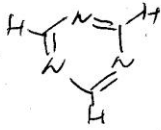
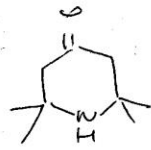


¹H NMR 解答例

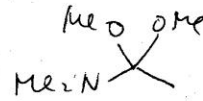
1.



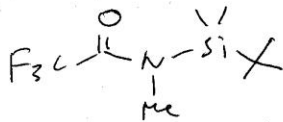
1本 8~9ppm
あたり



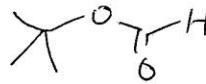
3本 1.0あたり 12H
2.5あたり 4H
3.0あたり 1H



3本 1.4あたり 3H
2.8あたり 6H N-Me
~~3.8~~ 3.5あたり 6H O-Me

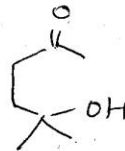
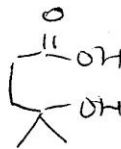


3本 0.1あたり 6H Si-Me
1.1あたり 9H C-Me
2.8あたり 3H



2本 1.3あたり 9H
9.5あたり 1H

2.



IR

1700あたり

1750

1700, 3300

3300, 1750

¹³C

170

200

170

200

C=O 5本

C=O 3本

C=O 5本

C=O 6本

¹H

1.3あたり 5.6H

2.0あたり 5.6H

1.2あたり 5.6H

1.2あたり 5.6H

1.5あたり 1.2H

5.6H

1.5あたり 1.2H

1.5あたり 1.2H

2.5あたり 1.2H

2.5あたり 5.4H

2.5あたり 1.2H

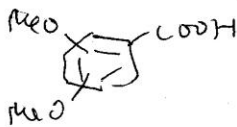
2.0あたり 5.3H

2.0あたり 1H (OH)

2.5あたり 1.2H

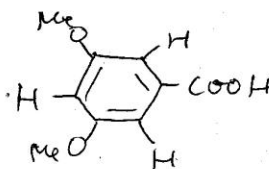
11.0あたり 1H (COOH)

3.



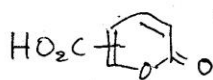
芳香環 12(1H, 6.62, t) と (2H, 7.17d)

→ 3,4-置換



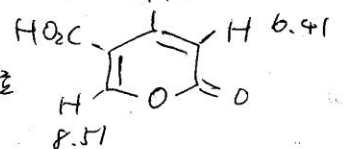
J = 2 Hz は 1,2-9 位にある

H との coupling link として reasonable



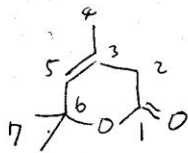
(10 H は 12 0 位にある 2.0 の H
2H は 12 m 位)

T=0.2
H 7.82



・ 化学シフトが 8.51 に 7.82 and -C=O の β 位が 8.51
7.82

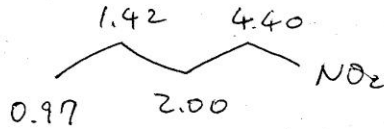
4.



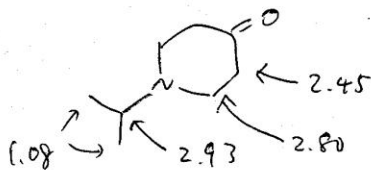
5.6, 1H $\rightarrow$ H₅
 2.9 2H $\rightarrow$ H₂
 1.8 3H $\rightarrow$ H₄
 1.45 6H $\rightarrow$ H₇

87 $\rightarrow$ C₆
 170 $\rightarrow$ C₁
 127, 129 $\rightarrow$ C₃ and C₅
 37 $\rightarrow$ C₂
 28 $\rightarrow$ C₇
 23 $\rightarrow$ C₄

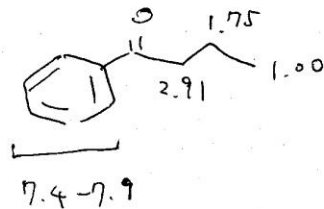
5.



硝基は隣接炭素上のプロトンとの
 結合+1 になっている



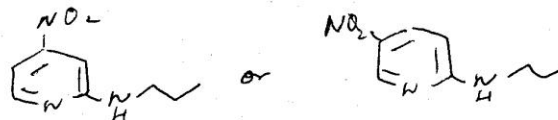
同上



同上

8. **難** 芳香族領域に 3H しかない。ニトロ化は芳香環 (ヒリジン環) 上
 で起こると考えられる。

8.8 (s, 1H), 8.3 (d, 1H), 6.7 (d, 1H)
 この分型から考え



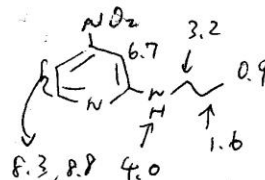
例

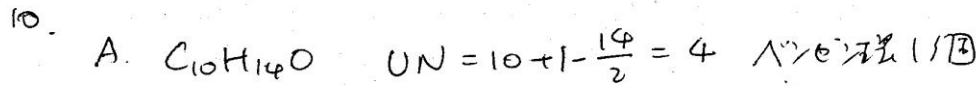
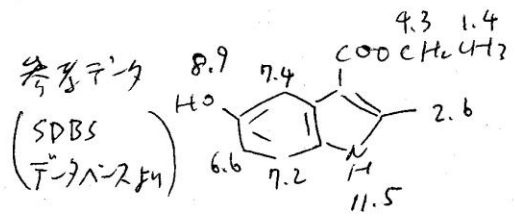
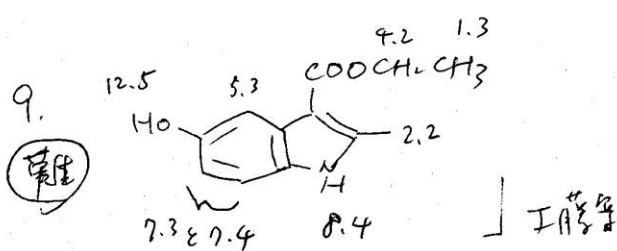
のと-5 にかたう。

6.7 ppm は 5-位にニトロ基の β 位か δ 位のはず

★ ヒリジンの J 値はベンゼン環と異なり O-位だと小く
 m, p 位だと大きい。

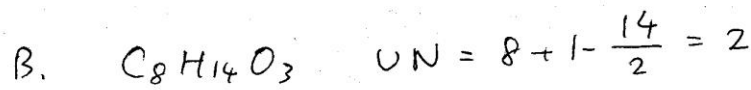
以上の特徴を総合すると





1H NMR で 1.21 (6H, d, $J=7$) と 2.83 (1H, t, $J=7$)
は典型的なイソプロピル基 $-CH(CH_3)_2$ のシグナル

^{13}C NMR のピーク数と勘案すると

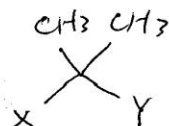


IR から $-C(=O)-$ 2種類で 6.25 & 4.1 とエステル

^{13}C の 202, 176 も上記を支持

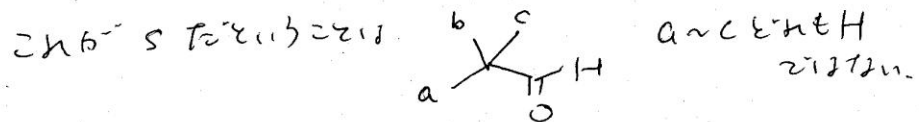
UN の 2 以上の 2 つで消費されたので、あとは = や環だけ

1.21 (6H, s) は 等価な 2 つのメチルで

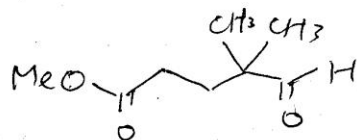


1.8 と 2.24 (2H, t, $J=7$) とあるので

$-CH_2-CH_2-$ という断片もある。10.01 (1H, s) は $-C(=O)-H$ であり、



以上の情報から 2 つのメチル基を合わせると



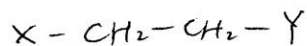
c. $C_{11}H_{15}NO_2$ $UN = 11 + 1 - \frac{15-1}{2} = 5$ ベンゼン環で4
あと1

生成物に F と T のみから、F のところを何かで置き換えている?

9.97 (1H, s) あるので、70°C 付近に保存している。→ UN のあとには
ここに
置換した。

ベンゼン環の 1H NMR が 6.97 (2H, d) と 7.82 (2H, d) があるので
p-置換でしろう。

3.05 (2H, t), 4.20 (2H, t) があるので



がある。2.32 (6H, s) も基幹して。

