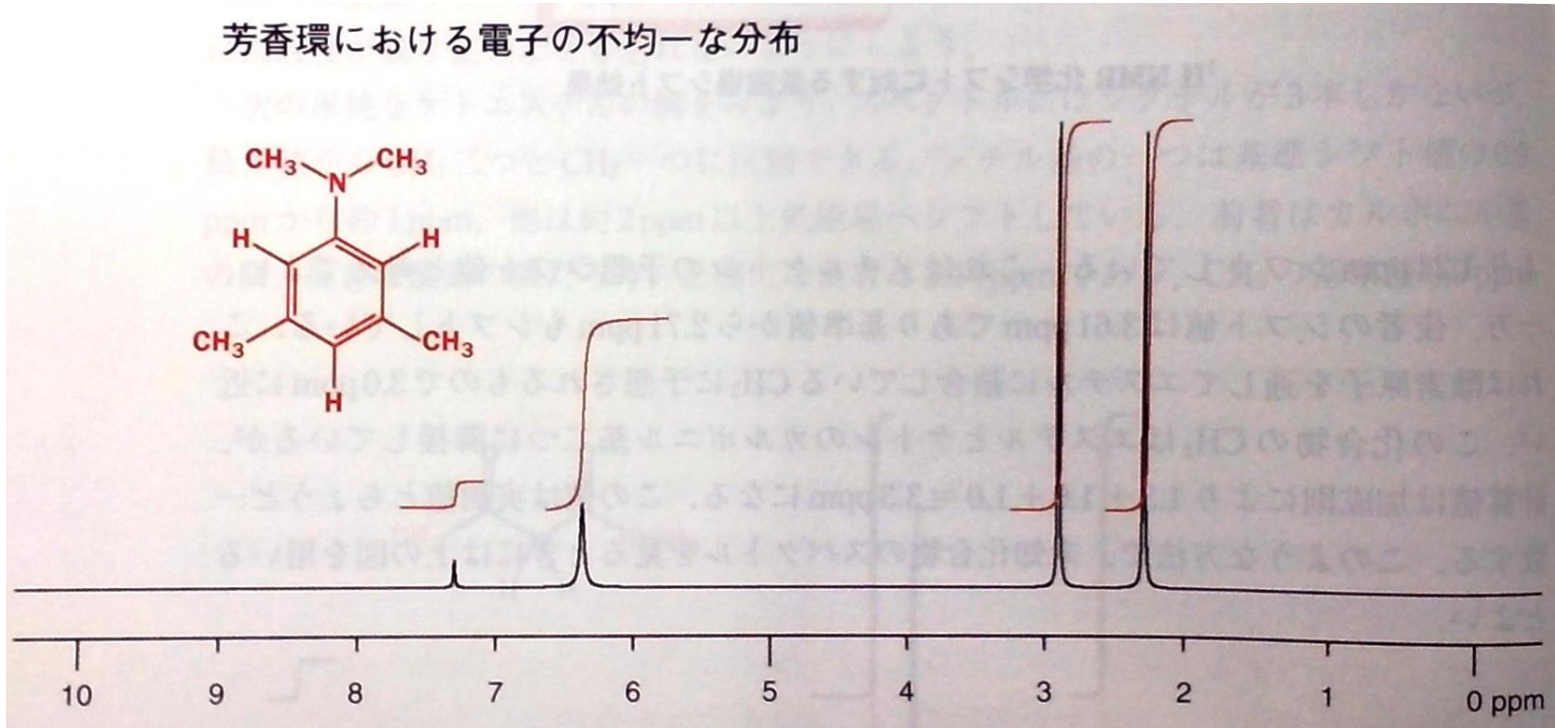


プロトンの微視的環境と化学シフト (5)

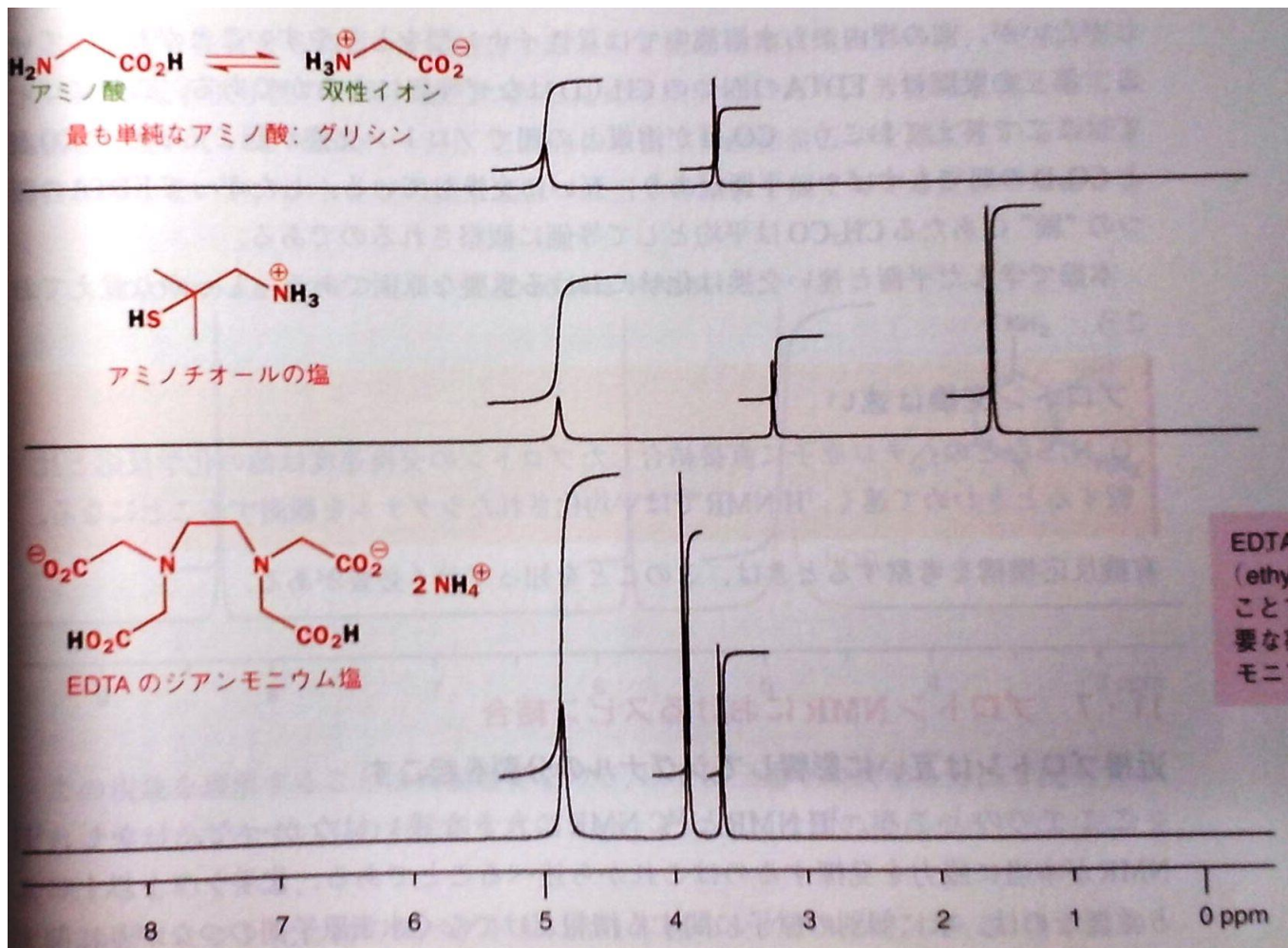


プロトンの微視的環境と化学シフト (6)

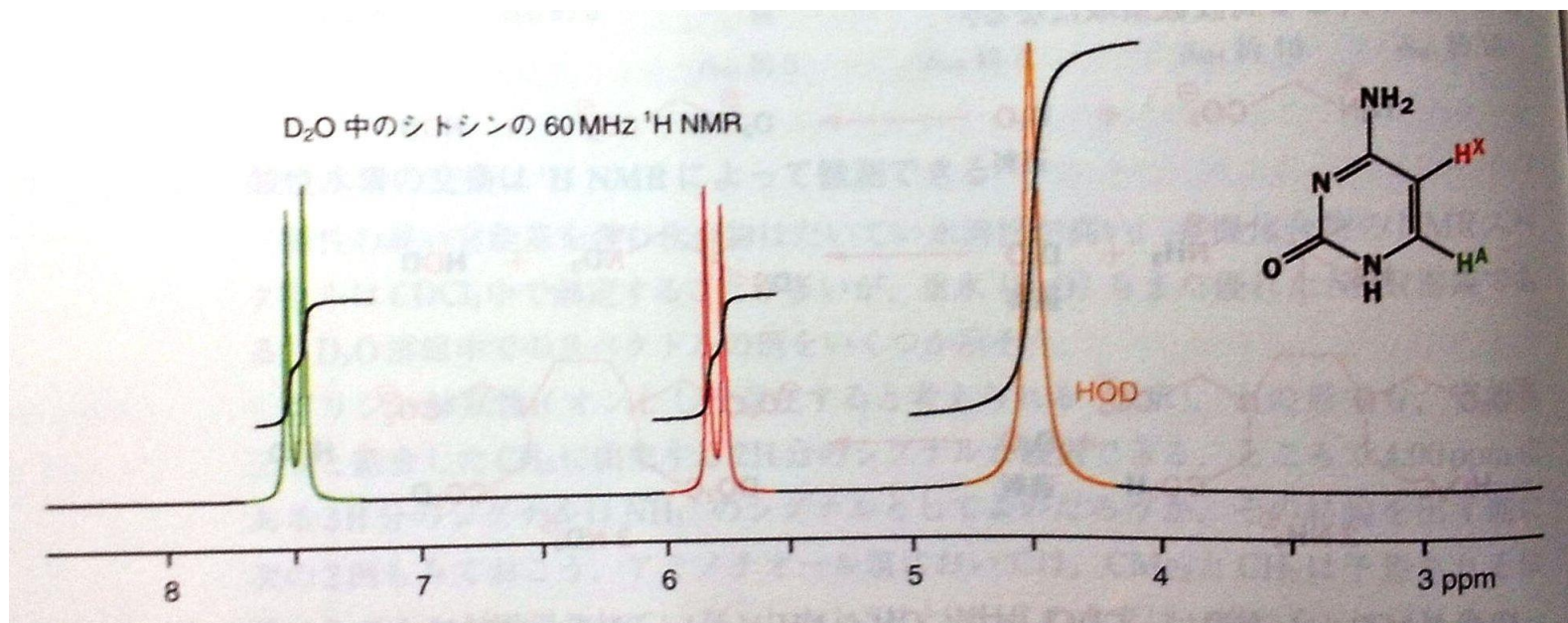
芳香環における電子の不均一な分布



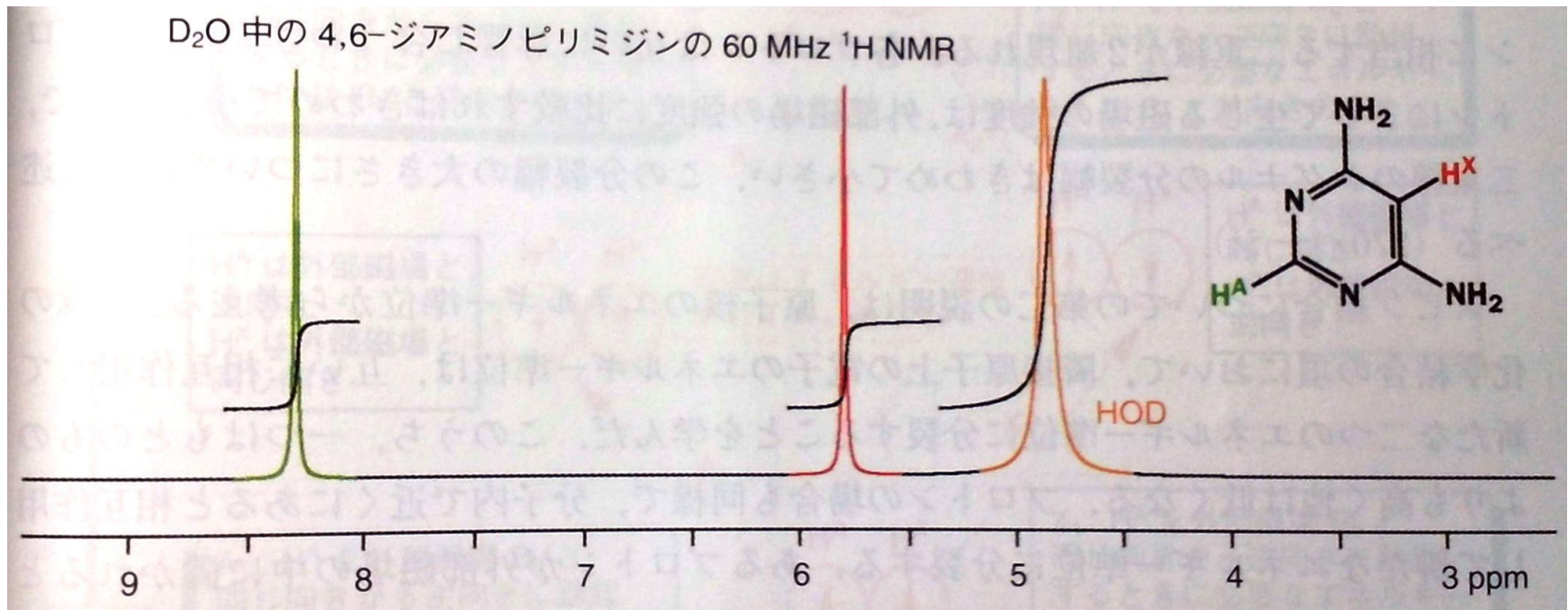
ヘテロ原子に結合したプロトン (2)



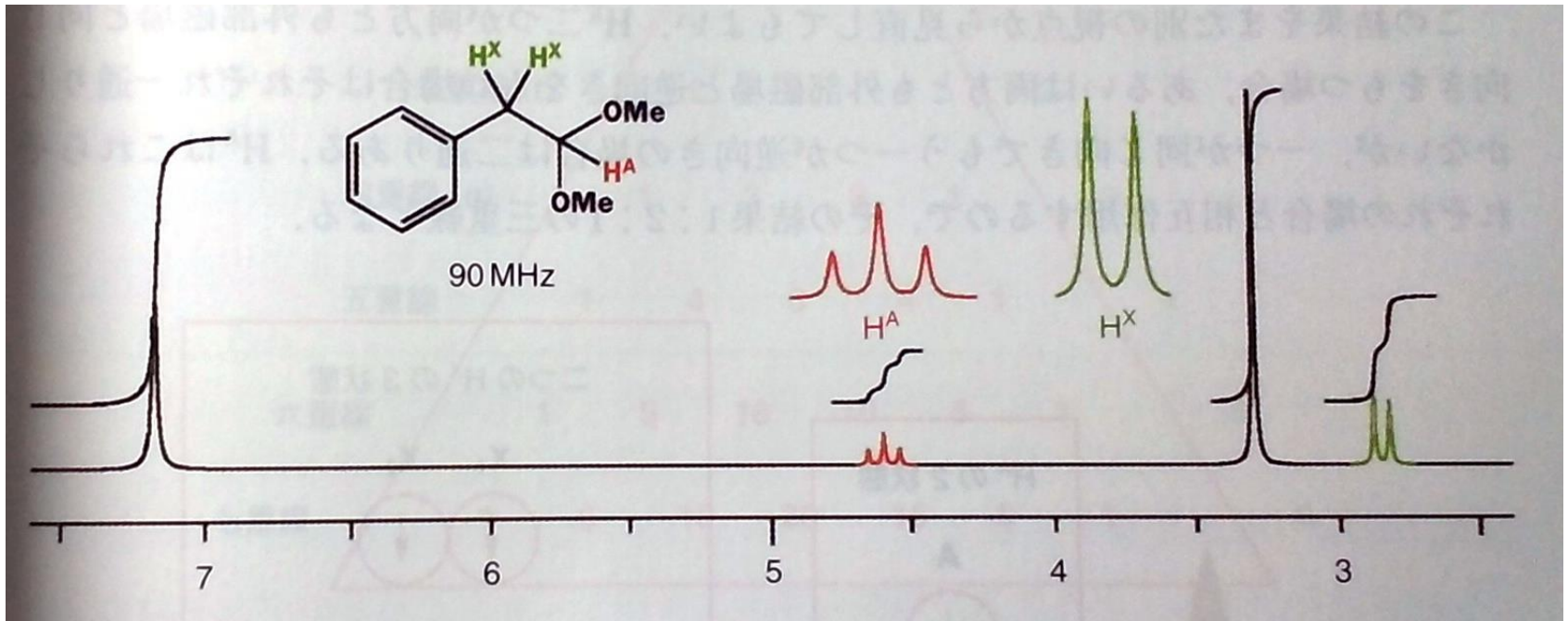
ヘテロ原子に結合したプロトン と スピンスピン結合 (カップリング)



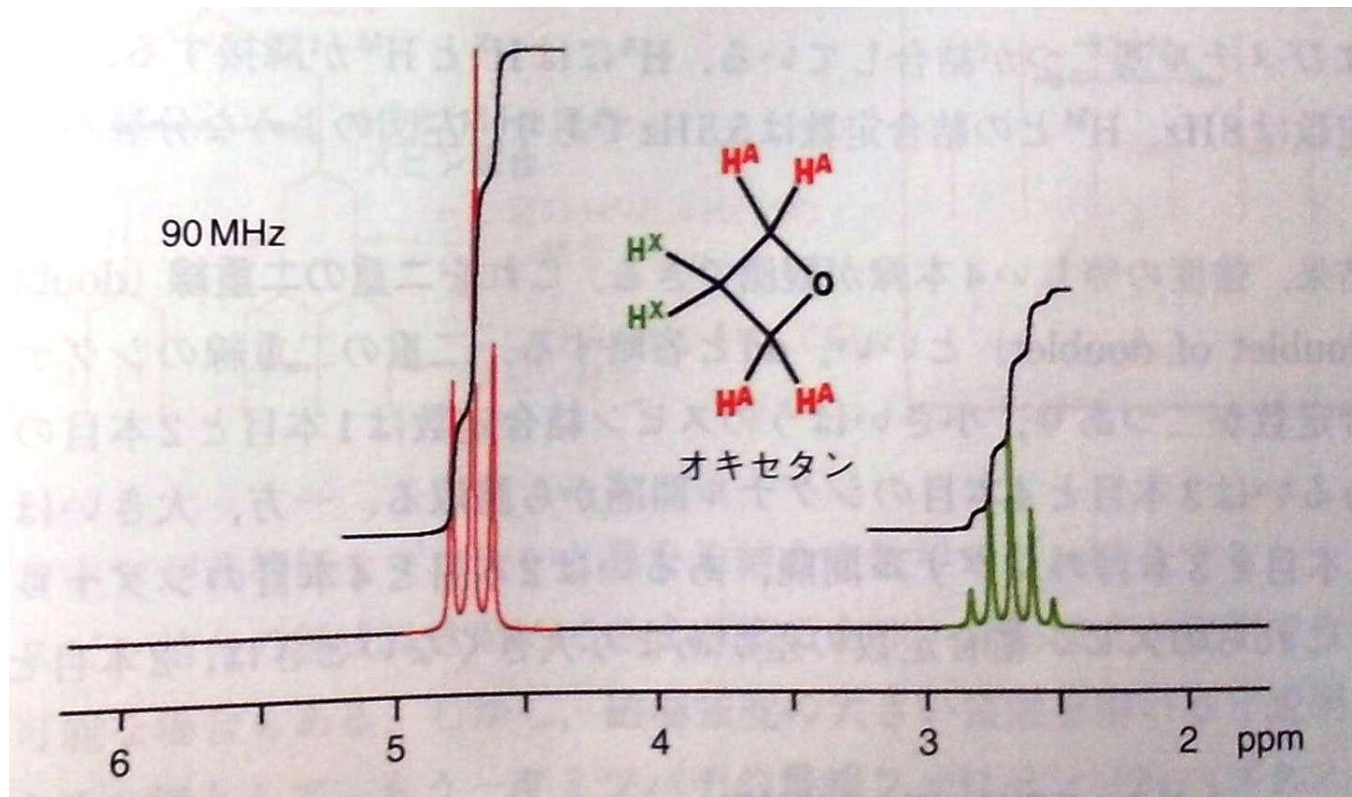
ヘテロ原子に結合したプロトン と スピンスピン結合 (カップリング) (2)



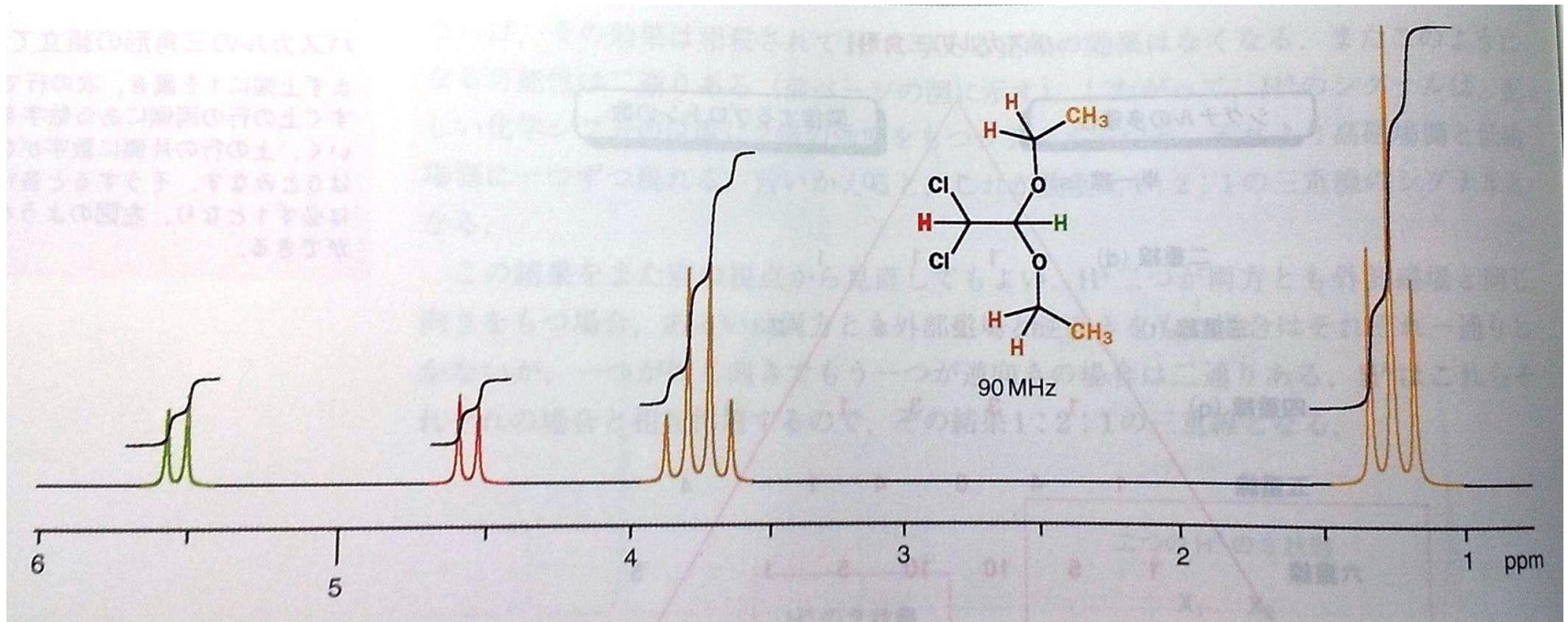
スピンスピン結合(カップリング)



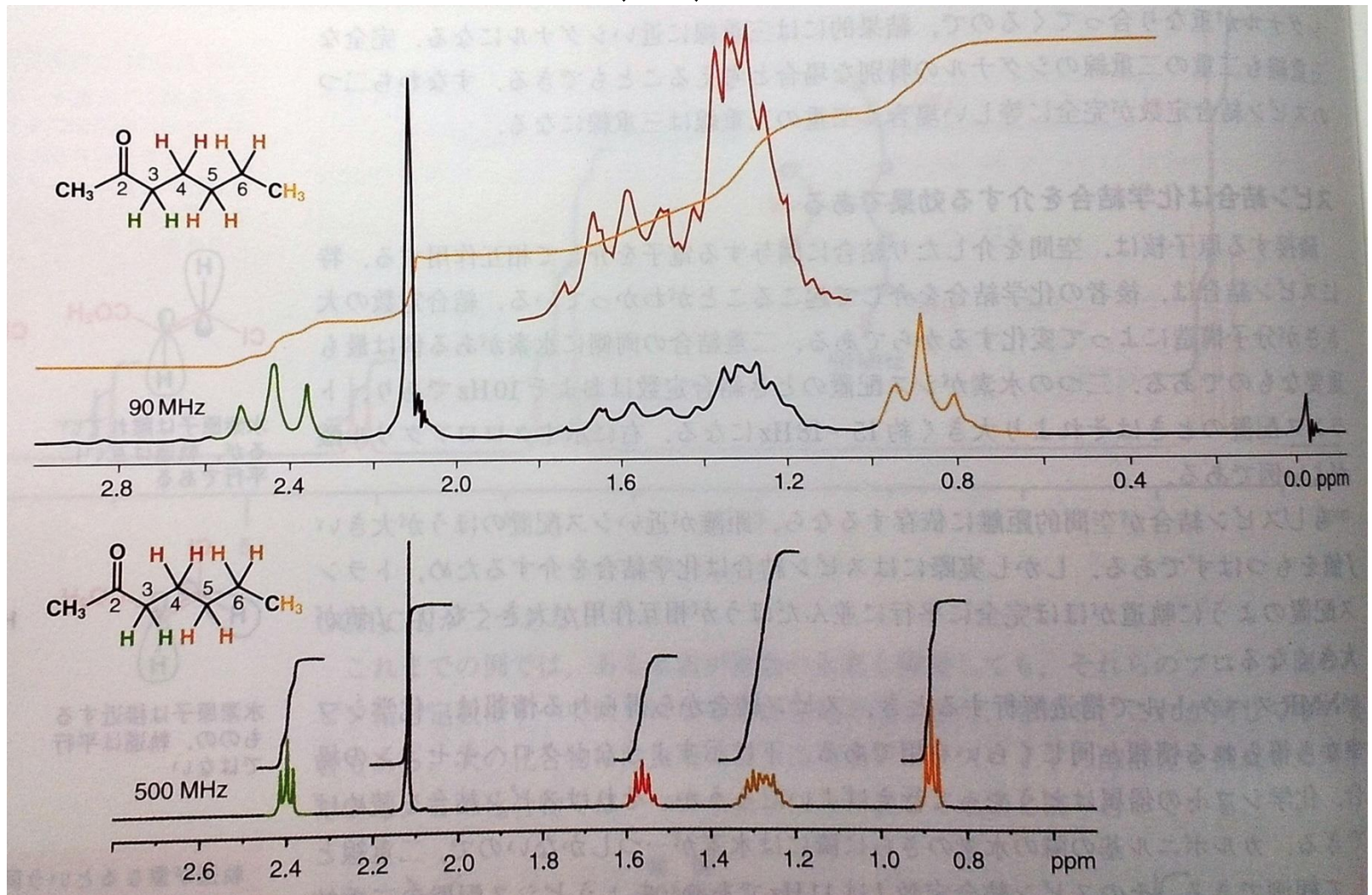
スピンスピン結合 (カップリング) (2)



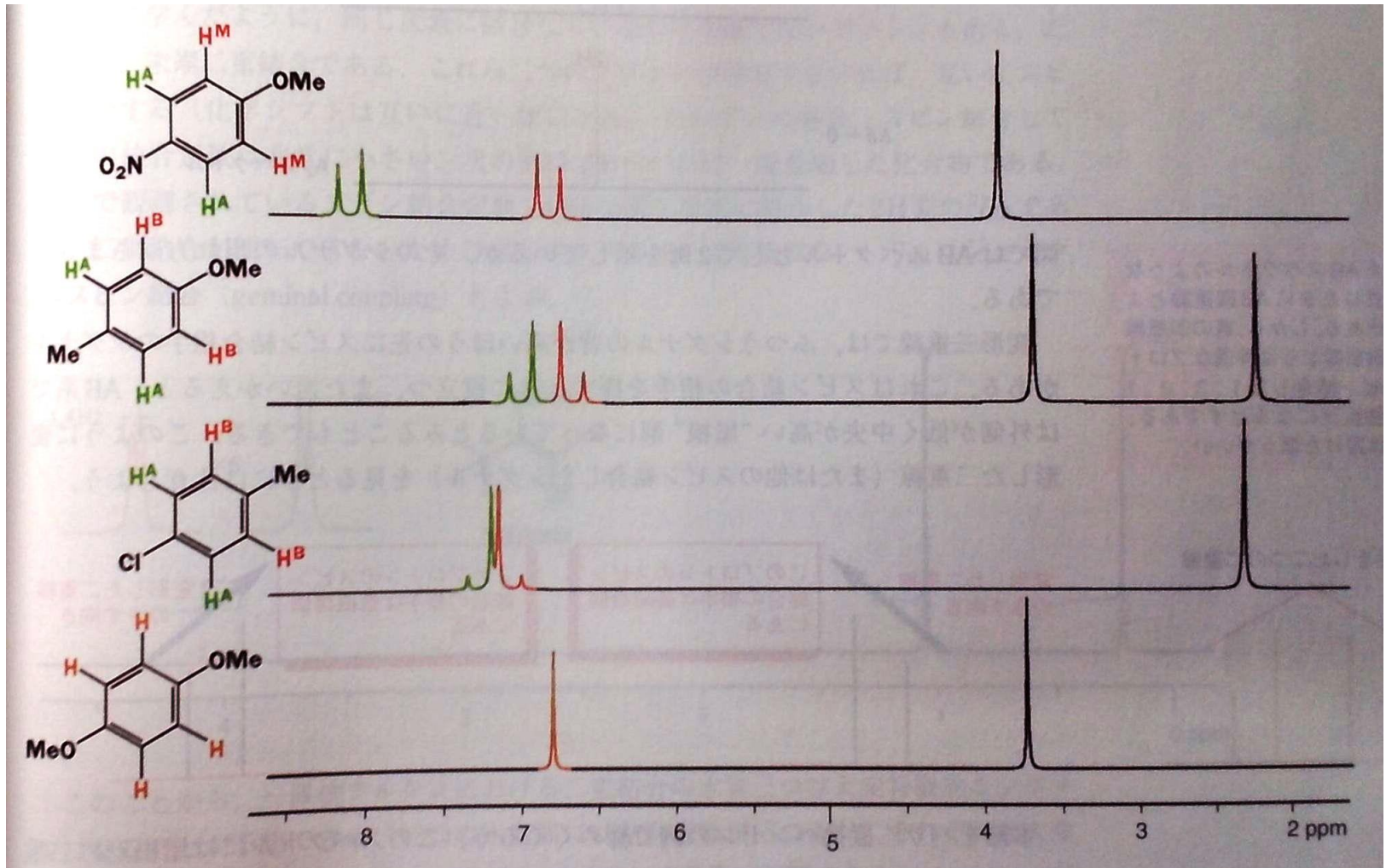
スピンスピン結合 (カップリング) (3)



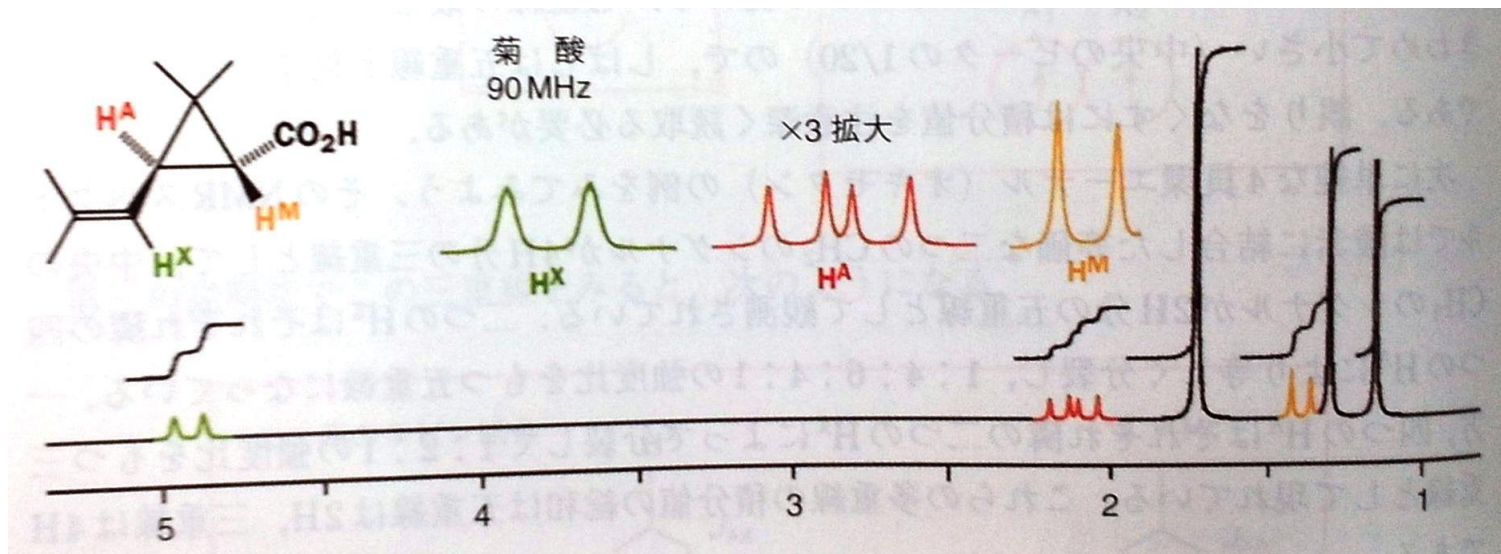
スピンスピン結合 (カップリング) (4)



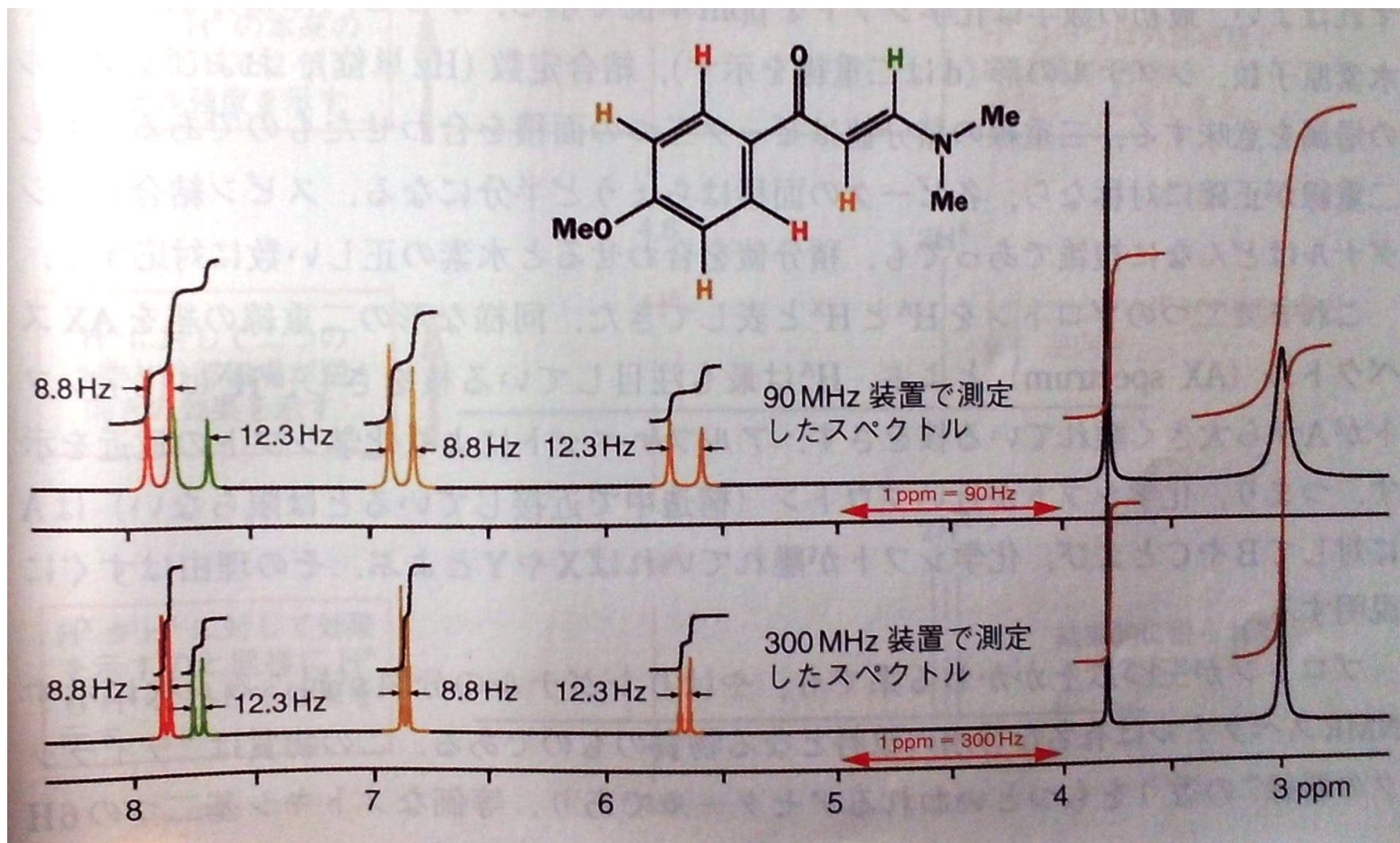
スピンスピン結合 (カップリング) (5)



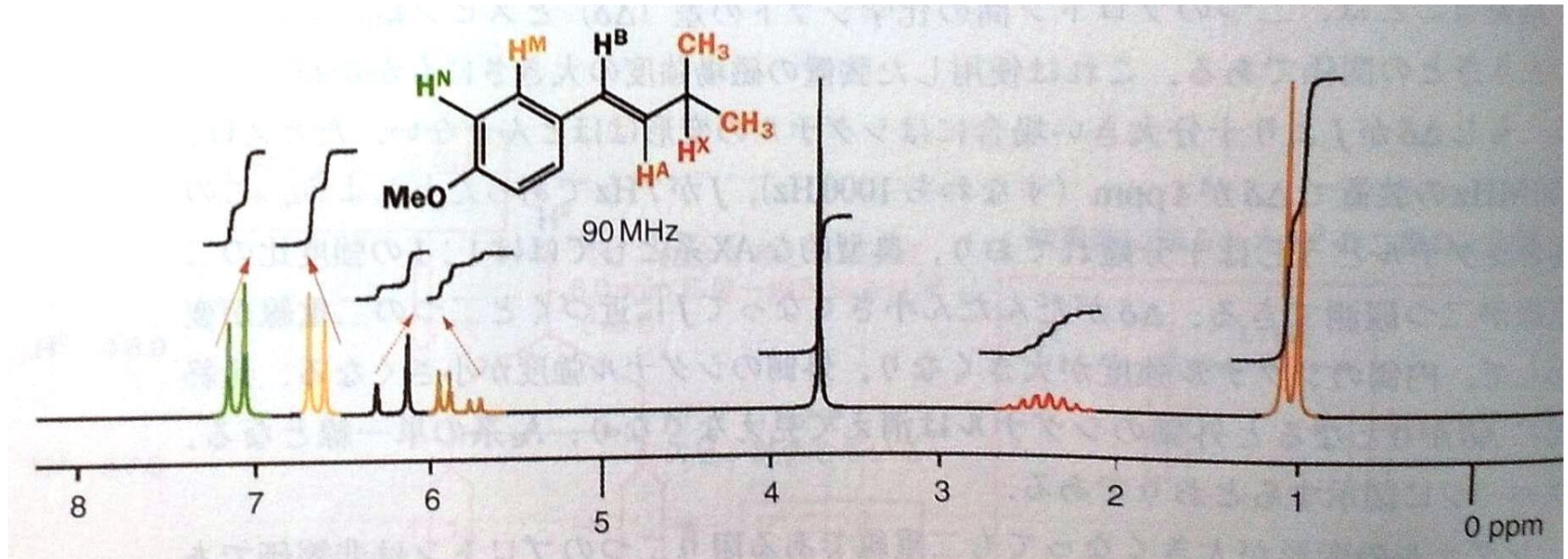
スピンスピン結合 (カップリング) (6-1)



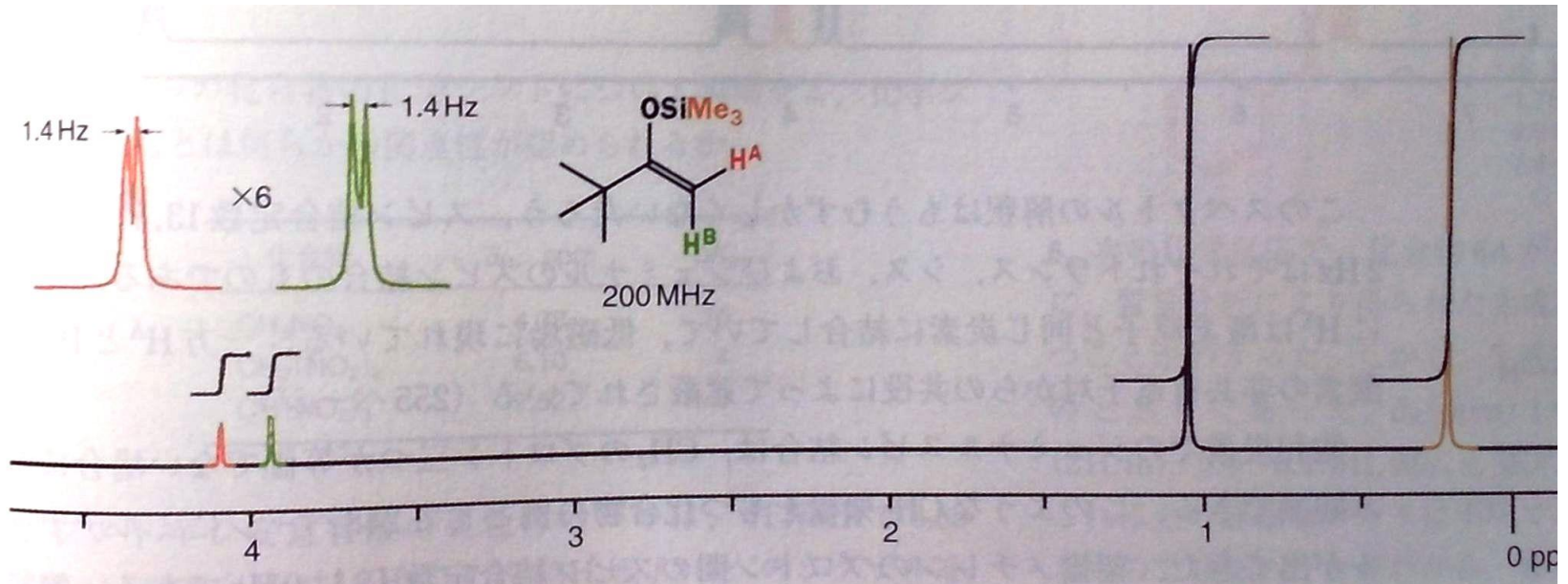
スピンスピン結合 (カップリング) (6-2)



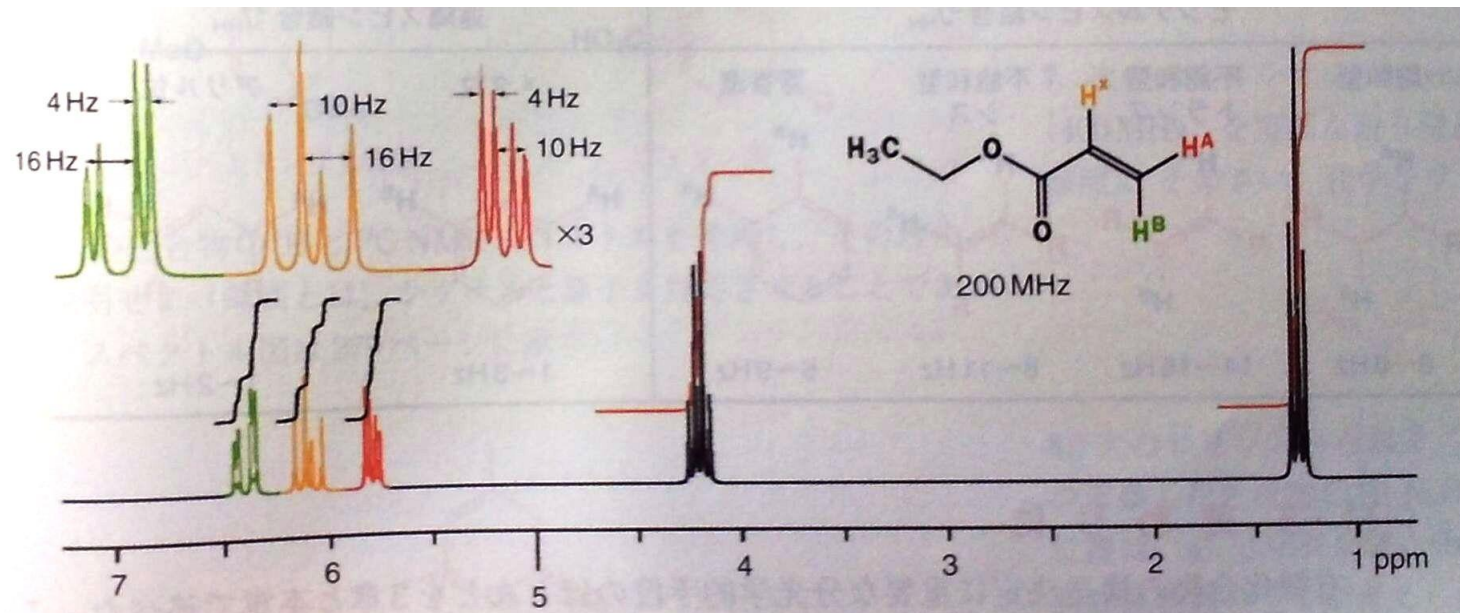
スピンスピン結合 (カップリング) (6-3)



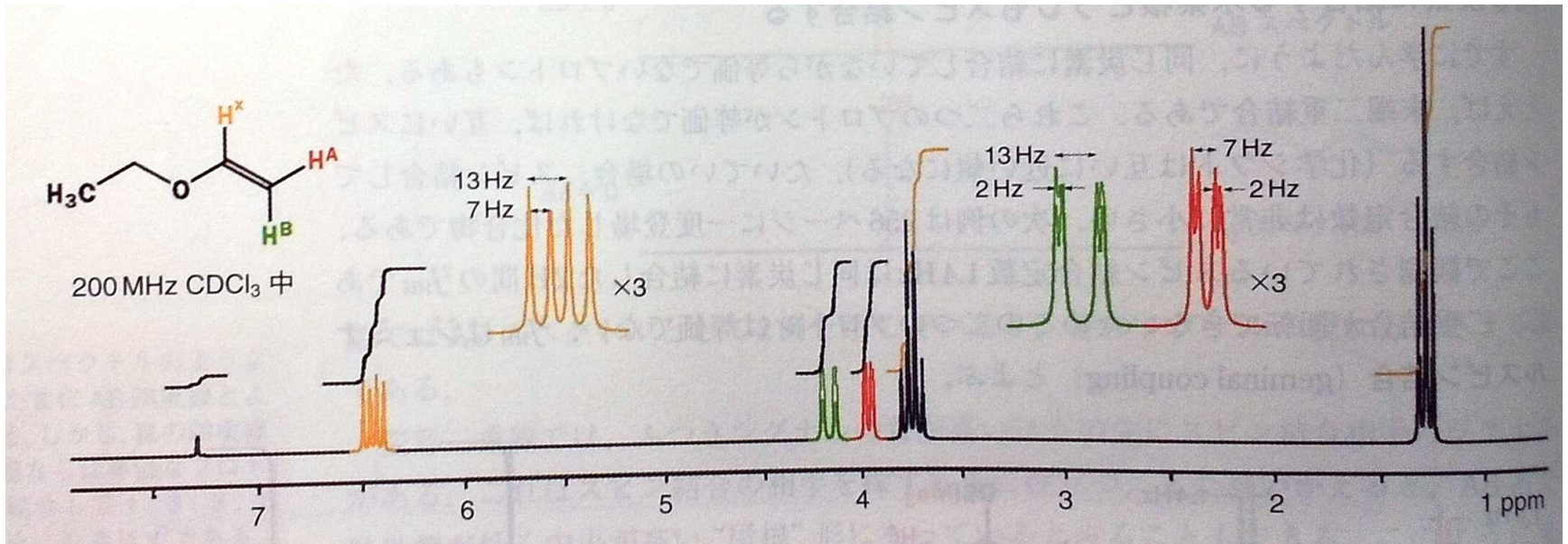
スピンスピン結合 (カップリング) (7)



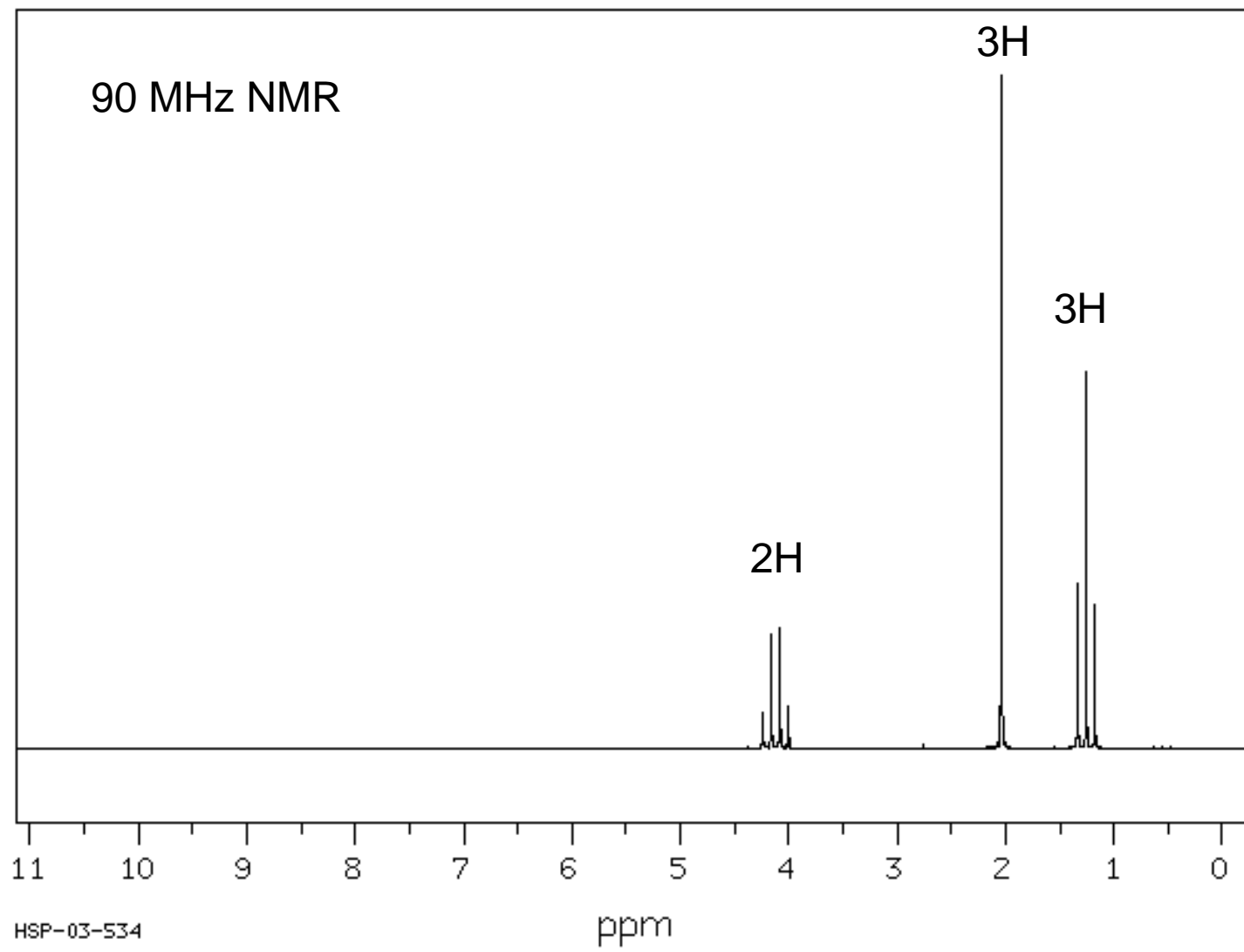
スピンスピン結合 (カップリング) (8)



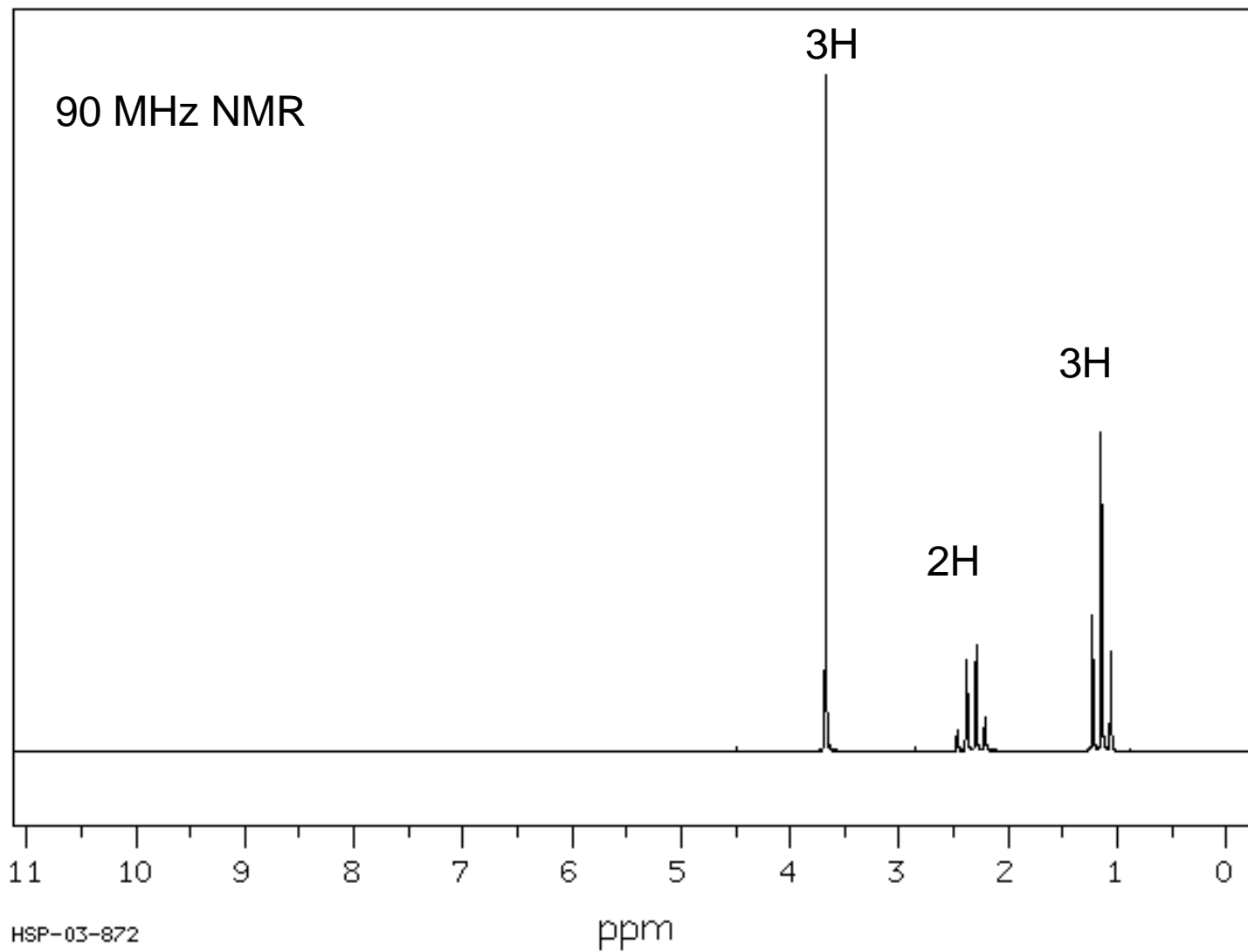
スピンスピン結合 (カップリング) (9)



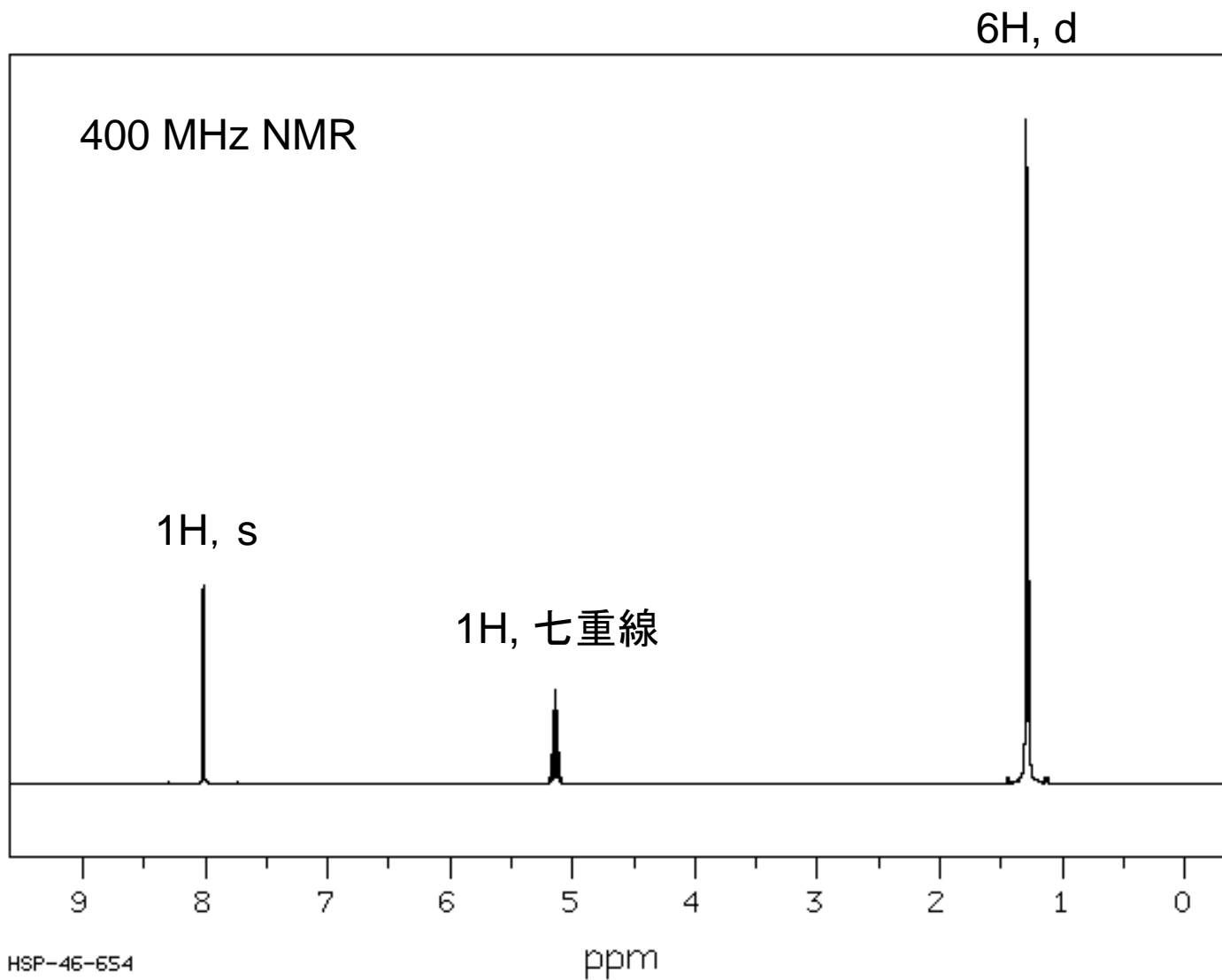
実際の化合物の例 (C₄H₈O₂ その1)



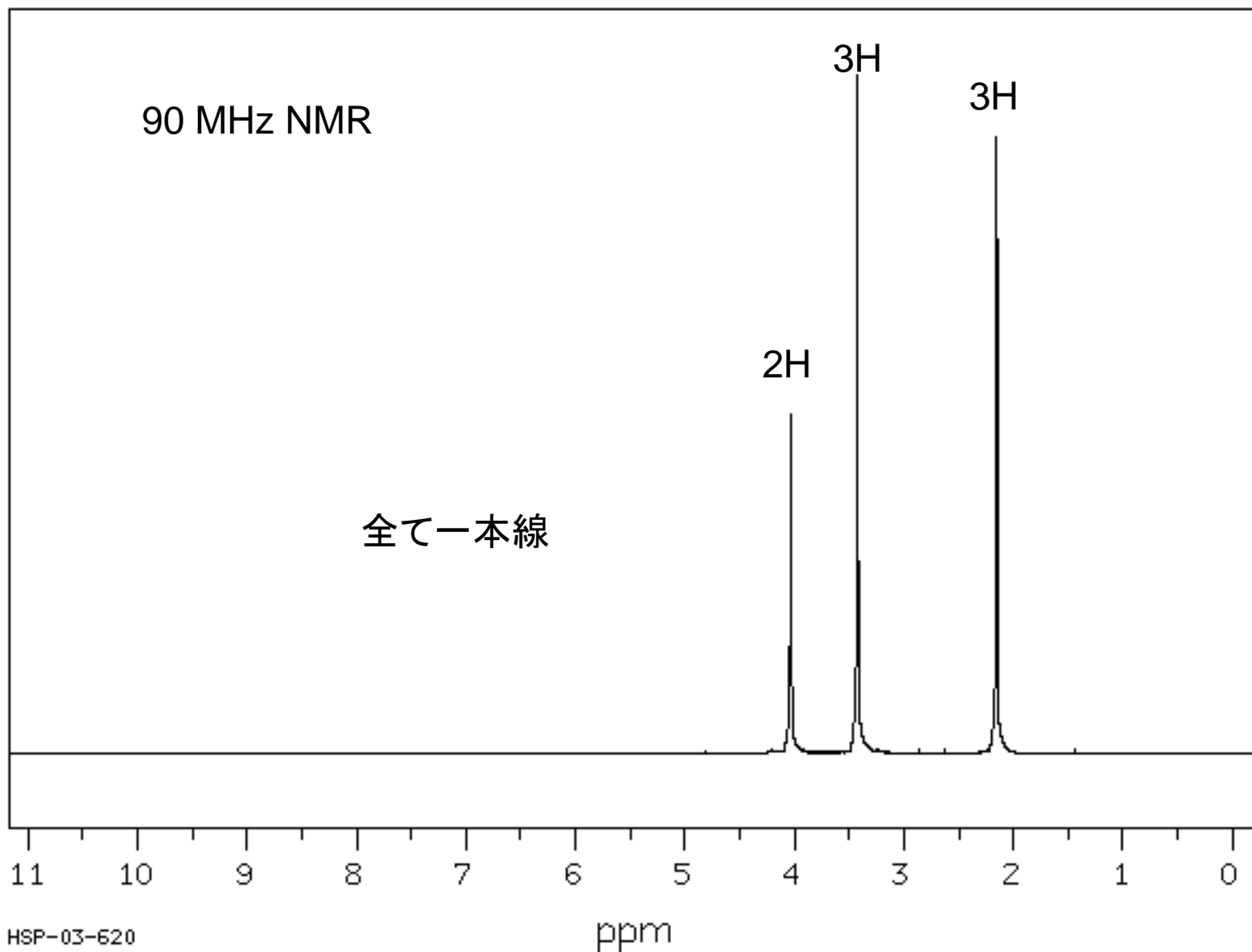
実際の化合物の例 (C₄H₈O₂ その2)



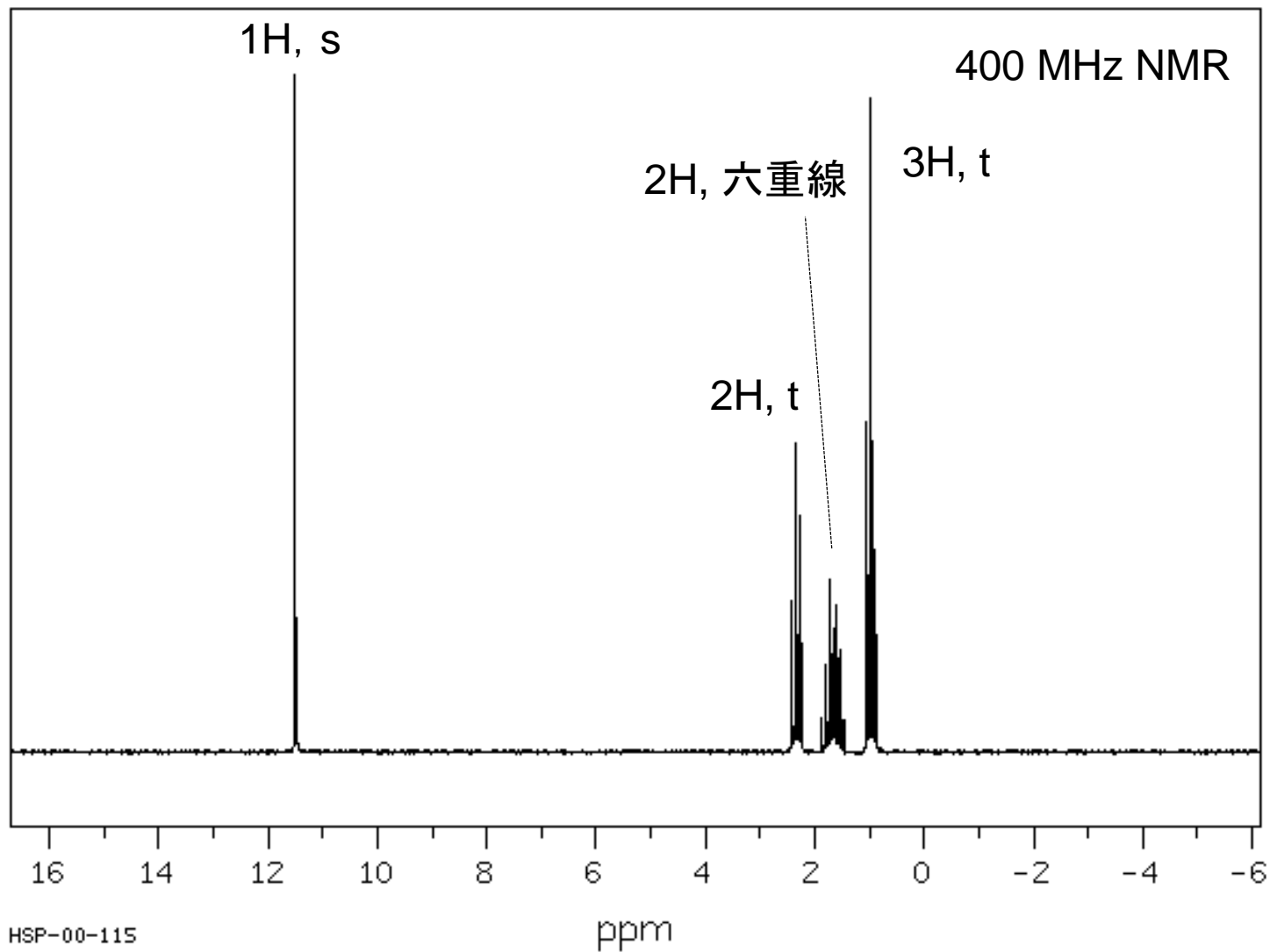
実際の化合物の例 (C₄H₈O₂ その3)



実際の化合物の例 (C₄H₈O₂ その4)



実際の化合物の例 ($C_4H_8O_2$ その5)



解答

1. 酢酸エチル ethyl acetate $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$
2. プロパン酸メチルもしくはプロピオン酸メチル
methyl propanoate or methyl propionate $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOCH}_3$
3. ギ酸イソプロピル isopropyl formate $\text{HCOOCH}(\text{CH}_3)_2$
4. メトキシアセトン methoxyacetone $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{COCH}_3$
5. ブタン酸もしくは酪酸 butanoic acid or butyric acid
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$