

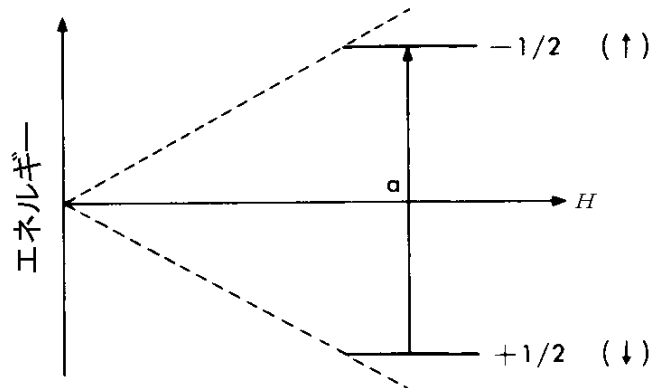
10. ^{13}C -核磁気共鳴分析法 (nuclear magnetic resonance, NMR)[1] ^{13}C -NMR

図1. エネルギー順位と遷移

[問1] ^{13}C の核磁気双極子能率 μ は,

$$\mu = 3.54759 \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$$

である。外部磁場が 2.34872 T (23487.2 gauss) のとき、 ^{13}C の基底状態と励起状態の2つの状態間のエネルギー差を求めよ。さらに、この ^{13}C が吸収する電磁波の周波数を計算せよ。

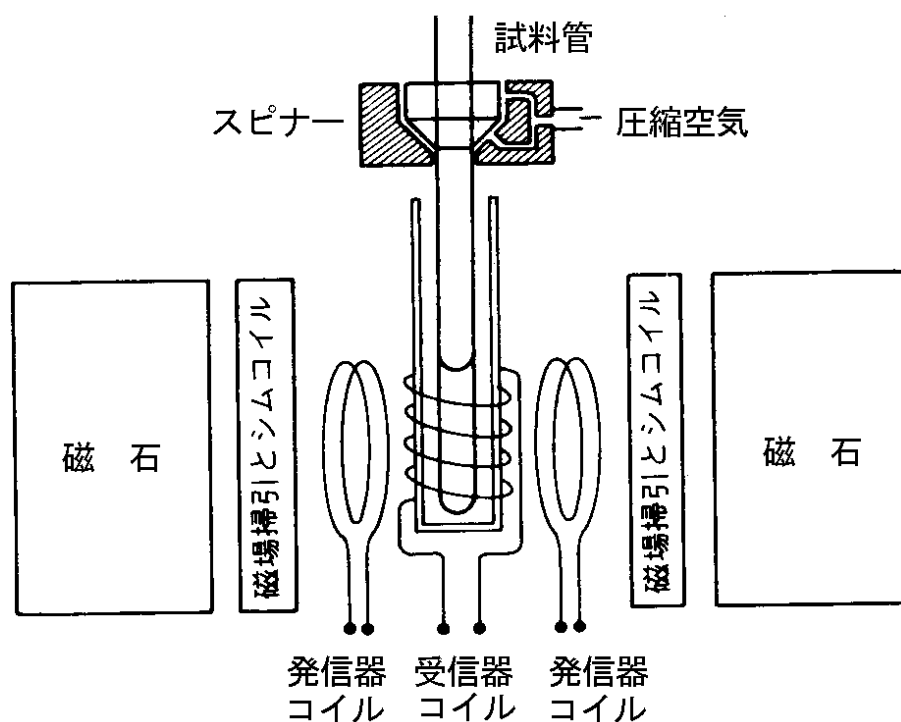


図2. NMR装置

表1. NMR用溶媒

溶 媒	比誘電率	液体の 温度範囲 °C	化学シフト	
			δ_{H}	δ_{C}
シクロヘキサン	2.01	6 ~ 81	1.43	27.5
CCl_4	2.24	-23 ~ 77	—	96.0
CS_2	2.64	-112 ~ 46	—	192.3
CDCl_3	4.8	-64 ~ 61	7.25	76.9
CD_2Cl_2	8.9	-95 ~ 40	5.33	53.6
$\text{CDCl}_2\text{CDCl}_2$	8.2	-44 ~ 146	5.94	75.5
ジオキサン	2.2	12 ~ 101	3.7	67.4
テトラヒドロフラン	7.6	-108 ~ 66	1.9, 3.8	25.8, 67.9
ベンゼン- d_6	2.28	6 ~ 80	7.27	128.4
ピリジン- d_5	12.40	-42 ~ 115	7.0, 7.6, 8.6	124, 136, 150
アセトン- d_6	20.7	-95 ~ 56	2.17	29.2, 204.1
アセトニトリル- d_3	37.5	-44 ~ 82	2.00	1.3, 117.7
ニトロメタン- d_3	35.87	-29 ~ 101	4.33	57.3
$\text{DMSO-}d_6$	46.7	19 ~ 189	2.62	39.6
HMPA	30.0	7 ~ 233	2.60	36.8
DMF	36.7	-60 ~ 153	2.9, 3.0, 8.0	31, 36, 162.4
メタノール- d_4	32.7	-98 ~ 65	3.4, 4.8 ^b	49.3
D_2O	78.5	0 ~ 100	4.7 ^b	—
TFA	8.6	-15 ~ 72	11.3 ^b	114.5, 161.5 ^c
1,2,4-トリクロロ ベンゼン	3.9	17 ~ 214	7.1, 7.3, 7.4	133.3, 132.8, 130.7, 130.0, 127.6
塩化ビニル	—	-154 ~ -13	5.4, 5.5, 6.3	126, 117
CF_2BrCl	—	-140 ~ -25	—	109.2 ^d
ニトロベンゼン	34.8	6 ~ 211	8.2, 7.6, 7.5	149, 134, 129, 124
CFC_3	2.3	-111 ~ 24	—	117.6 ^e

[2] 化学シフト (chemical shift)

核外電子 (s, p, σ, π), 反磁性シフト (diamagnetic shift),

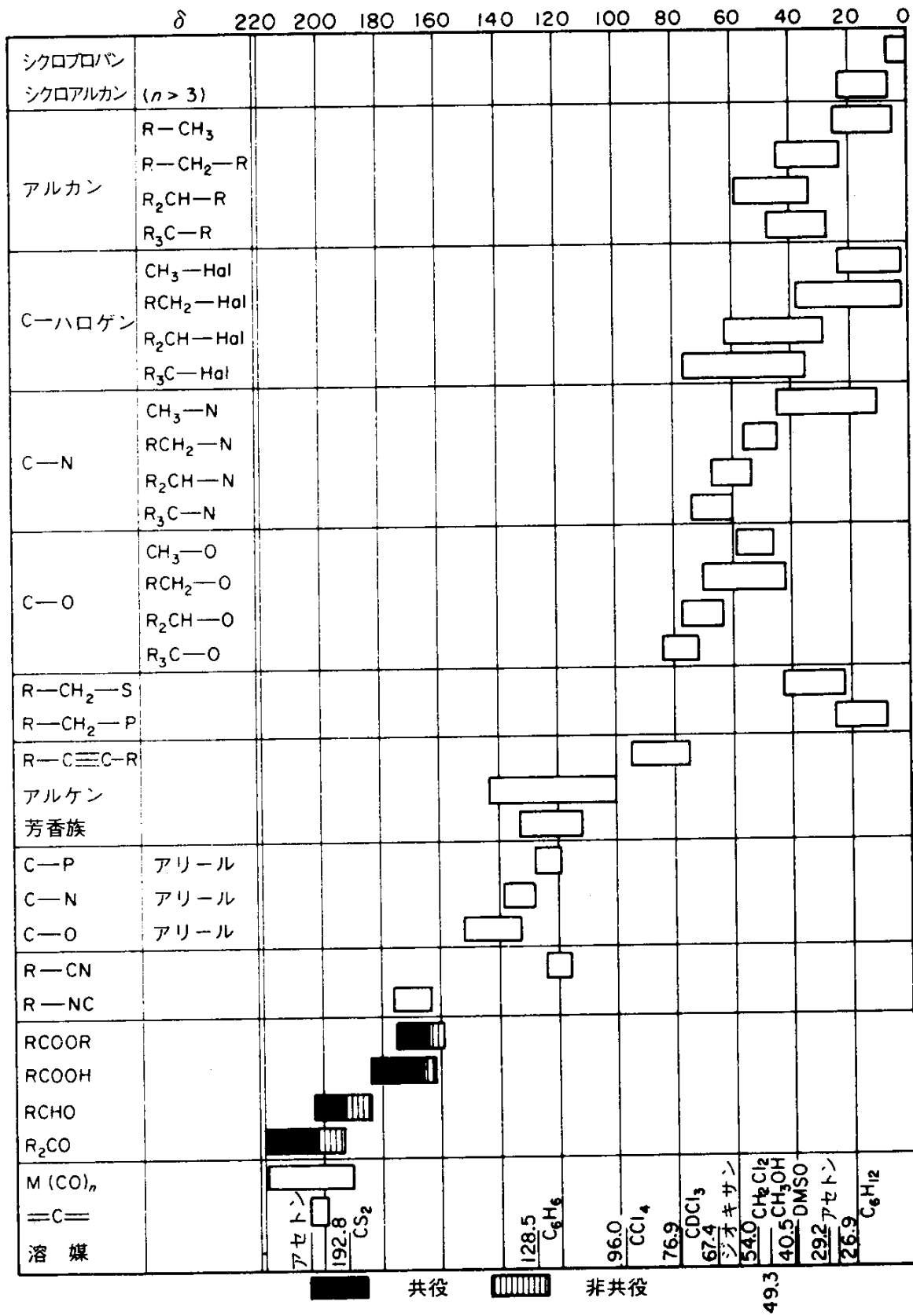


図3. ¹³C化学シフト

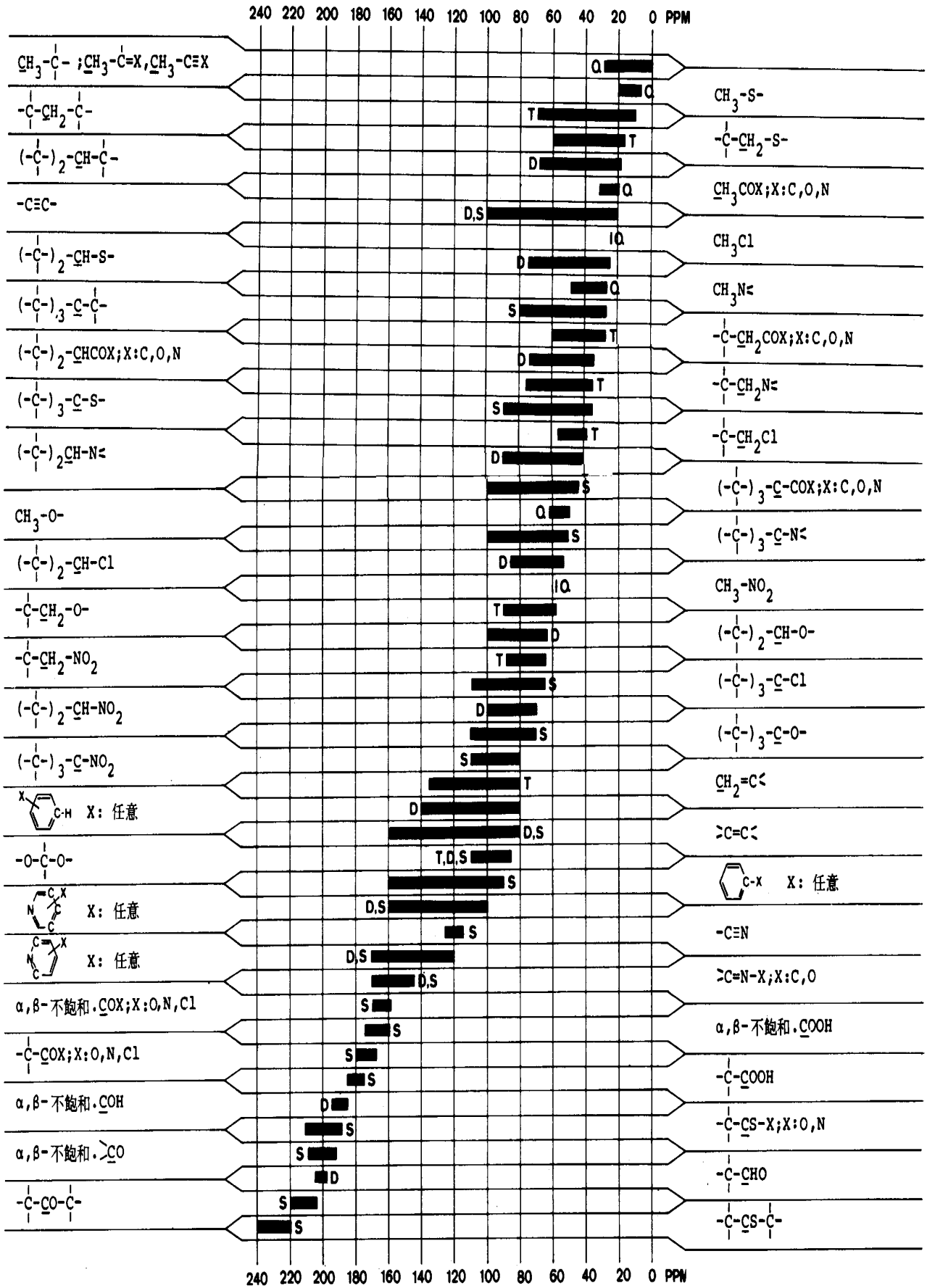


図4. ¹³C化学シフト

[3] アルカンの ^{13}C -化学シフトの算出

$$\delta = -2.3 + \sum_i (Z_i) + S \quad (\text{Grant-Paulの規則})$$

表1. Z_i の値


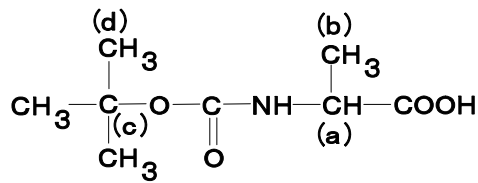
置換基	Z_i は置換基の位置			
	α	β	γ	δ
-H	0.0	0.0	0.0	0.0
-C \equiv (*)	9.1	9.4	-2.5	0.3
 (*)	21.4	2.8	-2.5	0.3
C -C=C- (*)	19.5	6.9	-2.1	0.4
-C \equiv C-	4.4	5.6	-3.4	-0.6
-フェニル	22.1	9.3	-2.6	0.3
HAL -F	70.1	7.8	-6.8	0.0
-Cl	31.0	10.0	-5.1	-0.5
-Br	18.9	11.0	-3.8	-0.7
-I	-7.2	10.9	-1.5	-0.9
O -O- (*)	49.0	10.1	-6.2	0.0
-O-CO-	56.5	6.5	-6.0	0.0
-O-NO	54.3	6.1	-6.5	-0.5
N -N< (*)	28.3	11.3	-5.1	0.0
-N \equiv (*)	30.7	5.4	-7.2	-1.4
-NH $_3^+$	26.0	7.5	-4.6	0.0
-NO $_2$	61.6	3.1	-4.6	-1.0
-NC	31.5	7.6	-3.0	0.0
S -S- (*)	10.6	11.4	-3.6	-0.4
-S-CO-	17.0	6.5	-3.1	0.0
-SO- (*)	31.1	9.0	-3.5	0.0
-SO $_2$ Cl	54.5	3.4	-3.0	0.0
-SCN	23.0	9.7	-3.0	0.0
-CHO	29.9	-0.6	-2.7	0.0
-CO-	22.5	3.0	-3.0	0.0
O=C=H -COOH	20.1	2.0	-2.8	0.0
-COO $^-$	24.5	3.5	-2.5	0.0
-COO-	22.6	2.0	-2.8	0.0
H -CON<	22.0	2.6	-3.2	-0.4
-COCl	33.1	2.3	-3.6	0.0
-CS-N<	33.1	7.7	-2.5	0.6
-C=NOH シン	11.7	0.6	-1.8	0.0
-C=NOH アンチ	16.1	4.3	-1.5	0.0
-CN	3.1	2.4	-3.3	-0.5
-Sn<	-5.2	4.0	-0.3	0.0

表2. Sの値

立体的な広がりに関する考慮	α -置換基に結合しているプロトン以外の原子の数。 (その α -置換基が(*)であれば、「原子の数+1」として、 複数の α -置換基があるときには、最も多い数をとる。)			
	1	2	3	4
一級 (p)	0.0	0.0	-1.1	-3.4
二級 (s)	0.0	0.0	-2.5	-7.5
三級 (t)	0.0	-3.7	-9.5	-15.0
四級 (q)	-1.5	-8.4	-15.0	-25.0

[問2] N-t-ブトキシカルボニルアラニンの ^{13}C -化学シフトを算出せよ。



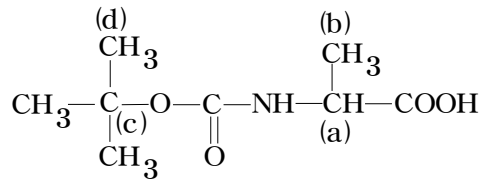
(実測値 a : 49.0 ppm, b : 17.3 ppm, c : 78.1 ppm, d : 28.1 ppm)

[計算例] dの化学シフト

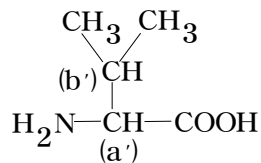
定数	-2.3	
α (-C)	9.1	表1
β (-C)	9.4	
β (-C)	9.4	
β (-O-CO-)	6.5	
δ (-N)	0.0	
S (p, 3+1)	-3.4	表2
計	28.7 ppm	

[問3] 似た構造の化合物の化学シフトの値を基に、表1と表2の値を使って算出すると、より正確な化学シフト値が求められる。化学シフトを計算する化合物と、それに似た構造の化合物の構造を比較して、足りない置換基は加算し、余分な(過剰な)置換基の分は減算すればよい。

N-t-ブトキシカルボニルアラニンの(b)で示す ^{13}C -化学シフトを、L-バリンの ^{13}C -化学シフトの値から算出すると17.5 ppm(下記の計算例)となり、実測値である17.3 ppmに近い値が得られる。



N-t-ブトキシカルボニルアラニン



L-バリン

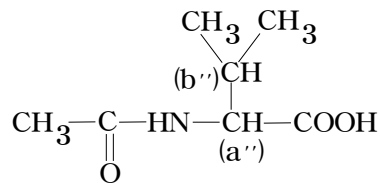
a' : $\delta = 61.5 \text{ ppm}$ b' : $\delta = 30.1 \text{ ppm}$

[計算例] bの化学シフト

定数	30.1	
γ (-COO-)	-2.8	加算
S (p, 2+1)	-1.1	
α (-C)	9.1	減算
α (-C)	9.1	
S (t, 2+1)	-9.5	
計	17.5 ppm	

(a) N-t-ブトキシカルボニルアラニンの(a)で示す ^{13}C -化学シフトを、バリンの ^{13}C -化学シフトの値から算出せよ。

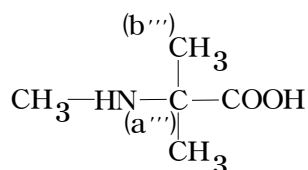
(b) N-t-ブトキシカルボニルアラニンの(a)と(b)で示す ^{13}C -化学シフトを、N-アセチル-D-バリンの ^{13}C -化学シフトの値から算出せよ。



N-アセチル-D-バリン

a'' : $\delta = 57.1 \text{ ppm}$ b'' : $\delta = 29.7 \text{ ppm}$

(c) N-t-ブトキシカルボニルアラニンの(a)と(b)で示す ^{13}C -化学シフトを、2-メチル-2-(メチルアミノ)プロピオン酸の ^{13}C -化学シフトの値から算出せよ。



2-メチル-2-(メチルアミノ)プロピオン酸

a''' : $\delta = 64.0 \text{ ppm}$ b''' : $\delta = 22.1 \text{ ppm}$

表3. メチル基の ^{13}C -化学シフト

置換基 X	$\delta\text{CH}_3\text{-X}$	置換基 X	$\delta\text{CH}_3\text{-X}$
-H	-2.3	H -F	75.2
-CH ₃	8.4	A -Cl	24.9
-CH ₂ CH ₃	15.4	L -Br	10.0
-CH(CH ₃) ₂	24.1	-I	-20.7
-C(CH ₃) ₃	31.3	-OH	50.2
-(CH ₂) ₆ CH ₃	14.1	-OCH ₃	60.9
-CH ₂ -フェニル	15.7	-OCH ₂ CH ₃	58.8
-CH ₂ F	14.4	-OCH(CH ₃) ₂	56.1
-CH ₂ Cl	17.7	O -O-シクロヘキシル	55.1
-CH ₂ Br	20.2	-O-フェニル	54.0
-CH ₂ I	23.0	-OCOC ₈ H ₁₇	51.4
-CH ₂ OH	18.8	-OCO-シクロヘキシル	51.0
-CH ₂ OCOC ₈ H ₁₇	14.3	-OCOCH=CH ₂	50.9
-CH ₂ OCH ₃	15.9	-NH ₂	26.9
-CH ₂ CHO	5.2	-NHCH ₃	
-CH ₂ COCH ₃	7.3	-N(CH ₃) ₂	47.5
-CH ₂ COOH	9.0	-NH-シクロヘキシル	33.5
-シクロペンチル	20.5	N -NH-フェニル	30.2
-シクロヘキシル	23.1	-N(CH ₃)-フェニル	39.9
-フェニル	21.4	-N(CH ₃)-CHO	36.2; 31.1
- α -ナフチル	19.1	-NO ₂	57.1
- β -ナフチル	21.5	-NC	26.8
-2-ピリジル	24.2	-SCH ₃	19.3
-3-ピリジル	18.0	S -SC ₈ H ₁₇	15.5
-4-ピリジル	20.6	-S-フェニル	15.6
-2-フリル	13.7	-SOCH ₃	43.3
-2-チエニル	14.7	-CHO	31.2
-1-ピロリル	35.9	-COCH ₃	28.1
-2-ピロリル	11.8	-CO-シクロヘキシル	27.6
-1-イミダゾイル	32.2	-COCH=CH ₂	
-1-ピラゾイル	38.4	-CO-フェニル	24.9
-1-インドリル	32.1	-COOH	21.1
-2-インドリル	13.4	-COOCH ₃	20.0
-3-インドリル	9.8	-COSC ₄ H ₉	30.1
-4-インドリル	21.6	-CON(C ₄ H ₉) ₂	21.4
-5-インドリル	21.5	-CN	1.3
-6-インドリル	21.7		
-7-インドリル	16.6		

[4] アルケンの ^{13}C -化学シフトの算出

$$Z_1 - ^{13}\text{C} \text{H} = \text{CH} - Z_2$$

表4. アルケン置換基の Z_j の値

$$\delta = 123.3 + \sum_i (Z_i)$$

置換基 X	Z_1	Z_2
-H	0.0	0.0
-CH ₃	10.6	-7.9
-CH ₂ CH ₃	15.5	-9.7
-CH ₂ CH ₂ CH ₃	14.0	-8.2
-CH(CH ₃) ₂	20.4	-11.5
-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	14.6	-8.9
-C(CH ₃) ₃	25.3	-13.3
C -CH ₂ Cl	10.2	-6.0
-CH ₂ Br	10.9	-4.5
-CH ₂ I	14.2	-4.0
-CH ₂ OH	14.2	-8.4
-CH ₂ OCH ₂ CH ₃	12.3	-8.8
-CH=CH ₂	13.6	-7.0
-フェニル	12.5	-11.0
H -F	24.9	-34.3
-Cl	2.6	-6.1
-Br	-7.9	-1.4
-I	-38.1	7.0
A -OCH ₃	29.4	-38.9
-OCH ₂ CH ₃	28.5	-39.8
-OCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	28.1	-40.4
-OCOCH ₃	18.4	-26.7
O -N ⁺ (CH ₃) ₃	19.8	-10.6
-N-ピロリドニル	6.5	-29.2
N -NO ₂	22.3	-0.9
-NC	-3.9	-2.7
S -SCH ₂ -フェニル	18.5	-16.4
-SO ₂ CH=CH ₂	14.3	7.9
O=C -CHO	13.1	12.7
-COCH ₃	15.0	5.8
-COOH	4.2	8.9
-COOCH ₂ CH ₃	6.3	7.0
ハ -COCl	8.1	14.0
-CN	-15.1	14.2
-Si(CH ₃) ₃	16.9	6.7
-SiCl ₃	8.7	16.1

[問4] 1-ブロモ-1-プロペン $\text{BrCH}=\text{CHCH}_3$ の ^{13}C -化学シフトを算出せよ。

(実測値 C①: 108.9 ppm (cis), 104.7 (trans) C②: 129.4 (cis), 132.7 (trans))

[計算例] C①の化学シフト

定数 123.3

Z_1 (Br) -7.9



Z_2 (CH₃) -7.9

計 107.5 ppm

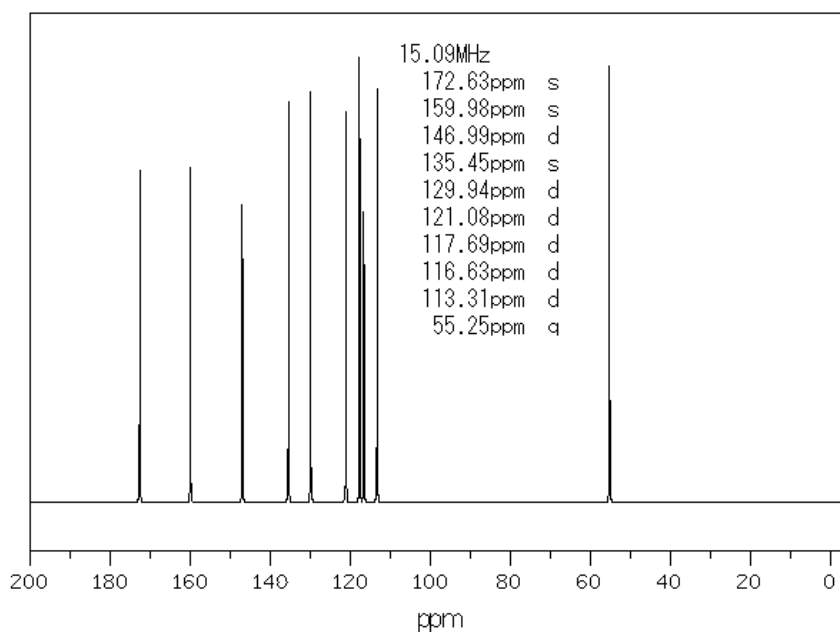
[5] 一置換ベンゼンの ^{13}C -化学シフトの算出表5. ベンゼン置換基の Z_i の値

$$\delta_{\text{C}_i} = 128.5 + Z_i$$

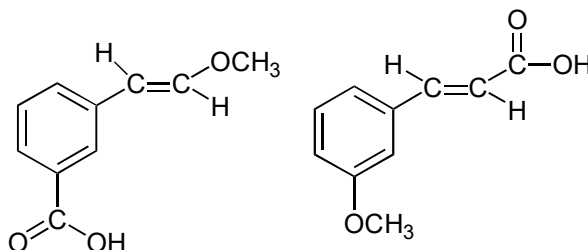
(置換炭素: $i = 1$)

置換基 X	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4
-H	0.0	0.0	0.0	0.0
-CH ₃	9.3	0.6	0.0	-3.1
-CH ₂ CH ₃	15.7	-0.6	-0.1	-2.8
-CH(CH ₃) ₂	20.1	-2.0	0.0	-2.5
-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	14.2	-0.2	-0.2	-2.8
-C(CH ₃) ₃	22.1	-3.4	-0.4	-3.1
	15.1	-3.3	-0.6	-3.6
-CH ₂ Cl	9.1	0.0	0.2	-0.2
-CH ₂ Br	9.2	0.1	0.4	-0.3
-CF ₃	2.6	-3.1	0.4	3.4
-CH ₂ OH	13.0	-1.4	0.0	-1.2
	9.2	-3.1	-0.1	-0.5
-CH ₂ NH ₂	14.9	-1.6	-0.2	-2.0
-CH ₂ CN	1.6	-0.7	0.5	-0.7
-CH=CH ₂	7.6	-1.8	-1.8	-3.5
-C≡CH	-6.1	3.8	0.4	-0.2
-フェニル	13.0	-1.1	0.5	-1.0
-F	35.1	-14.3	0.9	-4.4
-Cl	6.4	0.2	1.0	-2.0
-Br	-5.4	3.3	2.2	-1.0
-I	-32.3	9.9	2.6	-0.4
-OH	26.9	-12.7	1.4	-7.3
-O ⁻	39.6	-8.2	1.9	-13.6
-OCH ₃	30.2	-14.7	0.9	-8.1
-O-フェニル	29.1	-9.5	0.3	-5.3
-OCOCH ₃	23.0	-6.4	1.3	-2.3
-NH ₂	19.2	-12.4	1.3	-9.5
-NHCH ₃	21.7	-16.2	0.7	-11.8
-N(CH ₃) ₂	22.4	-15.7	0.8	-11.8
-N(CH ₂ CH ₃) ₂	19.3	-16.5	0.6	-13.0
-N(フェニル) ₂	19.3	-4.4	0.6	-5.9
-NHCOCH ₃	11.1	-9.9	0.2	-5.6
-NHNH ₂	22.8	-16.5	0.5	-9.6
-N=N-フェニル	24.0	-5.8	0.3	2.2
-N ⁺ ≡N	-12.7	6.0	5.7	16.0
-NC	-1.8	-2.2	1.4	0.9
-NCO	5.7	-3.6	1.2	-2.8
-NO	37.4	-7.7	0.8	7.0
-NO ₂	19.6	-5.3	0.8	6.0
-SH	2.2	0.7	0.4	-3.1
-SCH ₃	9.9	-2.0	0.1	-3.7
-SC(CH ₃) ₃	4.5	9.0	-0.3	0.0
-SO ₂ Cl	15.6	-1.7	1.2	6.8
-SO ₃ H	15.0	-2.2	1.3	3.8
-CHO	9.0	1.2	1.2	6.0
-COCH ₃	9.3	0.2	0.2	4.2
-COOH	2.4	1.6	-0.1	4.8
-COO ⁻	7.6	0.8	0.0	2.8
-COOCH ₃	2.1	1.2	0.0	4.4
-CONH ₂	5.4	-0.3	-0.9	5.0
-COCl	4.6	2.9	0.6	7.0
-CN	-16.0	3.5	0.7	4.3
-P(フェニル) ₂ ¹⁾	8.7	5.1	-0.1	0.0
-Si(CH ₃) ₃	13.4	4.4	-1.1	-1.1

[問5] 下に, 化合物 $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{O}_3$ の ^{13}C -NMRスペクトルを示す。



この化合物の構造として, 以下の2つの場合が考えられる。



この2つの構造のいずれかであるかを, 表5 (ベンゼン置換基の Z_i の値) の Z_1 の値を使用し, 置換基が直接結合している炭素について, その炭素に結合した置換基のみが化学シフトに影響すると仮定して, その炭素の化学シフトを求めよ。その求めた値で, いずれの構造かを判別せよ。

[ヒント] 左の化合物の置換基が結合している炭素の化学シフトを計算すると, 136.1 ppmと130.9 ppmとなる。右の化合物では, 136.1 ppmと158.7 ppmである。

[6] スピンスピン結合

 $^{13}\text{C}-^1\text{H}$, $^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ 表6. $^{13}\text{C}-^1\text{H}$ スピンスピン結合定数 (J_{CH})


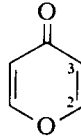

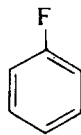
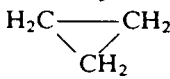
化合物	スピンスピン結合/Hz			化合物	スピンスピン結合/Hz
C_2H_6	125			CH_4	125
シクロヘキサン	123			$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	118
C_2H_4	156			$\text{CH}_3\cdot\text{CO}\cdot\text{CH}_3$	127
シクロプロパン	162			$\text{CH}_3\cdot\text{CO}_2\text{H}$	130
ベンゼン	159			$\text{CH}_3\cdot\text{C}:\text{CH}$	132
アセチレン	248			CH_3NH_2	133
CH_3CHO	173			$\text{CH}_3\cdot\text{CN}$	136
CCl_3CHO	207			$\text{CH}_3\cdot\text{OH}$	141
$\text{H}\cdot\text{CO}_2\text{H}$	222			$\text{CH}_3\cdot\text{NH}_3^+$	145
$\text{Me}_2\text{N}\cdot\text{CHO}$	191			$\text{CH}_3\cdot\text{NO}_2$	147
$\text{Me}_2\text{CH}^+\text{SbF}_5\text{Cl}$	168			CH_3F	149
$\text{CH}_2:\text{CHX}$				CH_3Cl	150
X	α	<i>cis</i>	<i>trans</i>	CH_3Br	152
F	200	159	162	CH_3I	151
Cl	195	163	161	$\text{CH}_2(\text{OEt})_2$	161
CHO	162	157	162	CH_2Cl_2	178
CN	177	163	165	CHCl_3	209
	C_2 170	C_3 163	C_4 152		C_2 200 C_3 169
	C_2	C_3			C_2 155 C_3 163 C_4 161
X = O	201	175			
NH	184	170			
S	185	167			
CH_2	170	170			

表7. $^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ スピンスピン結合定数 (J_{CC})

化合物	スピンスピン結合/Hz	化合物	スピンスピン結合/Hz
$\geq\text{C}-\text{C}\equiv$	35-40	C_2H_6	34.6
$>\text{C}=\text{C}<$	65-75	エタノール	37.3
$-\text{C}\equiv\text{C}-$	170-175	アセトン	40.1
$\text{Ph}\cdot\text{C}:\text{C}-\text{CH}_3$	67	$\text{CH}_3\cdot\text{CO}_2\text{H}$	56.7
$\text{Ph}-\text{CH}_3$	44.2	$\text{CH}_3\cdot\text{CN}$	56.5
	ca. 10	ベンゼン	57.0
		エチレン	67.6
		$\text{CH}_2=\text{CH}\cdot\text{CO}_2\text{H}$	70.4
		$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CN}$	80.3
		アセチレン	171.5

[7] ^{13}C -NMRスペクトル

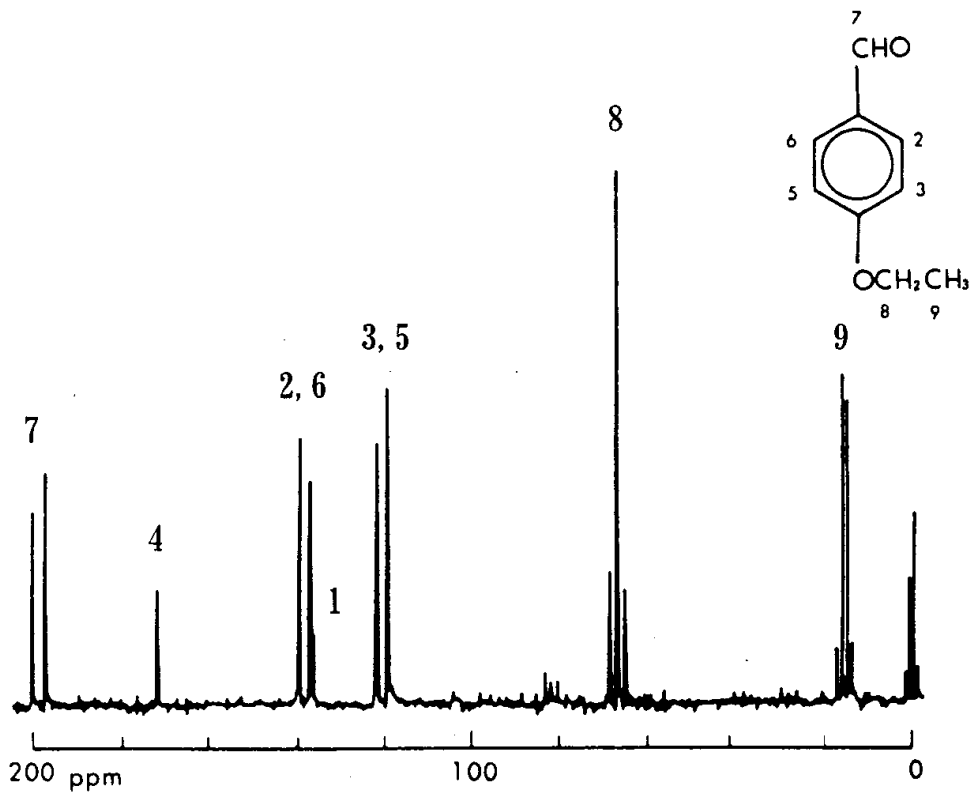


図5. p-エトキシベンズアルデヒドの ^{13}C -NMRスペクトル (25.2 MHz)

[8] スピンデカップリング (spin decoupling)

プロトンデカップリング

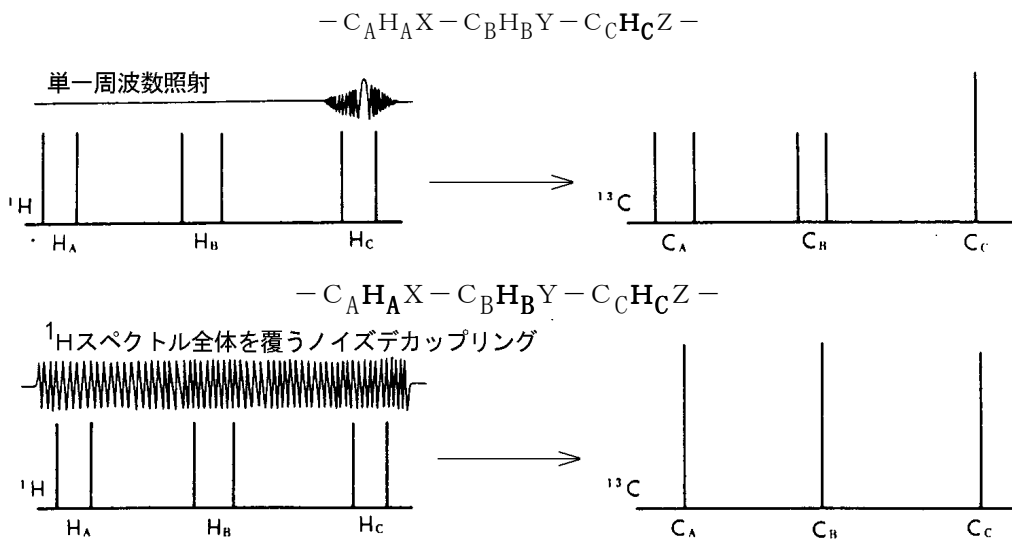


図6. プロトンデカップリング
 (上) 単一周波数デカップリング
 (下) ノイズデカップリング

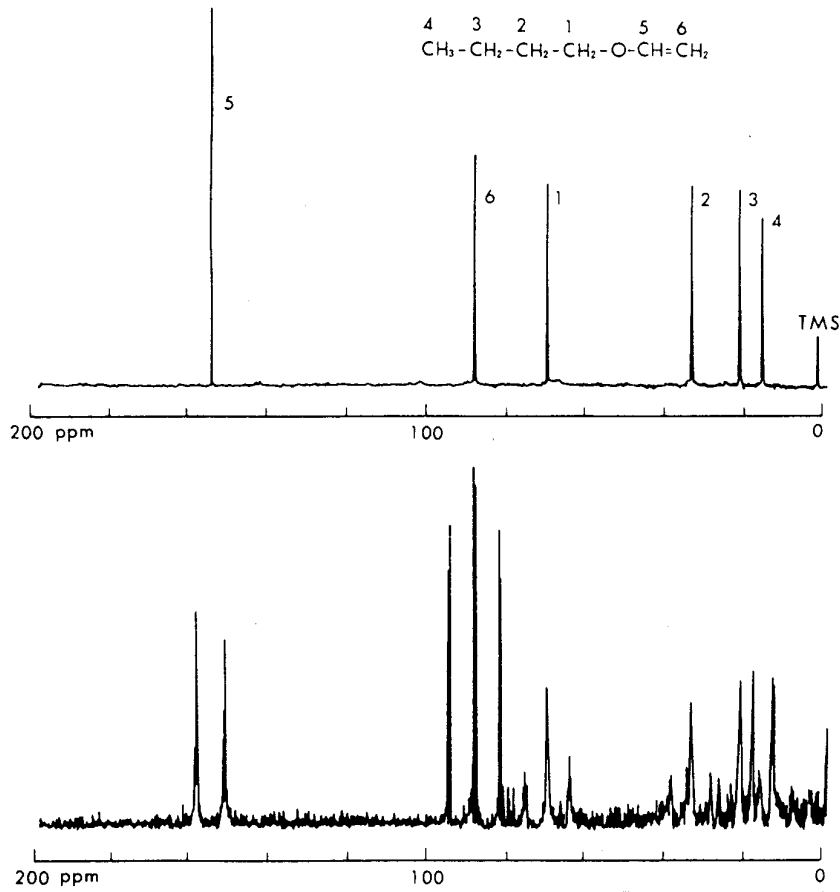


図7. n-ブチルビニルエーテルの25.2MHz ^{13}C -NMRスペクトル
 (上) プロトンノイズデカップリング
 (下) 非デカップリング

核Overhauser効果 (nuclear Overhauser effect, NOE)

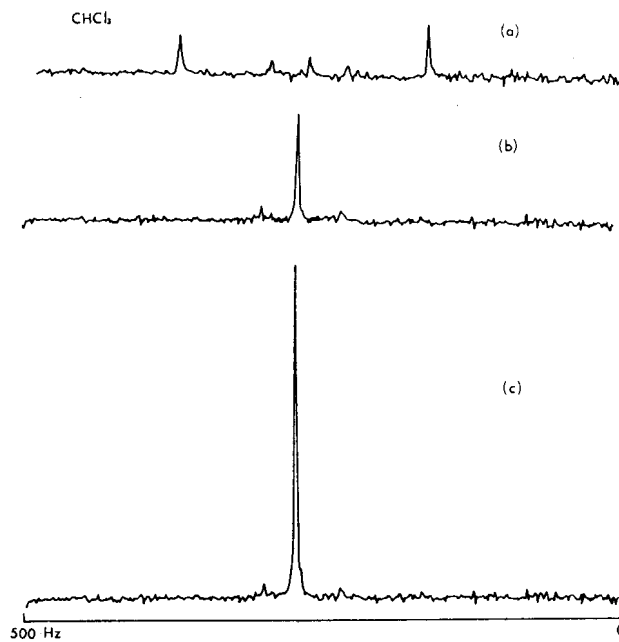


図8. クロロホルムの ^{13}C -NMRスペクトル
 (上) 非デカップリング
 (中) 非NOE条件下でのプロトンデカップリング
 (下) 通常のプロトンデカップリング

[問6] n-ブタノールの ^{13}C -NMRスペクトルを、スピンドカップリングしない場合と、スピンドカップリングした場合について、描け。

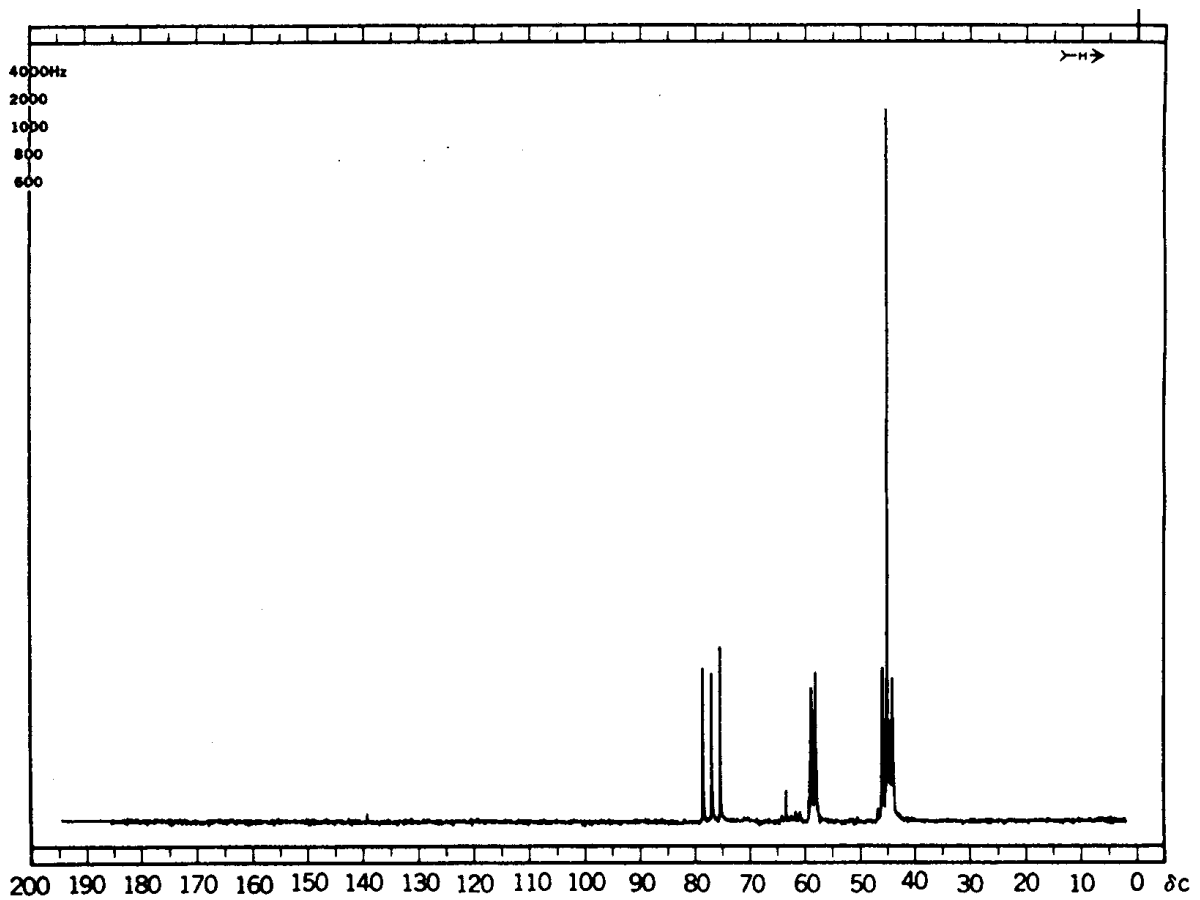
[問7] (a) 化合物 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOCH}(\text{CH}_3)_2$ の ^{13}C -NMRスペクトル (非スピンドカップリング) を描け。

(b) この化合物 $(\text{CH}_3\text{①})_2\text{CH②OCH}(\text{CH}_3)_2$ (①, ②はプロトンを指している) の2種類のプロトンのそれぞれ (①または②) だけに電磁波を照射 (単一周波数照射) してプロトンデカップリングした場合の ^{13}C -NMRスペクトルを描け。

[9] NMRスペクトルによる構造決定

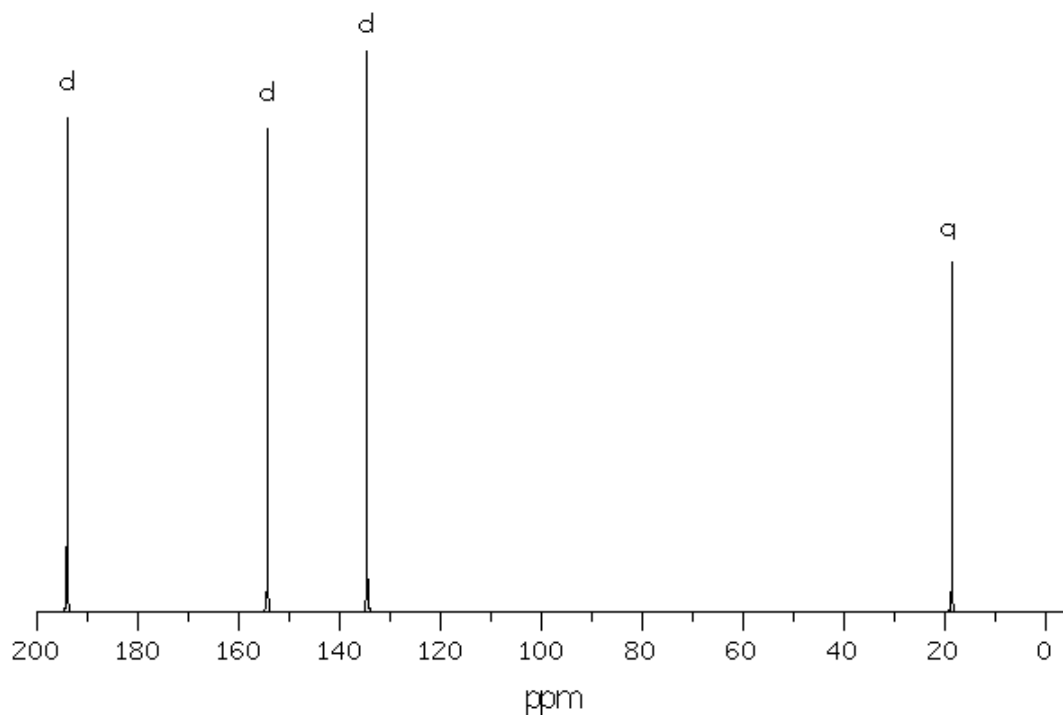
帰属 (assignment), 同定 (identification)

[問8] 化合物 $\text{C}_3\text{H}_5\text{Cl}_3$ の ^{13}C -NMRスペクトルを示す。構造を決定せよ。
ただし、スペクトル中の 77 ppm の等しい強度の三重線は、 CDCl_3 によるものである。

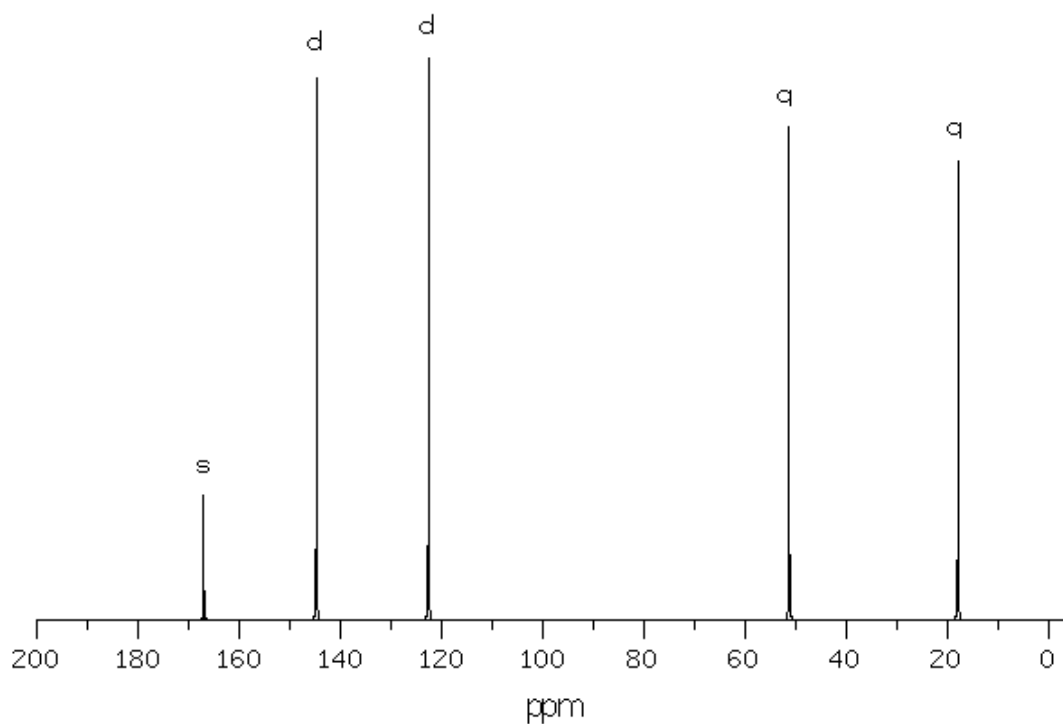


(注: 解答は <http://www.geocities.jp/n1625toshi/txt/iac/CNMR.html>)

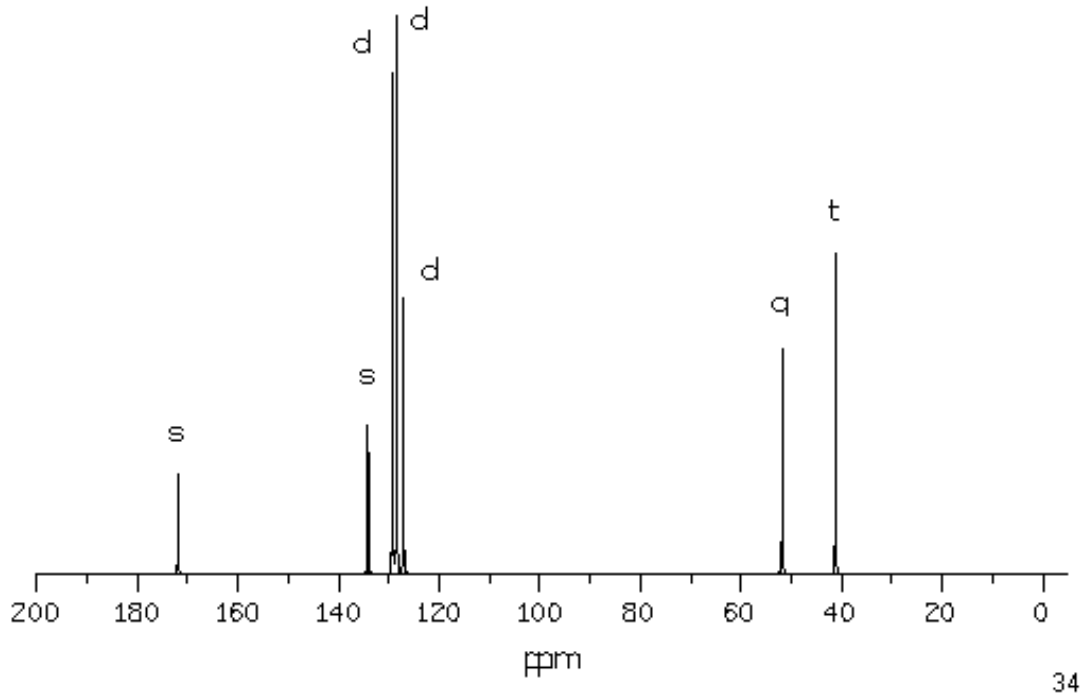
[問9] 化合物 $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}$ の ^{13}C -NMR スペクトルを示す。構造を決定せよ。ただし、シグナルの多重度は、s : 一重線, d : 二重線, t : 三重線, q : 四重線である。



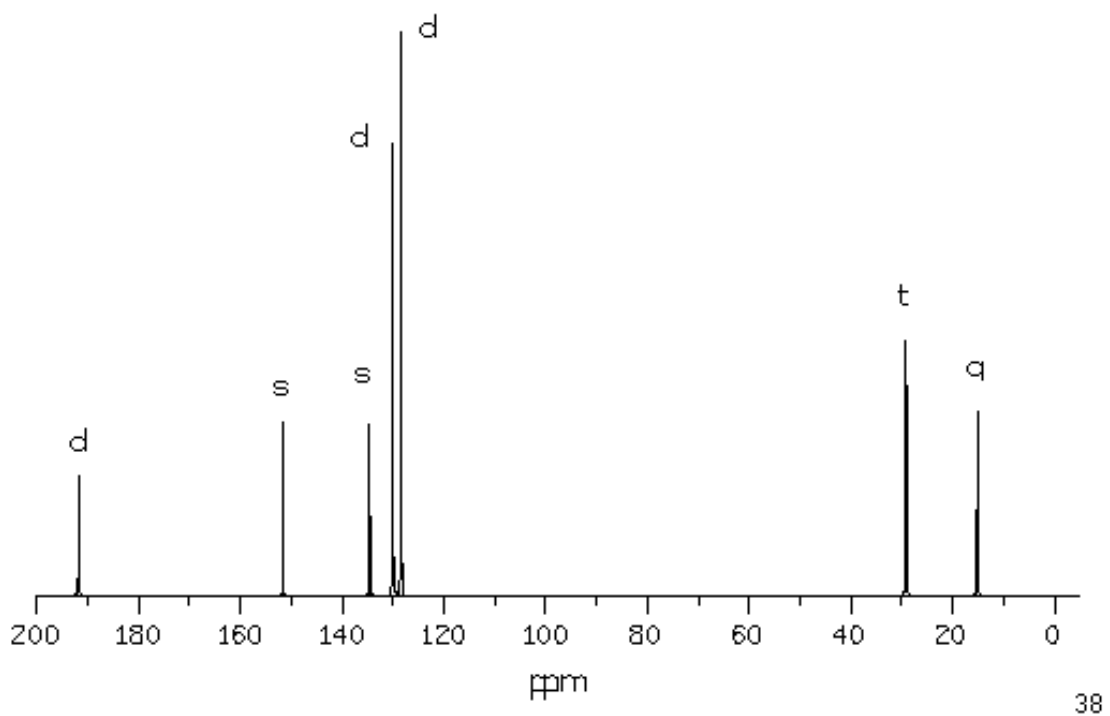
[問10] 化合物 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ の ^{13}C -NMR スペクトルを示す。構造を決定せよ。



[問 1 1] 化合物 $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$ の ^{13}C -NMR スペクトルを示す。構造を決定せよ。

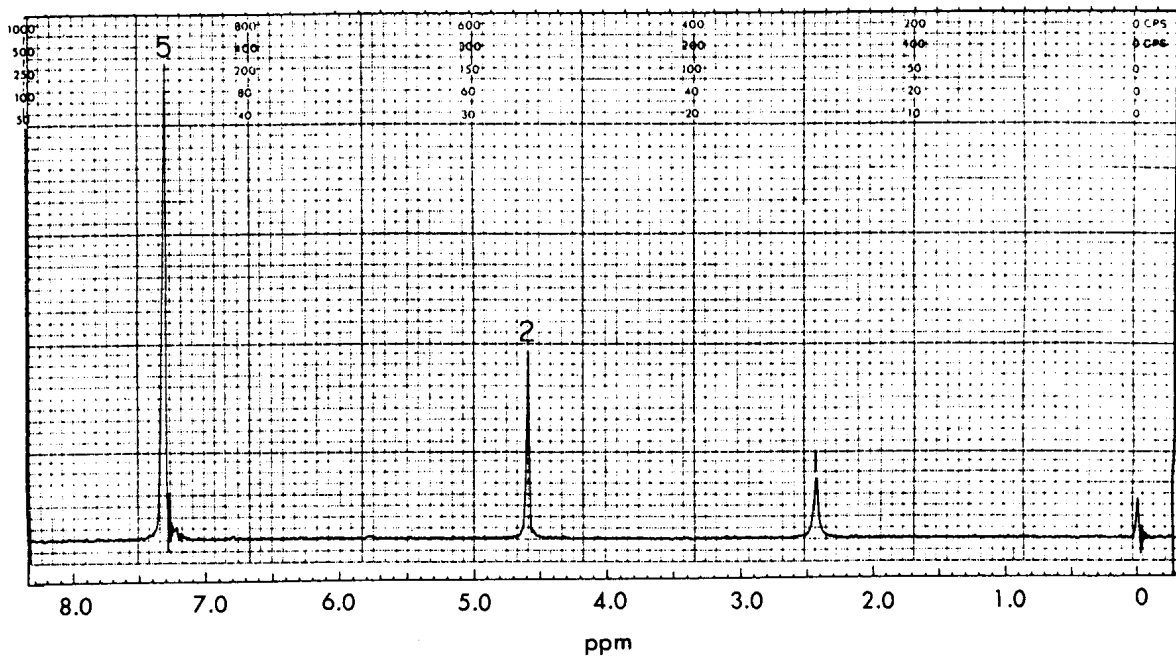
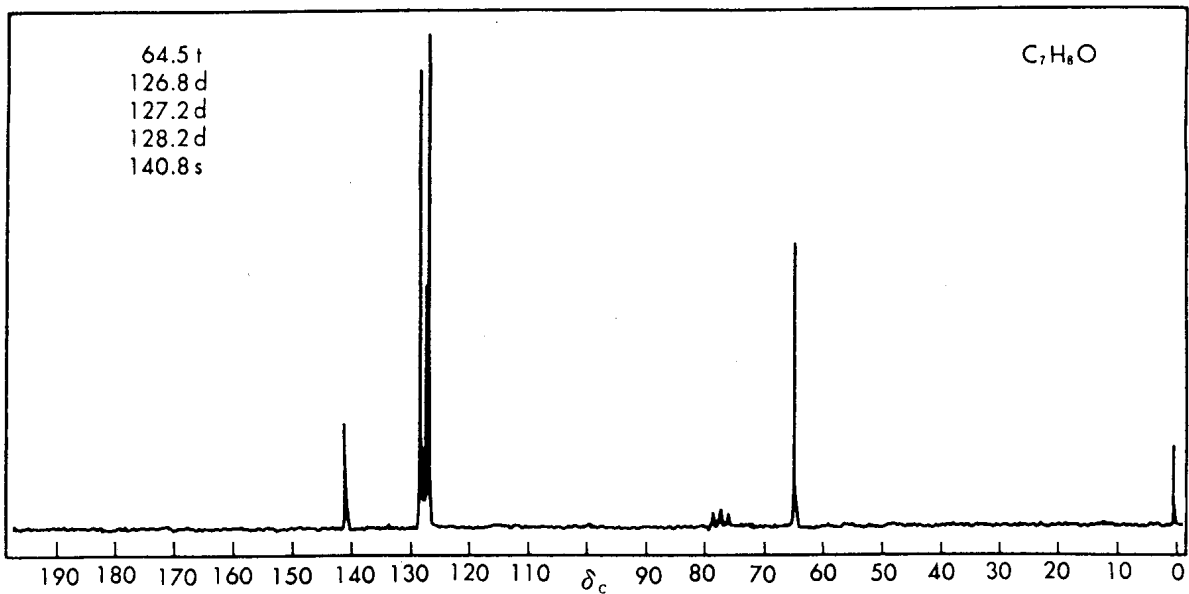


[問 1 2] 化合物 $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}$ の ^{13}C -NMR スペクトルを示す。構造を決定せよ。

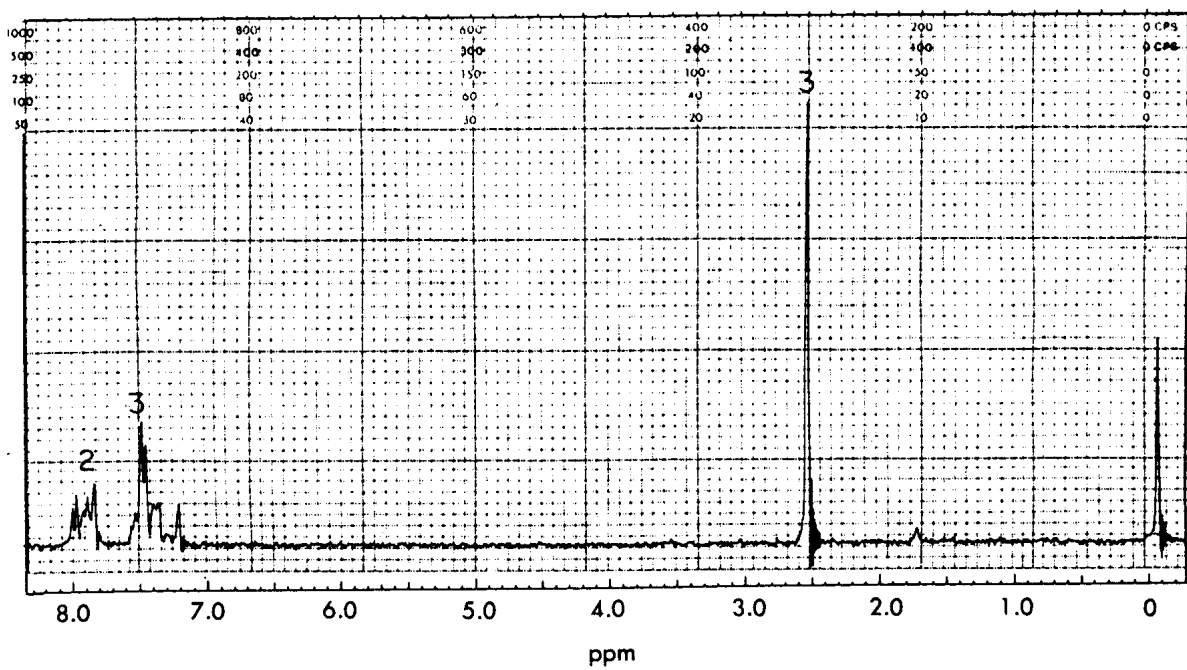
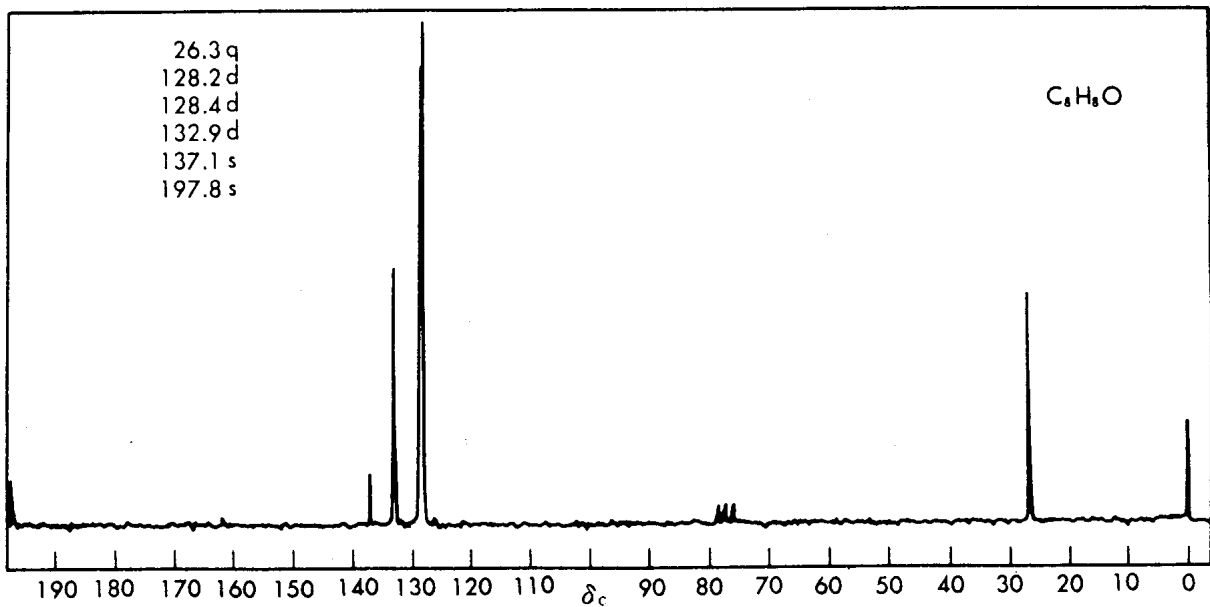


[問13] 上側に ^{13}C -, 下側に ^1H (プロトン)-NMRスペクトルを示す。 ^{13}C -NMRスペクトルは、 25.2MHz で測定(プロトンデカップリング)されている。 ^1H -NMRスペクトルは 60MHz で測定されている。

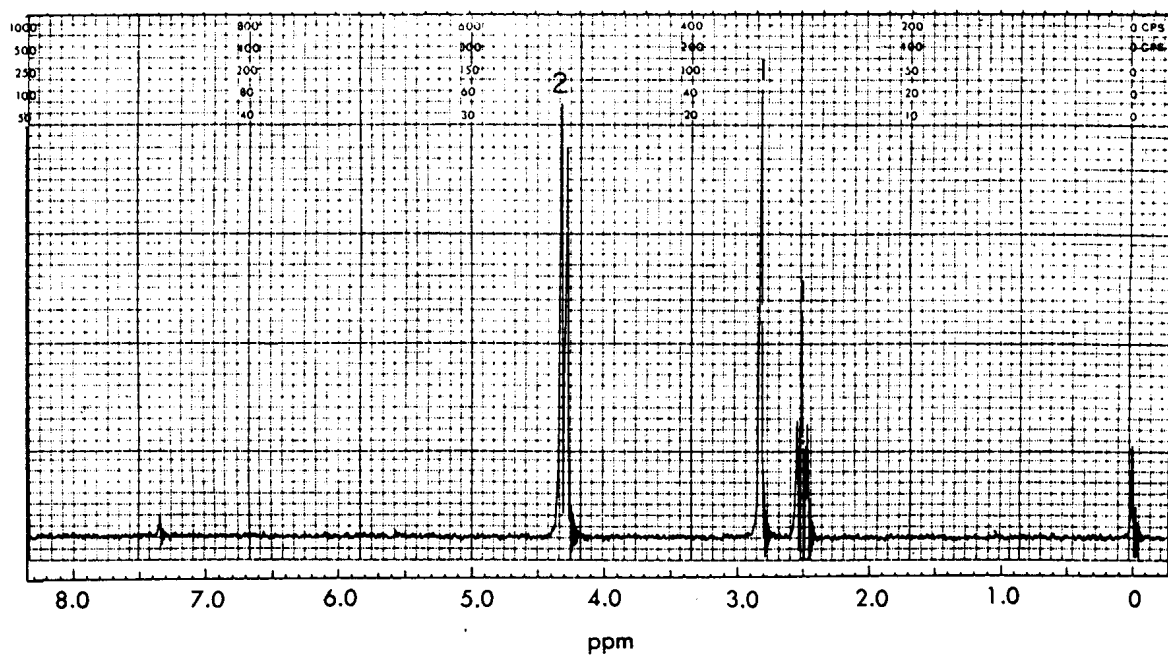
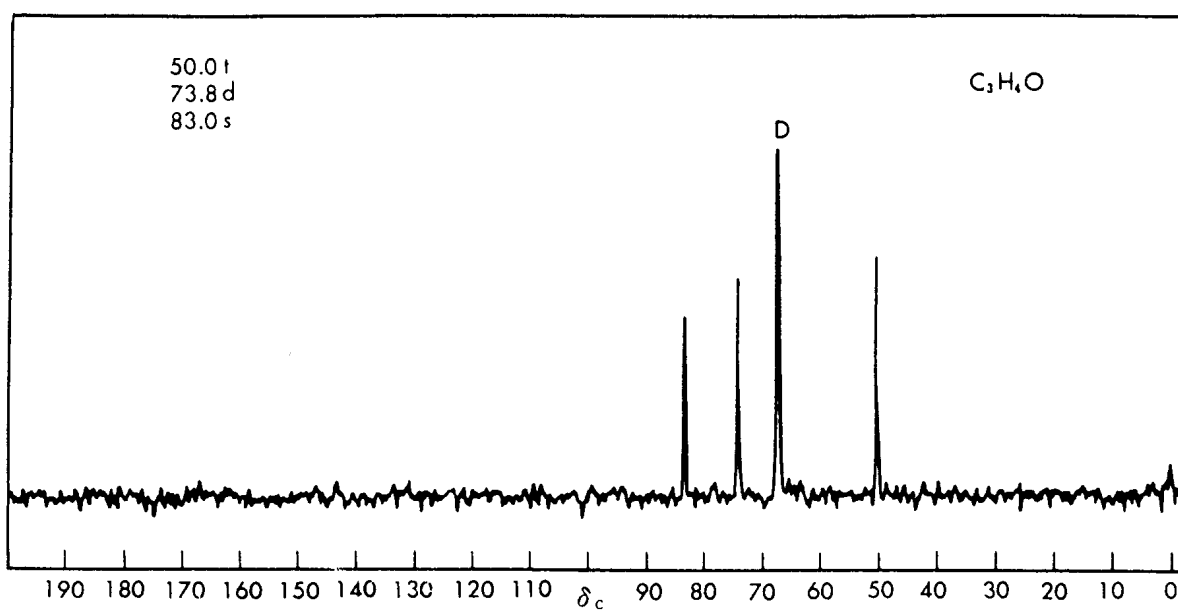
化合物 $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$ の構造を決めよ。



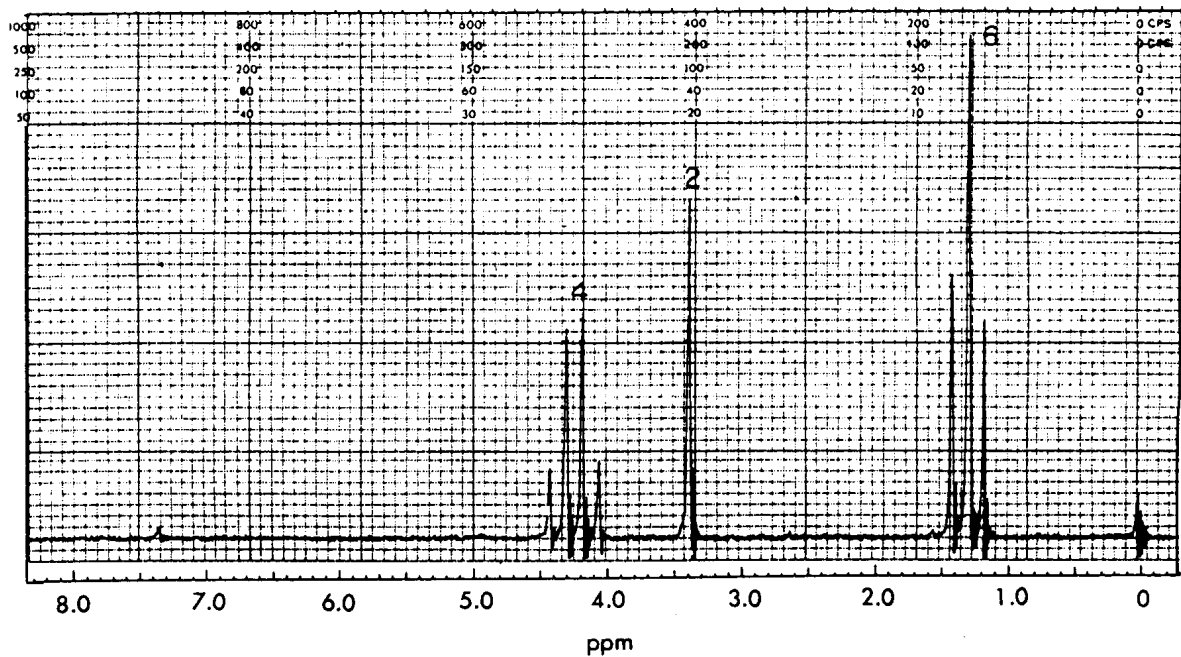
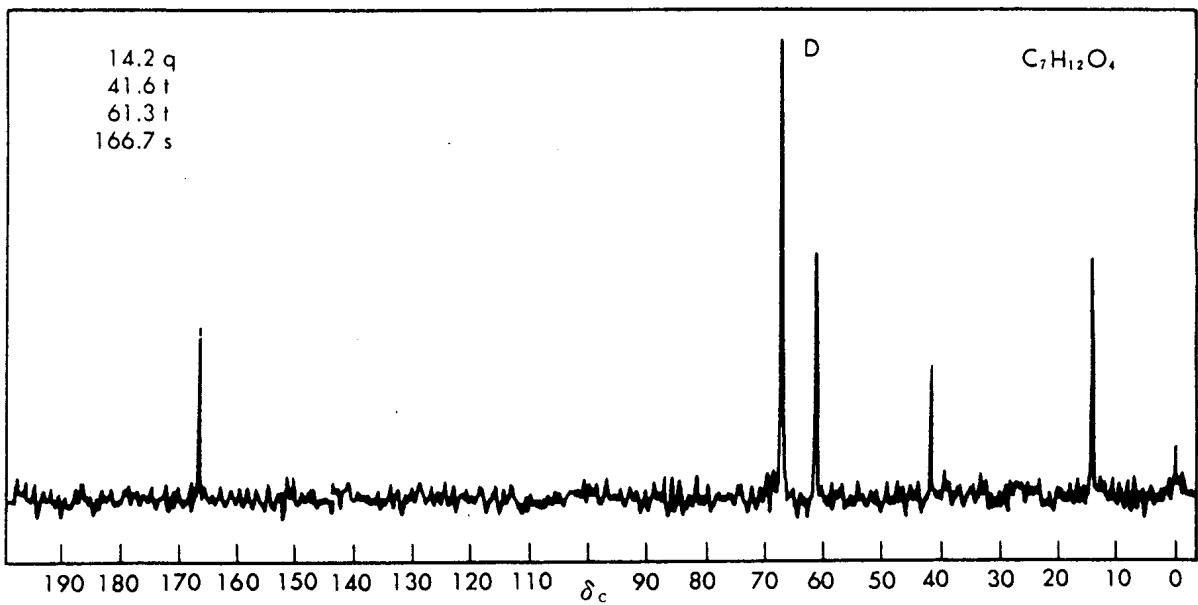
[問14] 化合物 $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$ の構造を決めよ。



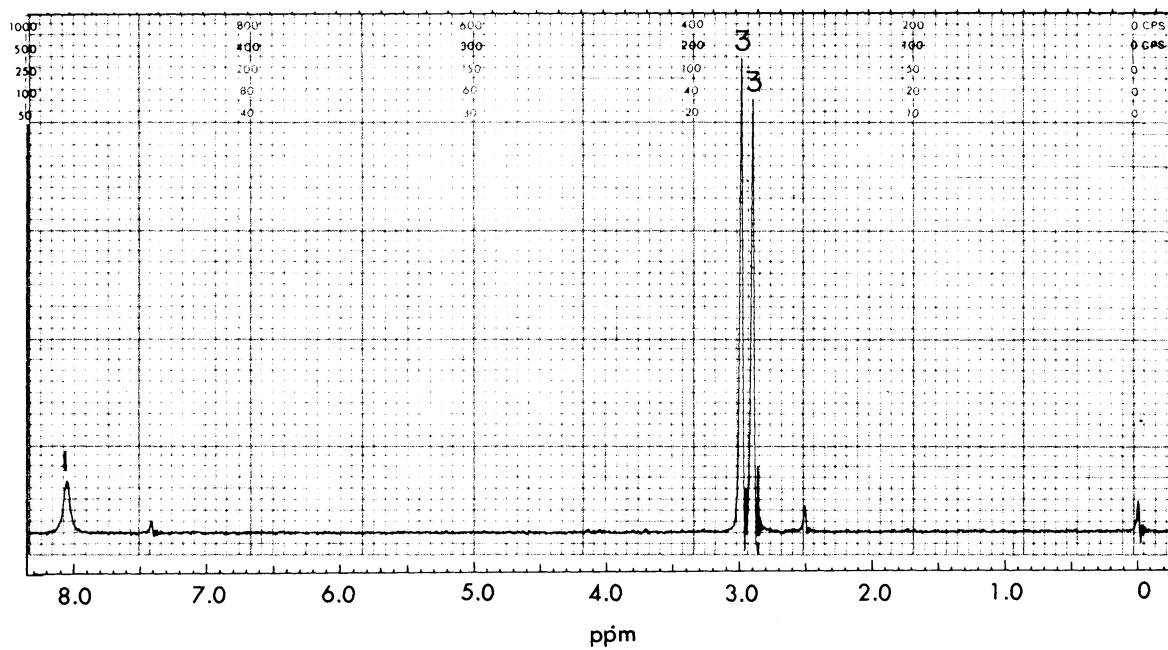
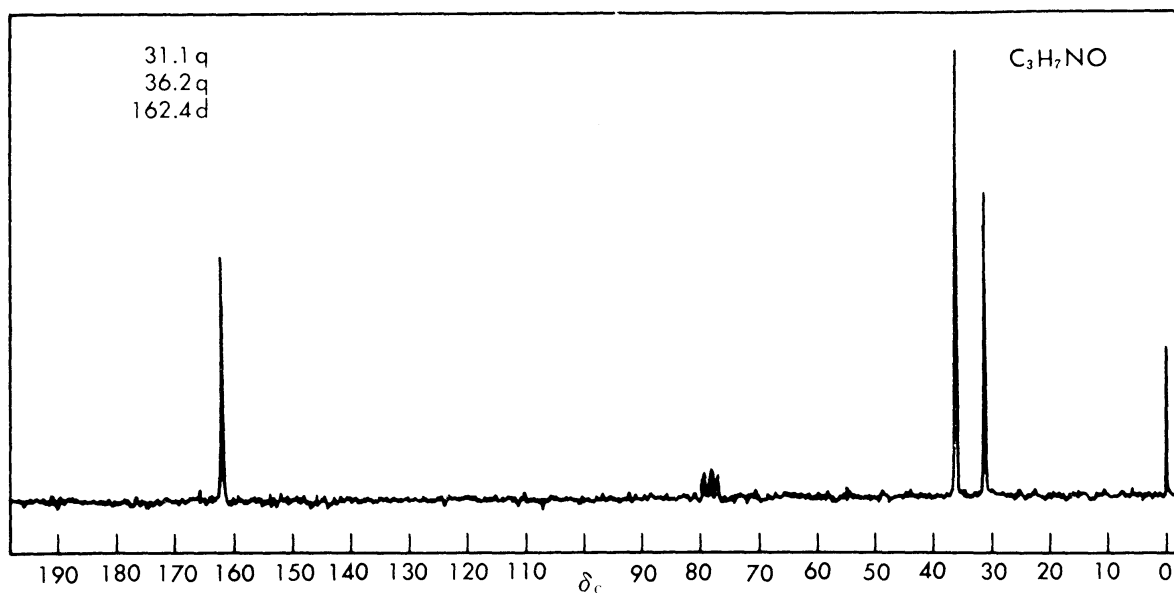
[問15] 化合物 $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$ の構造を決めよ。



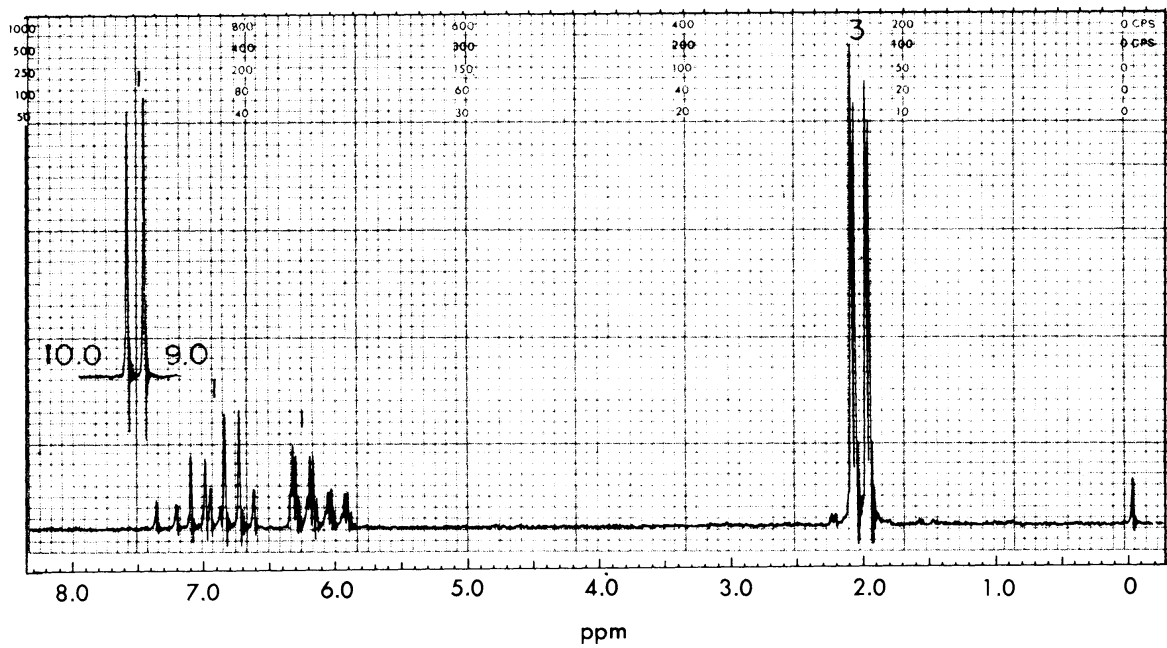
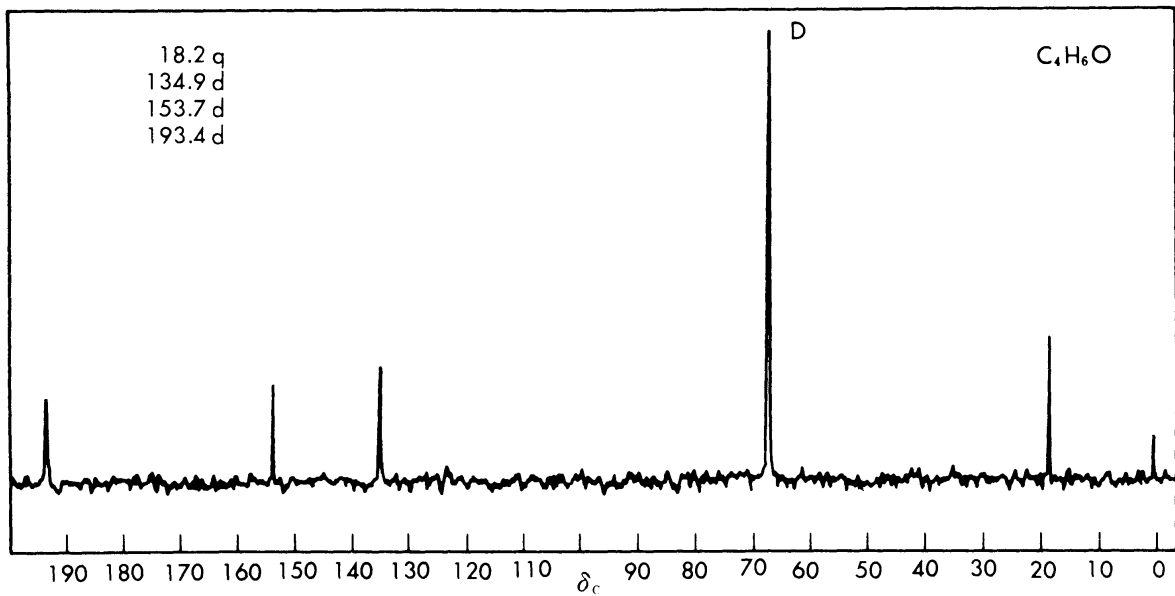
[問16] 化合物 $\text{C}_7\text{H}_{12}\text{O}_4$ の構造を決めよ。



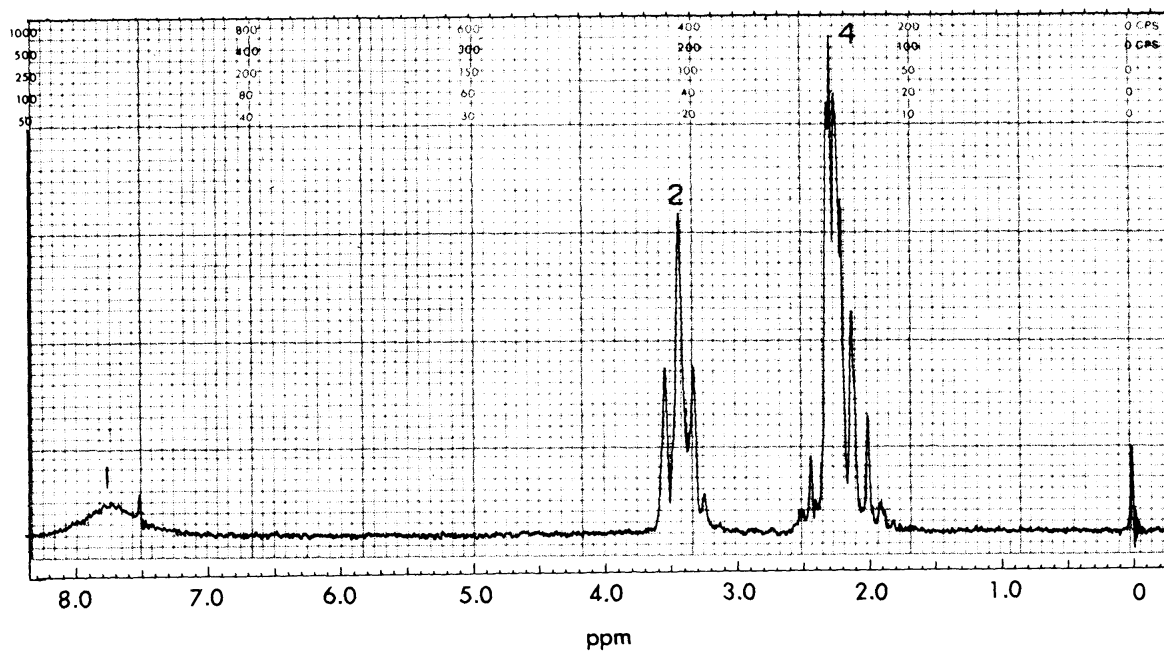
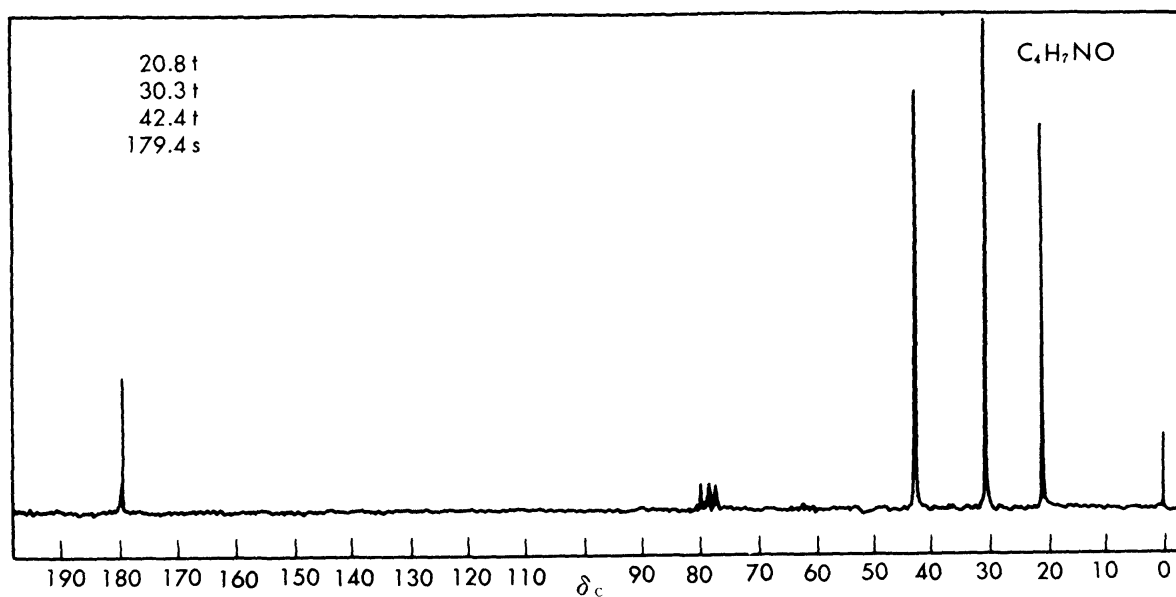
[問17] 化合物 $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}$ の構造を決めよ。



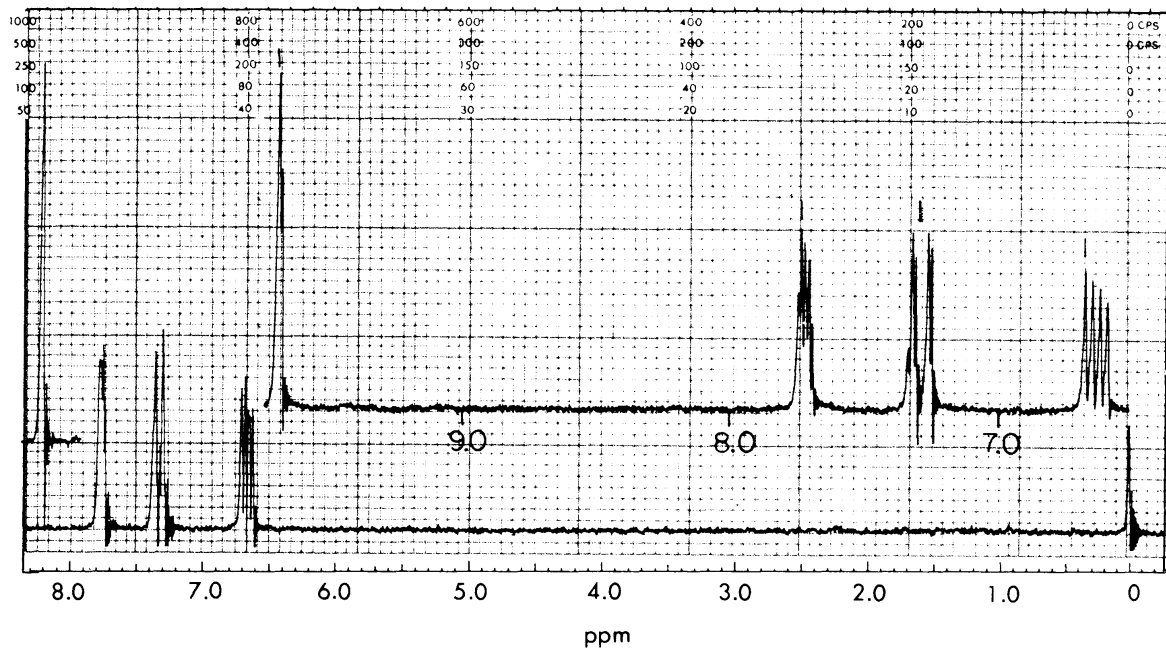
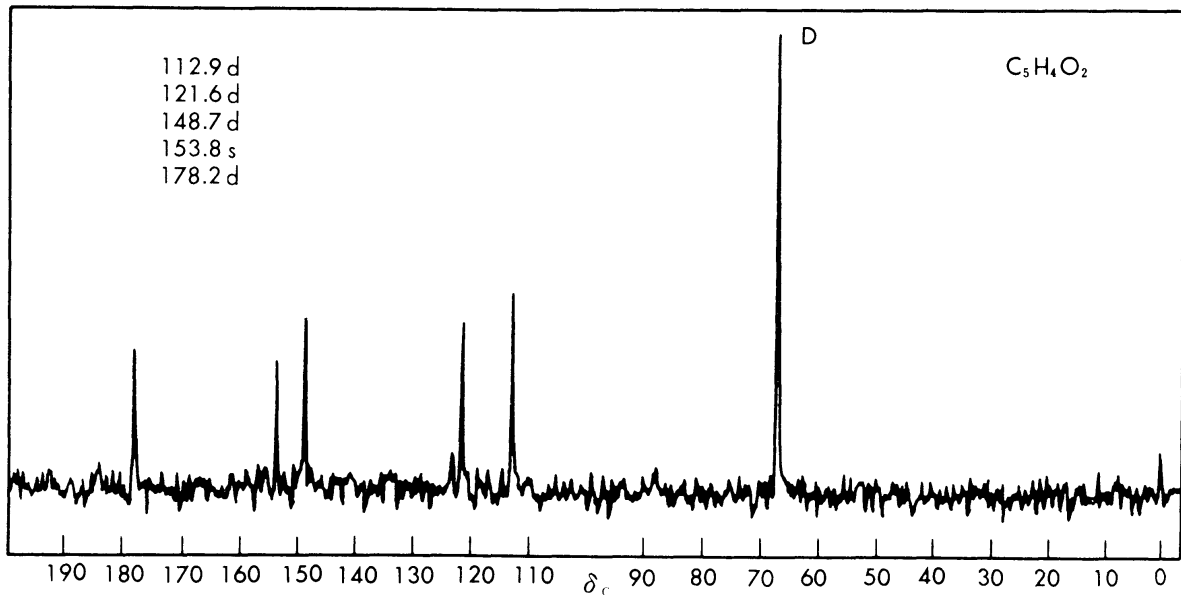
[問18] 化合物 $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}$ の構造を決めよ。



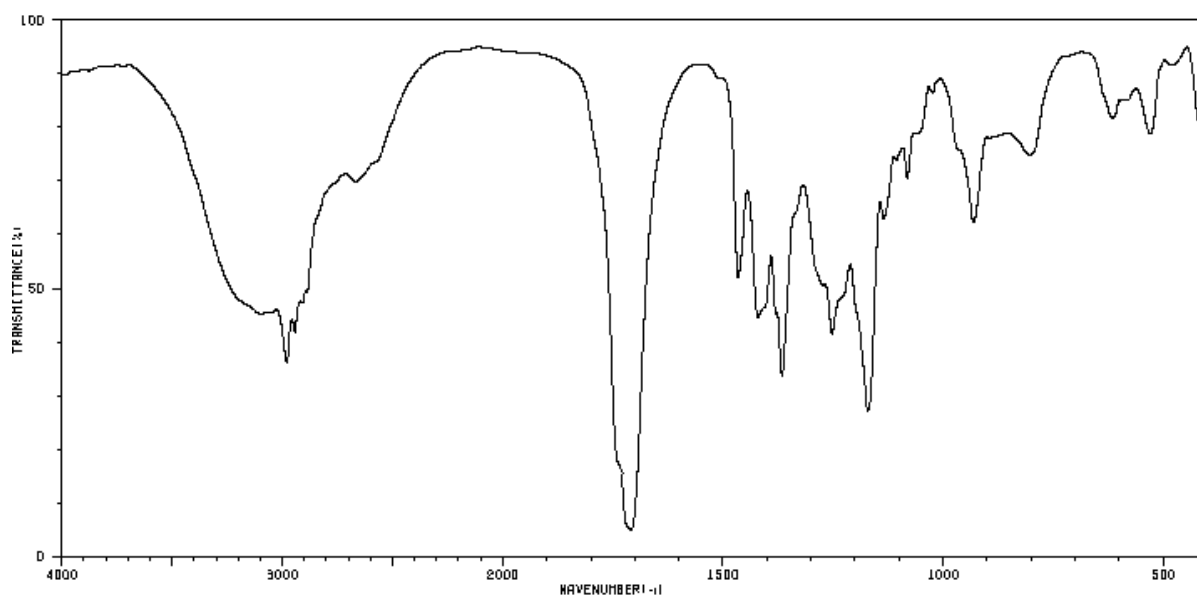
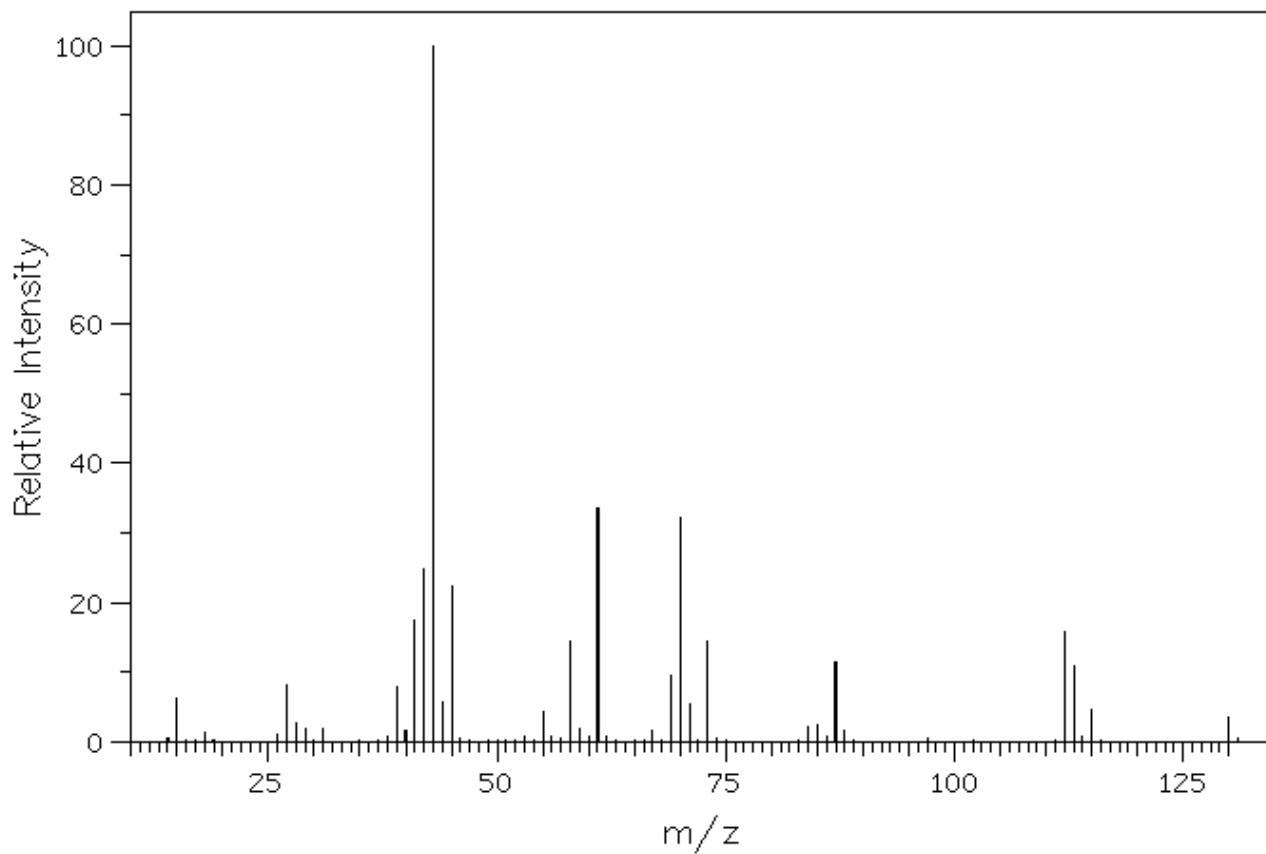
[問19]* 化合物 $\text{C}_4\text{H}_7\text{NO}$ の構造を決めよ。

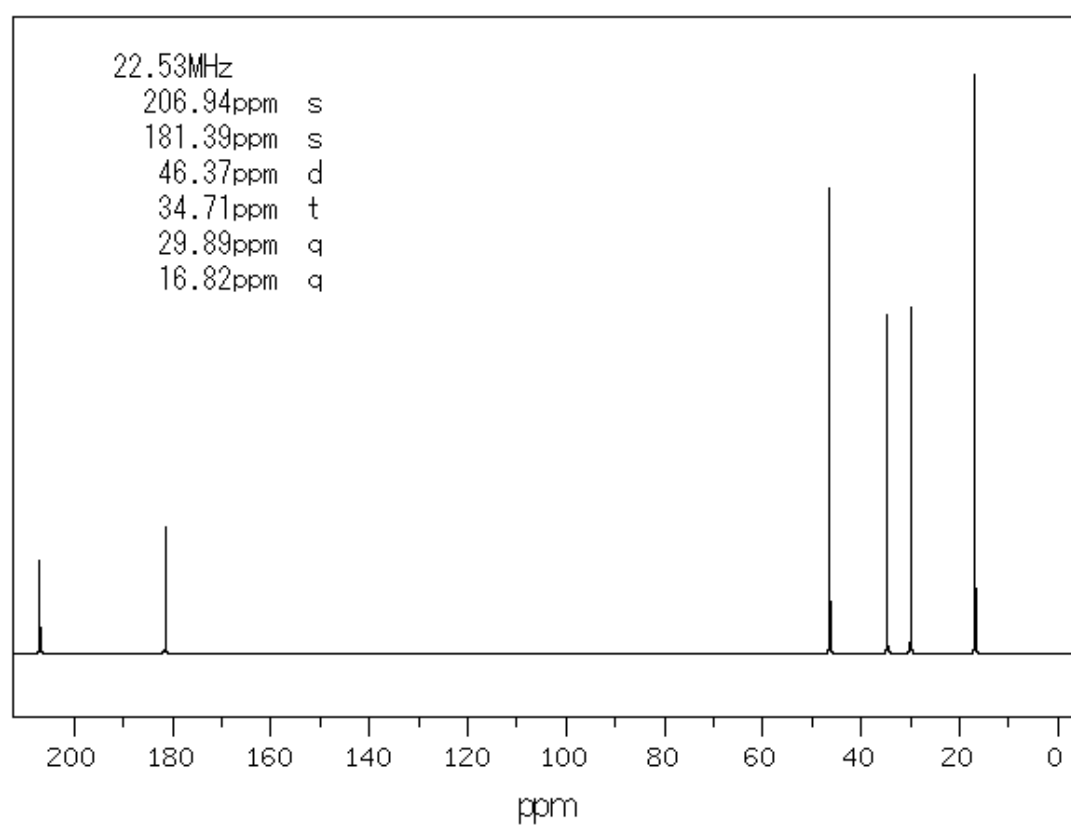
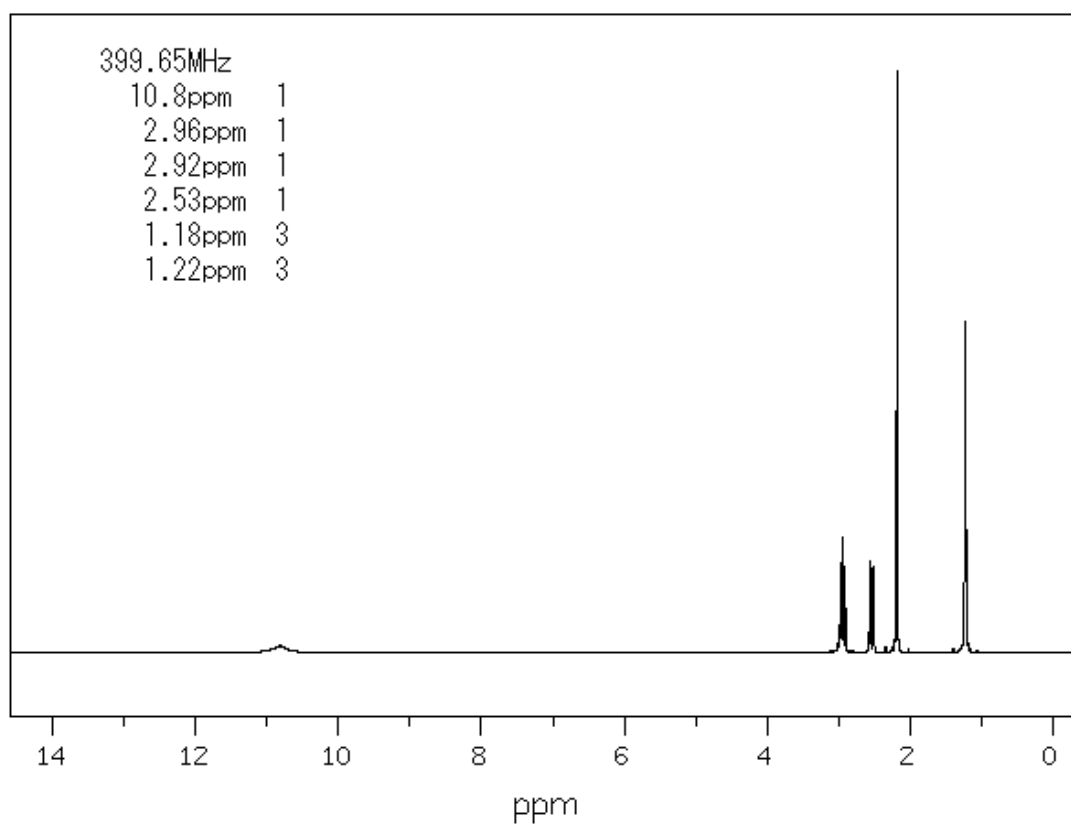


[問20]* 化合物 $\text{C}_5\text{H}_4\text{O}_2$ の構造を決めよ。

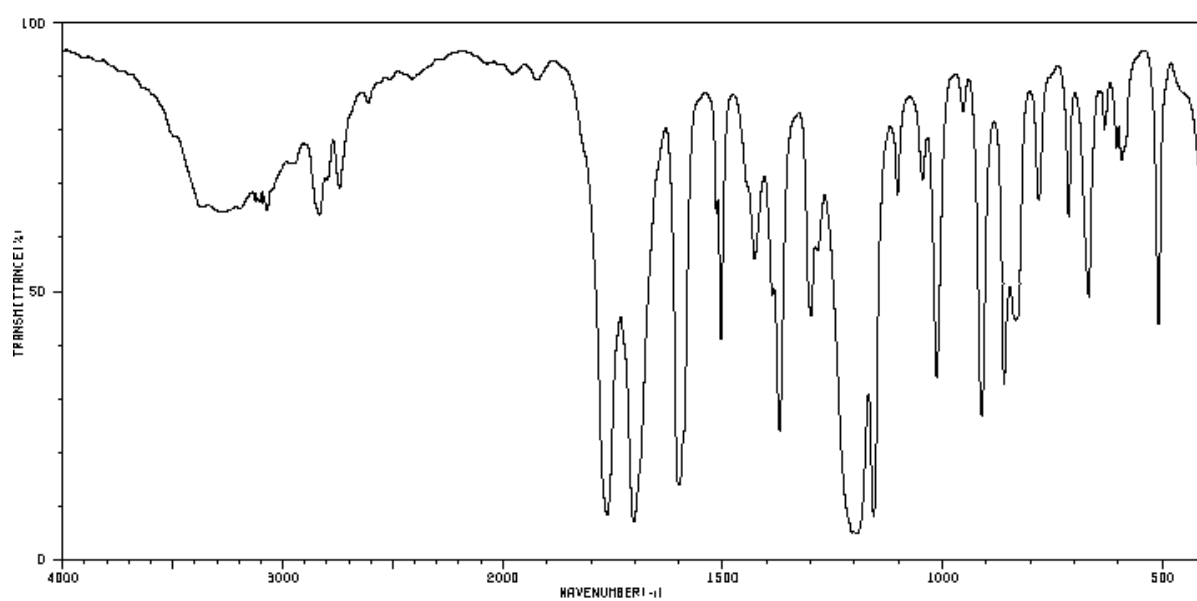
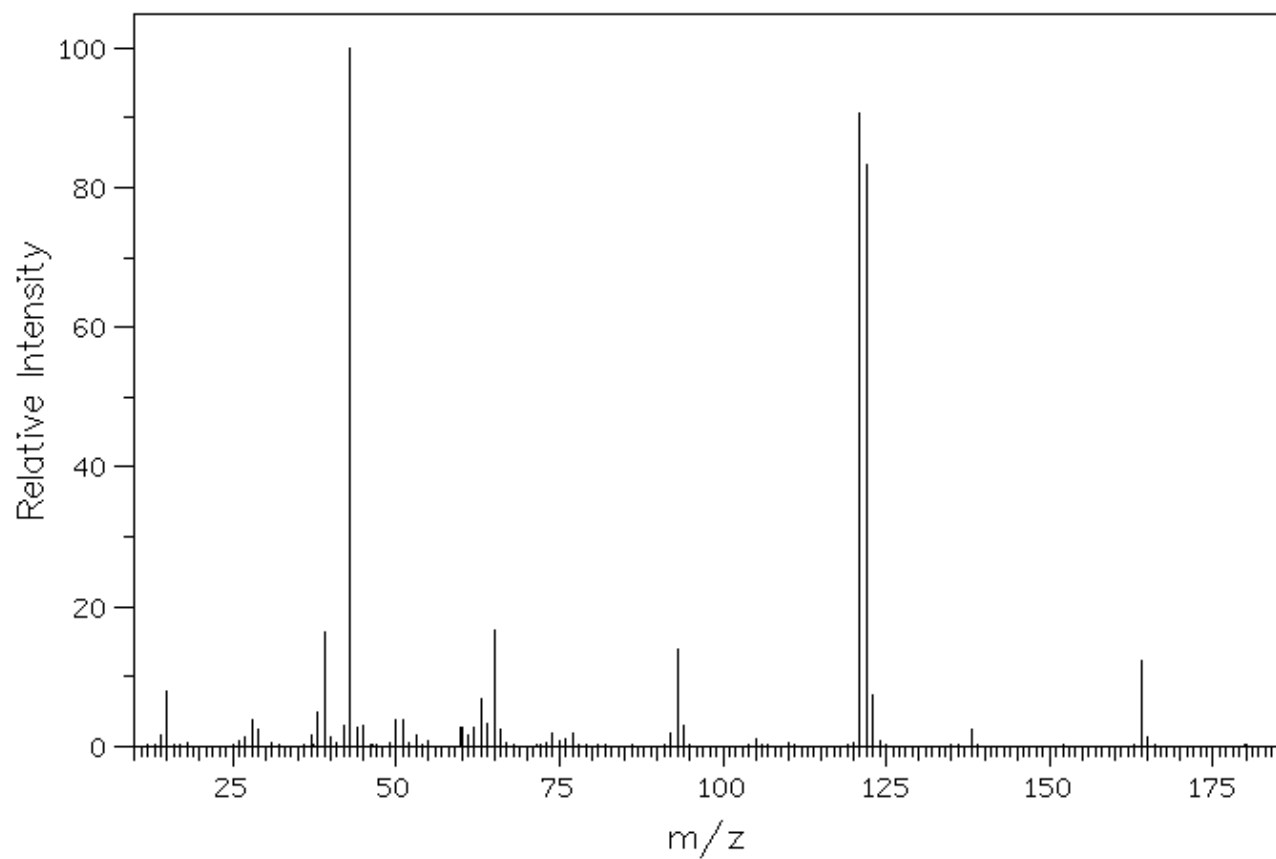


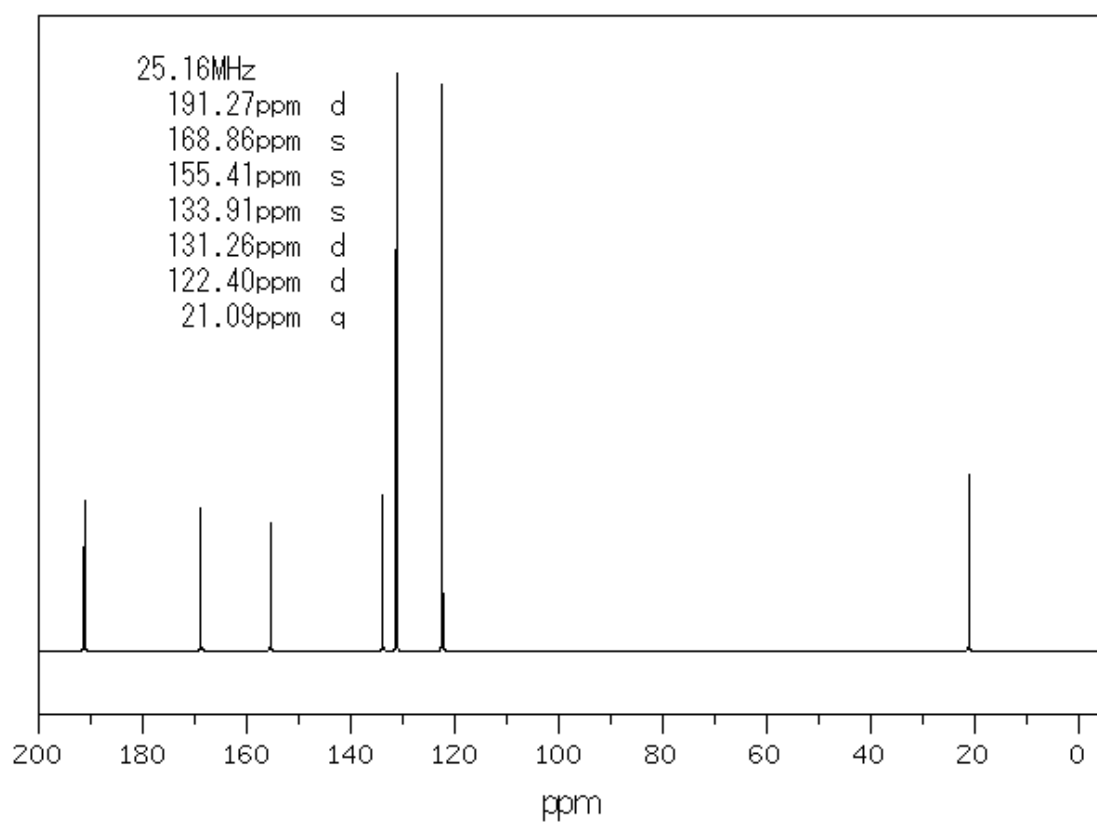
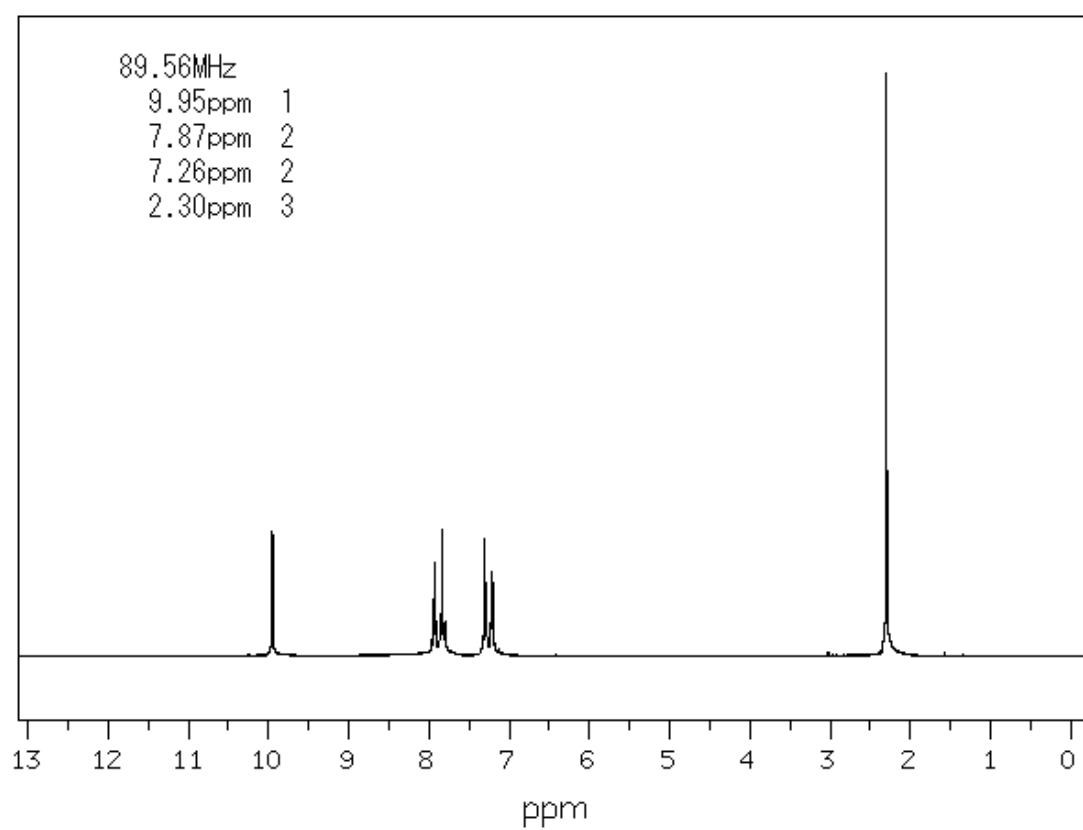
[問21] 化合物 $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_3$ の構造を決めよ。



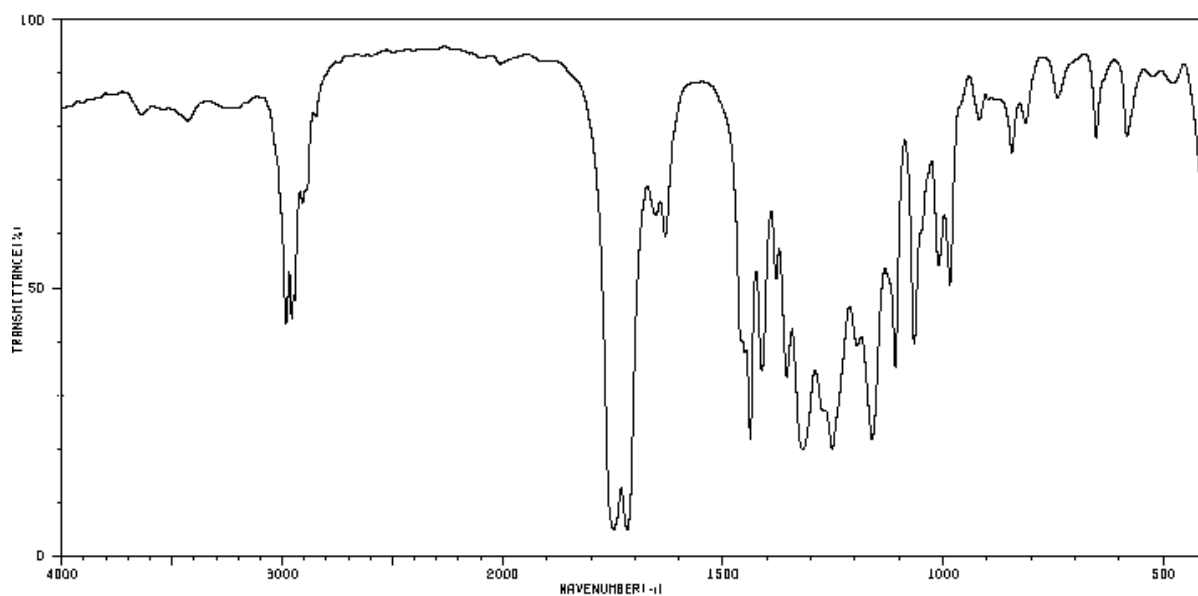
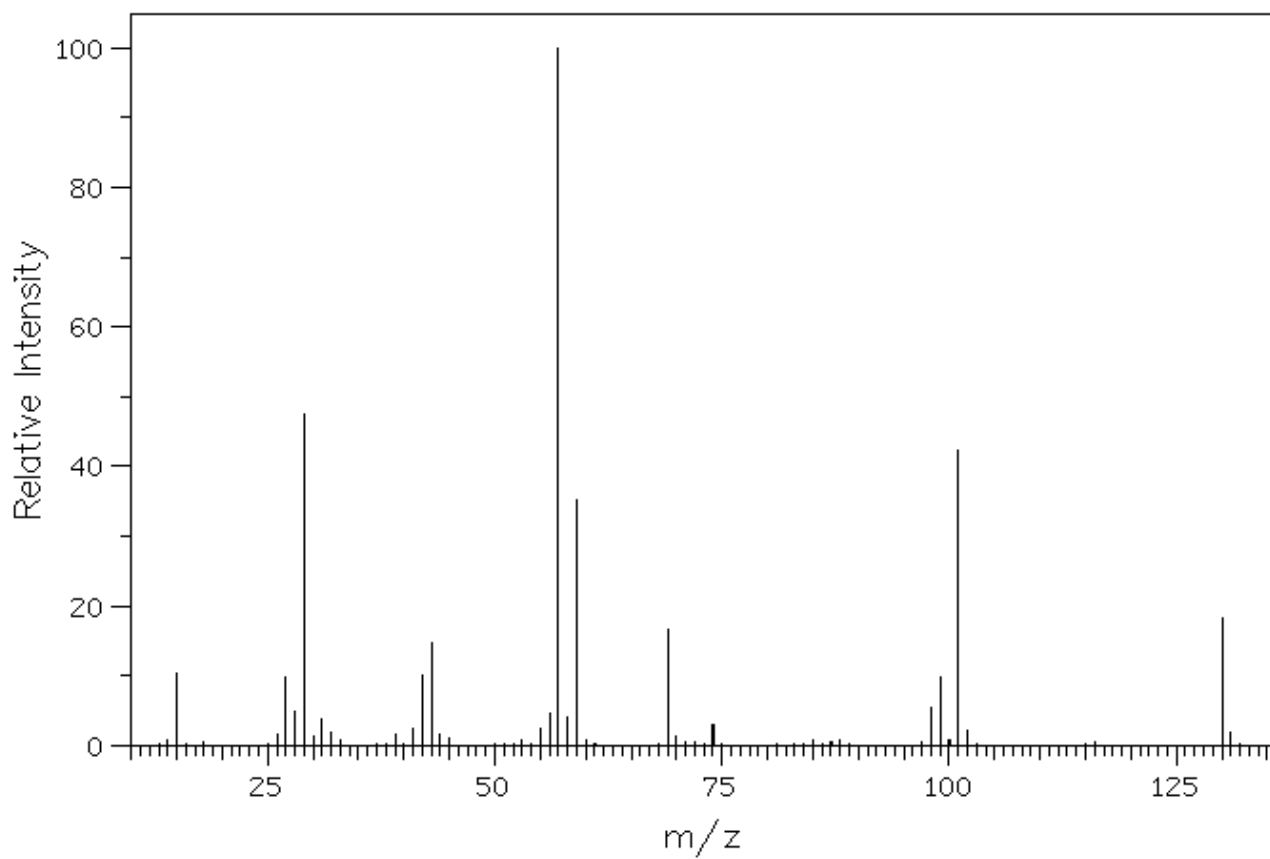


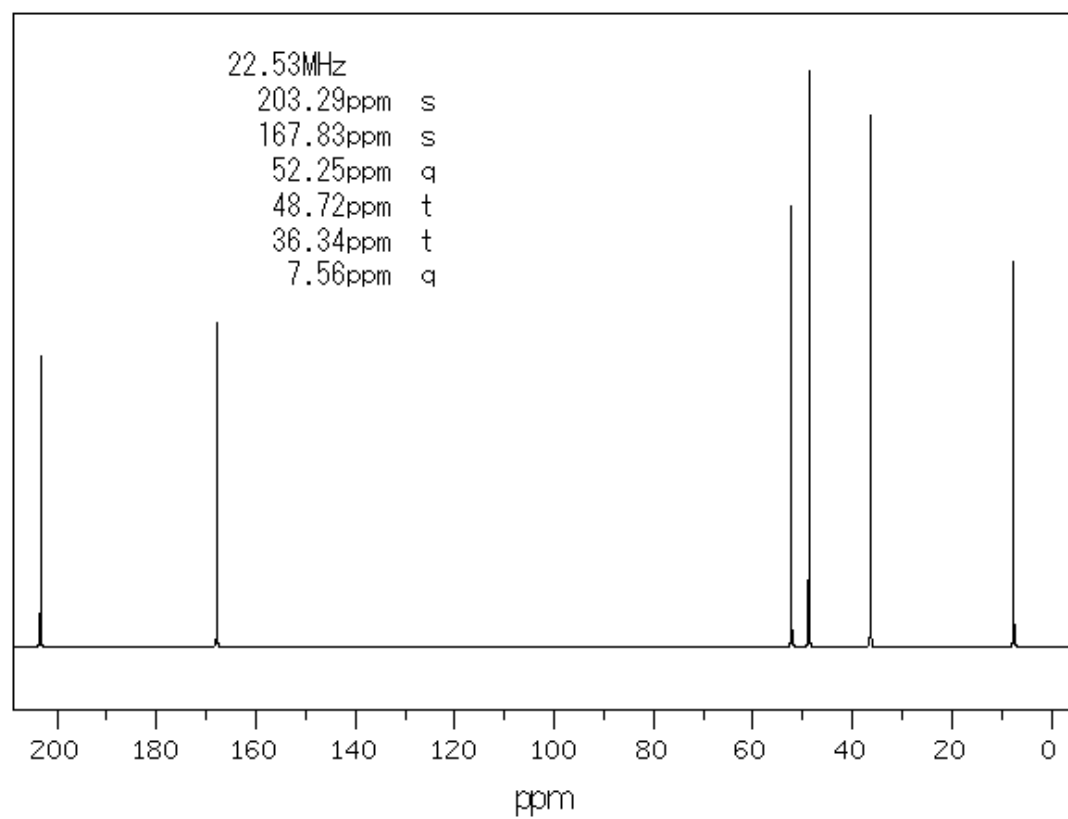
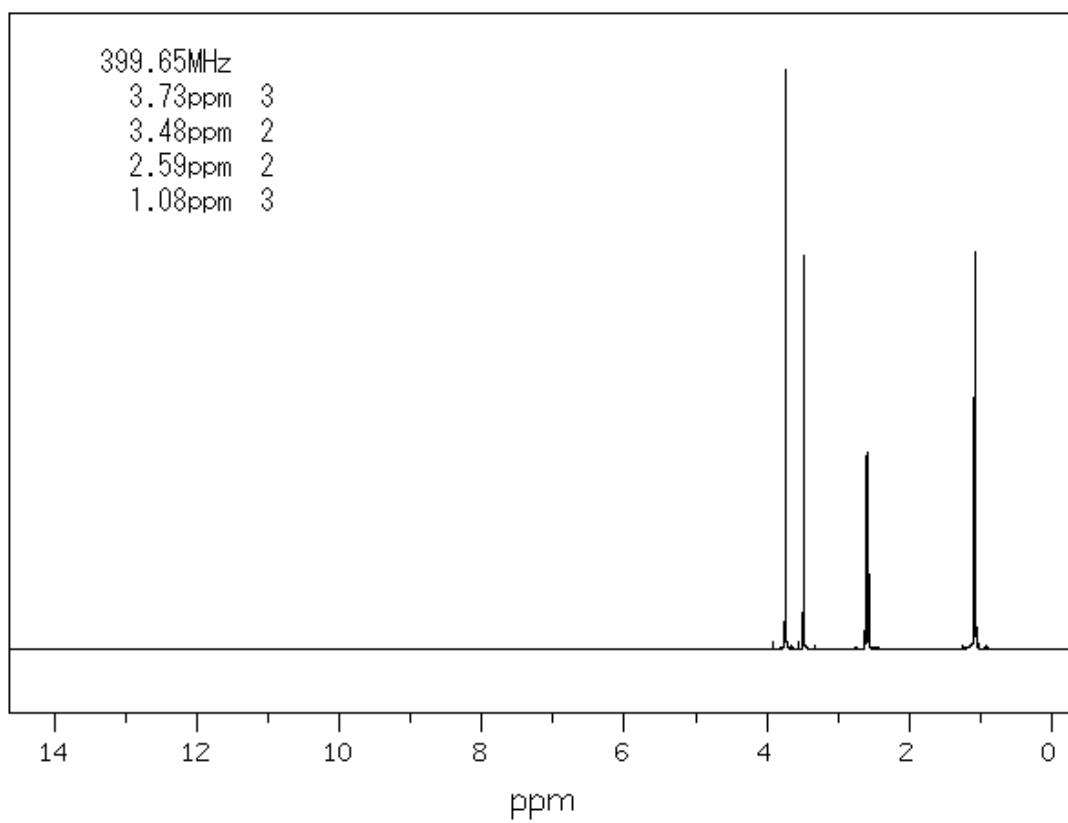
[問22] 化合物 $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_3$ の構造を決めよ。



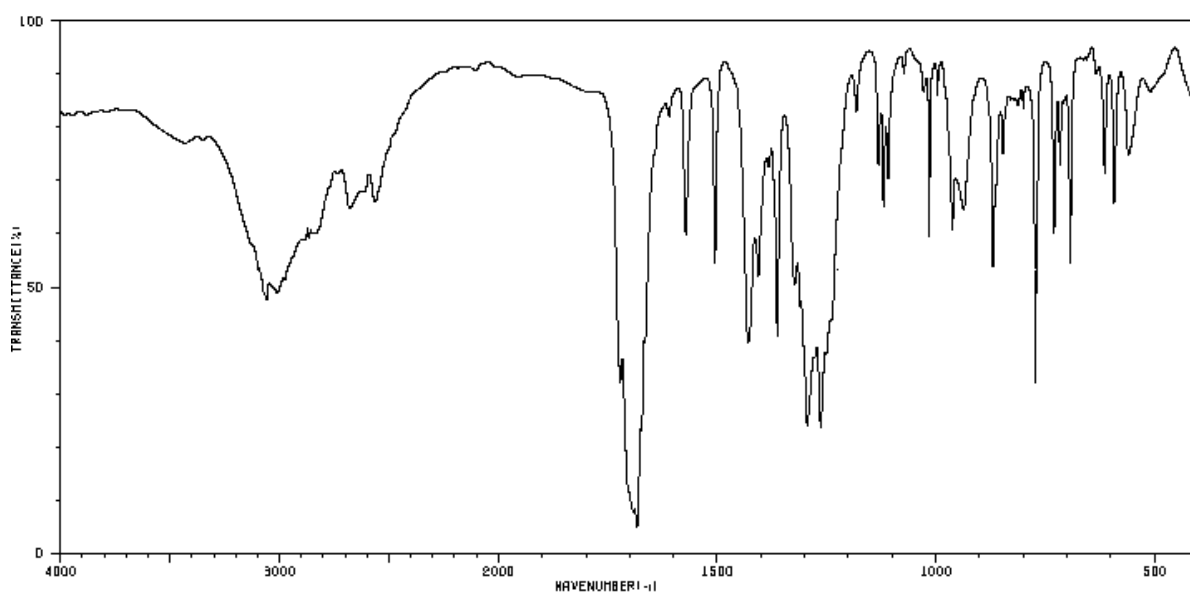
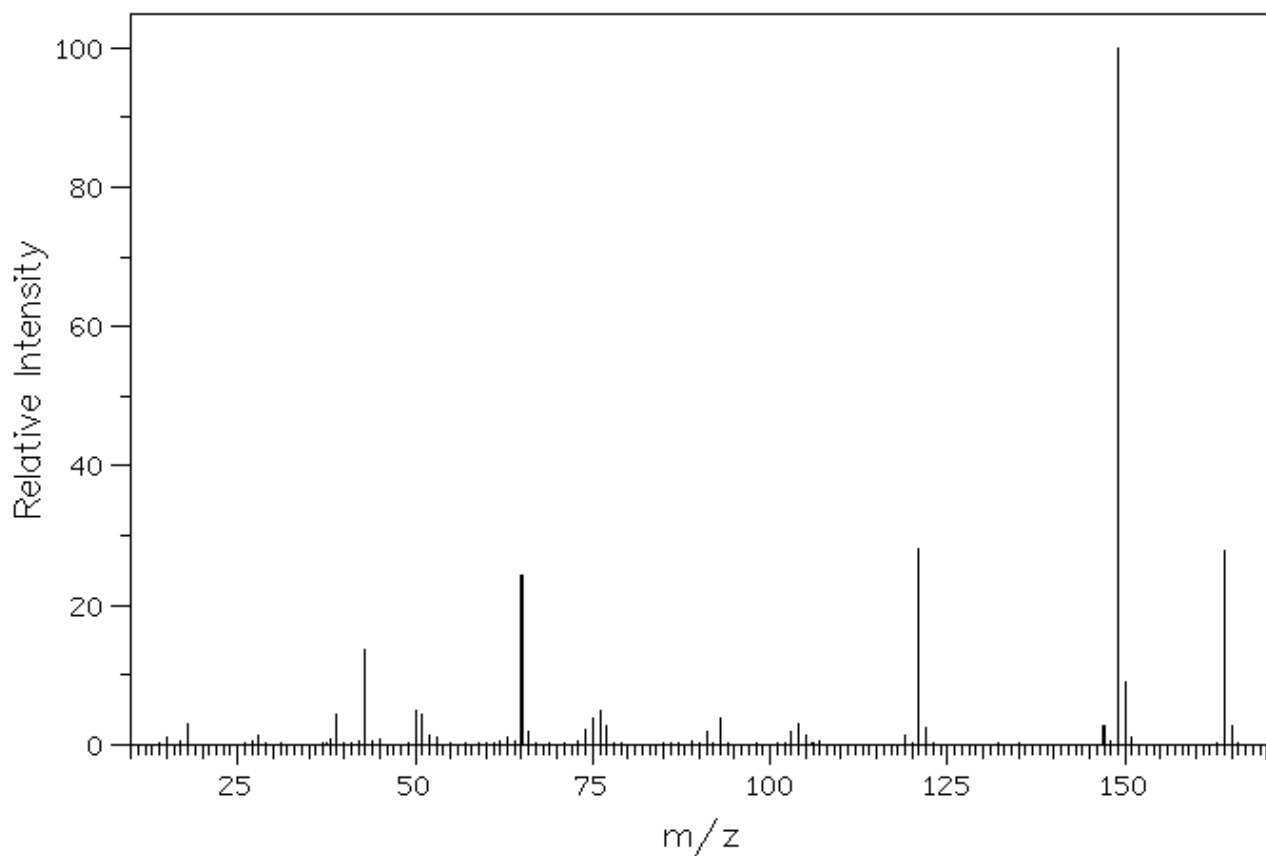


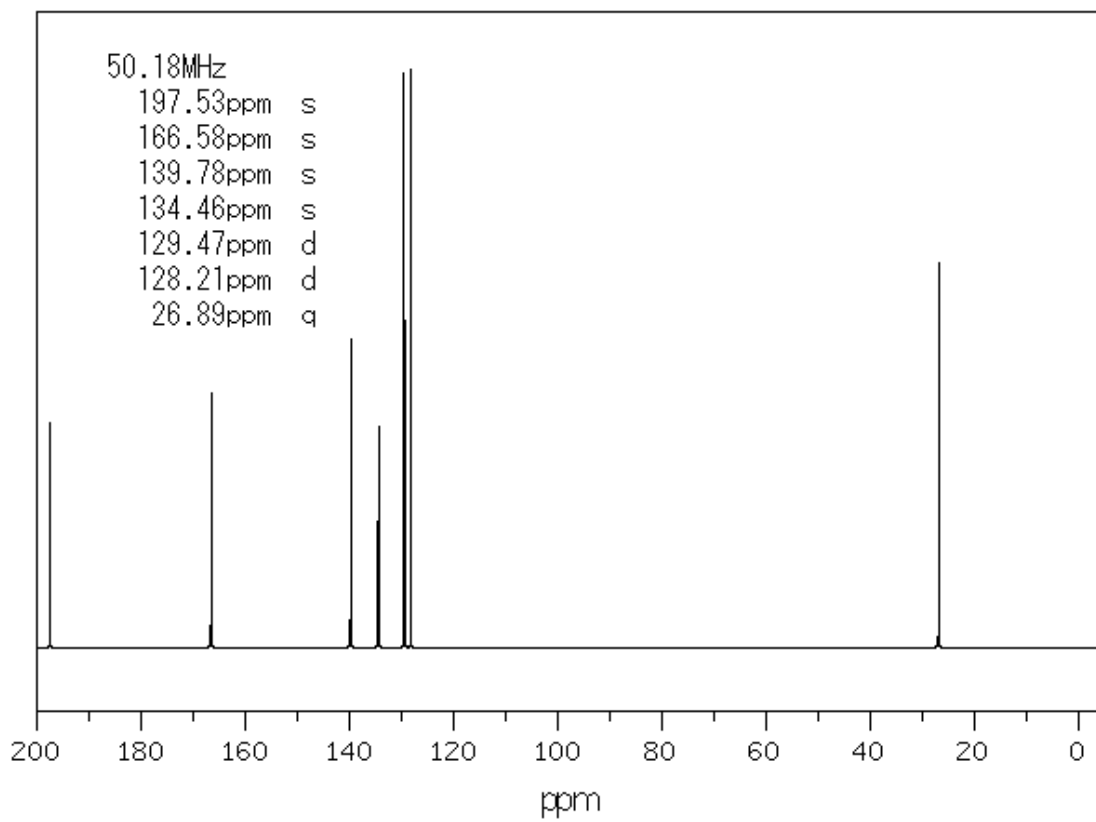
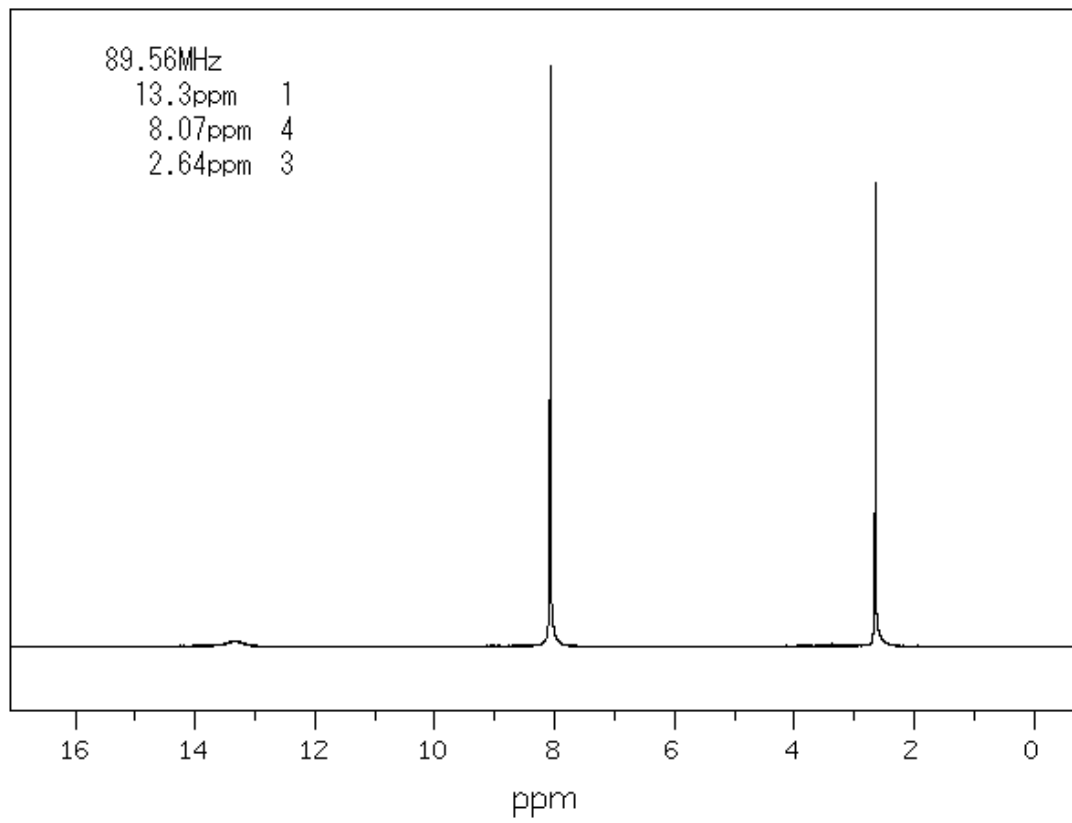
[問23] 化合物 $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_3$ の構造を決めよ。



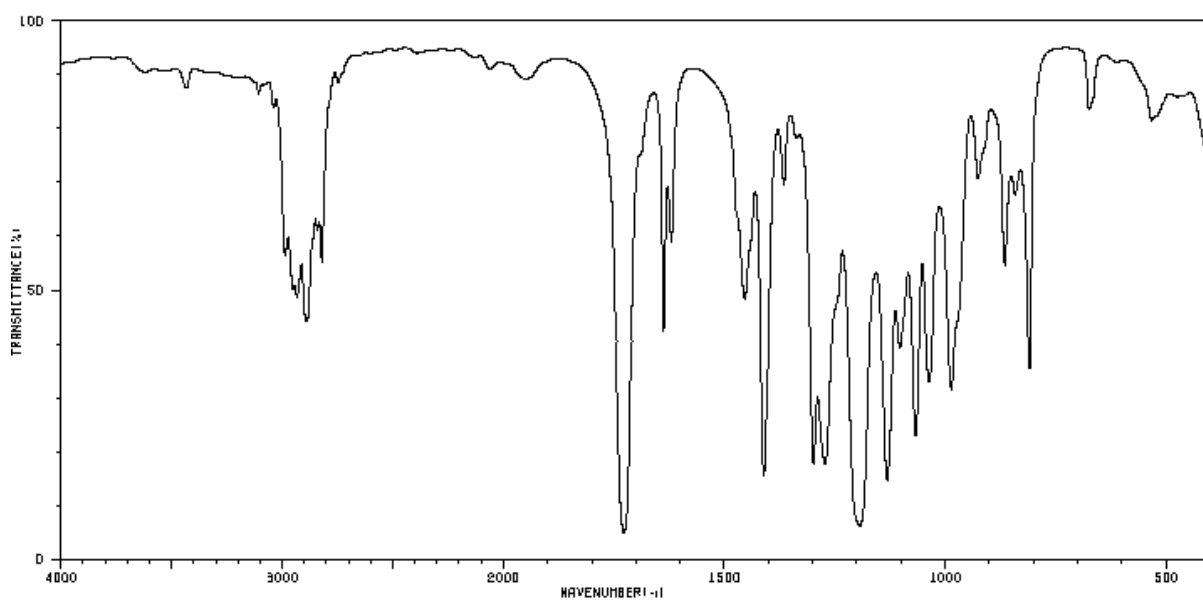
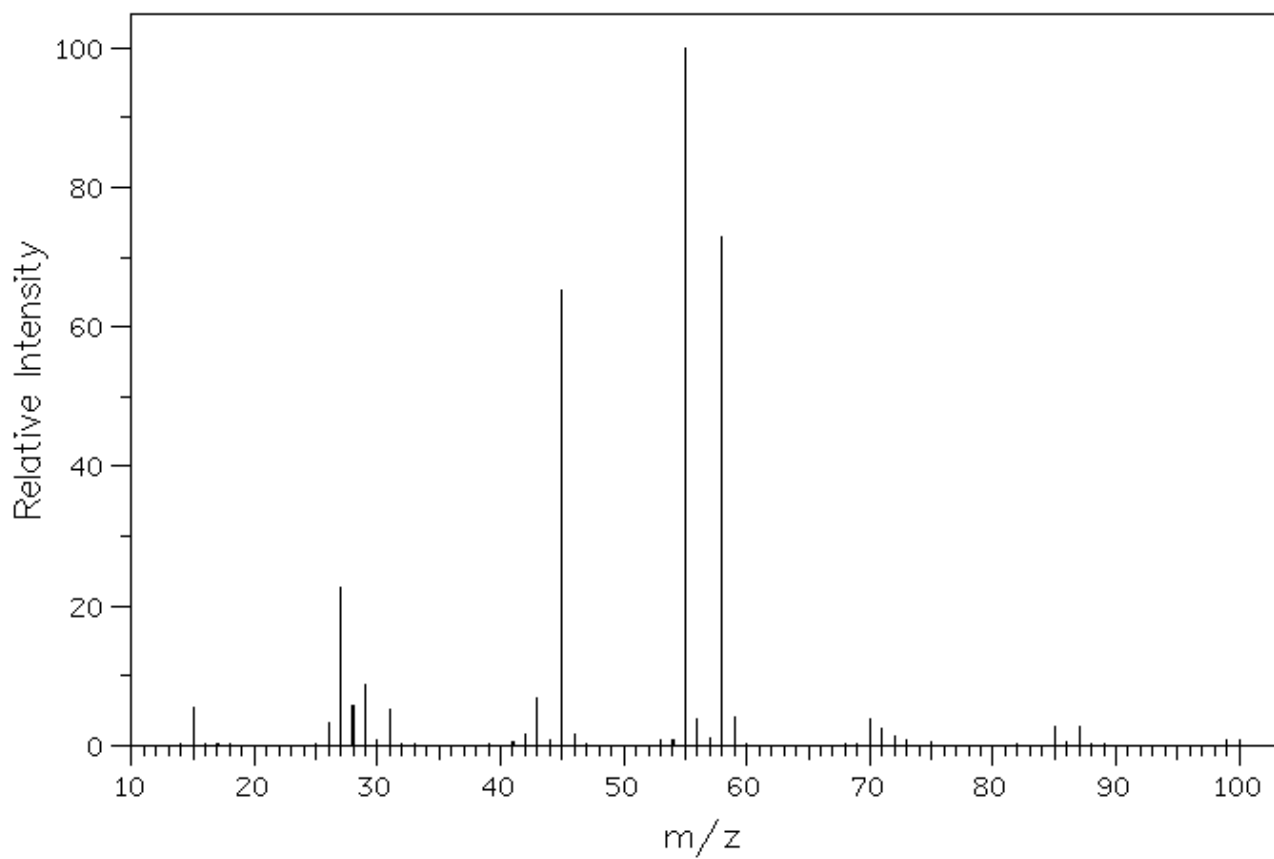


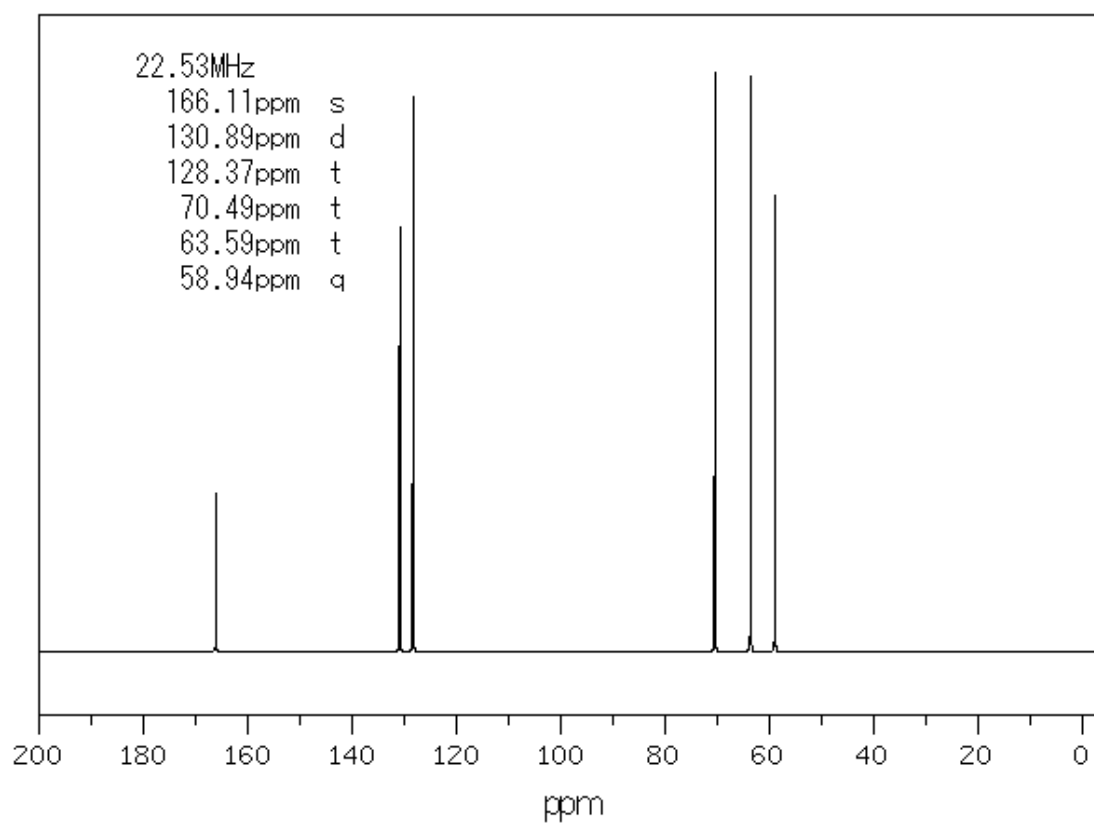
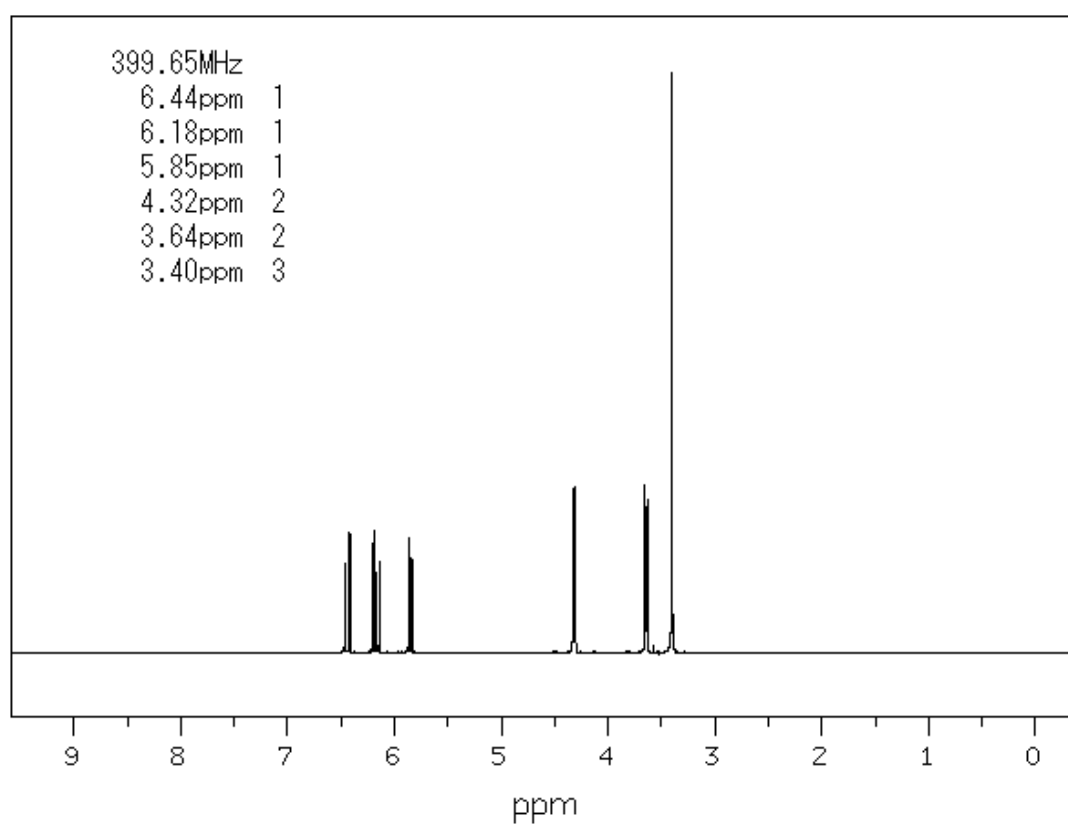
[問24] 化合物 $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_3$ の構造を決めよ。





[問25] 化合物 $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_3$ の構造を決めよ。





[10] 参考図書

- (1) E. プレシユ 他 (中西 香爾 他) 「有機化合物スペクトルデータ集」
講談社サイエンティフィック, 1982
- (2) R. J. Abraham, P. Loftus (竹内 敬人) 「 ^1H および ^{13}C NMR 概説」
化学同人, 1981

