

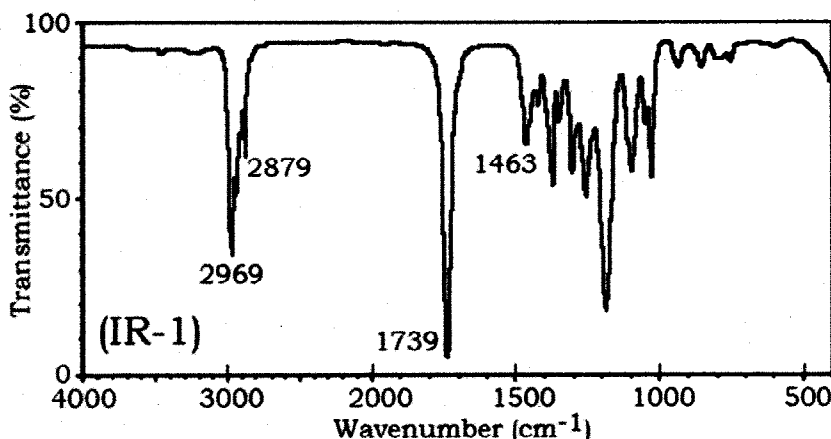
(問 8) この問題では下記 3 種の化合物のスペクトルについて考える。

化合物 A: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

化合物 B: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CO})\text{OCH}_2\text{CH}_3$

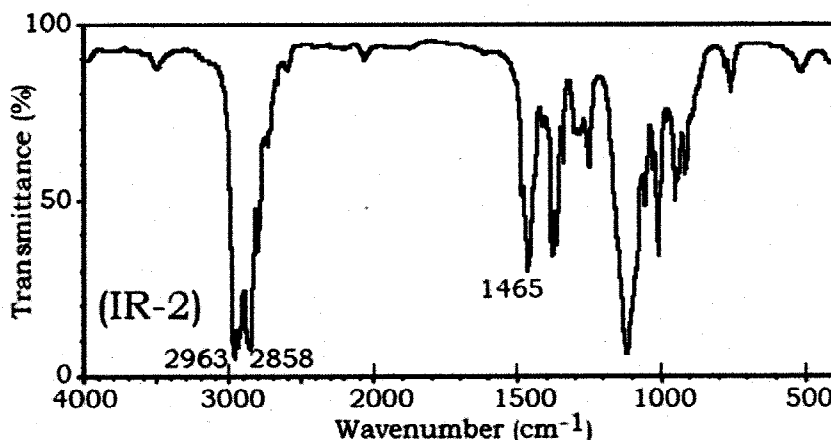
化合物 C: $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}(\text{CO})\text{OCH}_2\text{CH}_3$

(IR-1), (IR-2), (IR-3)にこれらの化合物の IR スペクトルを順不同で示した。総て液膜法による測定結果であり、 1400 cm^{-1} 以上の吸収帯の主な吸収極大波数が図中に書込まれている。



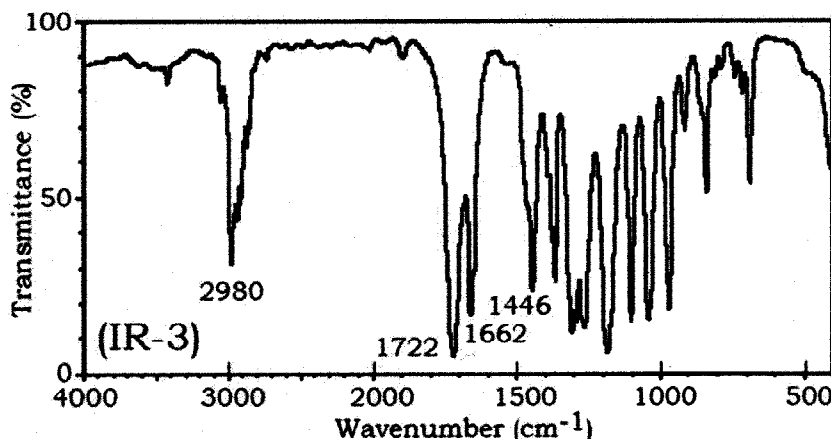
(問 8a) 各 IR スペクトルが、化合物 A - C の何れに対応するかを、その帰属を行った理由を添えて回答せよ。

(MNR-1)-(NMR-3)としてこれらの化合物の NMR スペクトルを順不同で示した。各スペクトルの下の部分に記された数字は、上段が照射電磁波の周波数(Hz 単位)、下段が化学シフト(ppm 単位)である。いずれも基準物質の共鳴位置からの差として記されている。



(問 8b) これらのスペクトルを得た NMR 分光計の基本周波数を単位をつけて答よ。

(問 8c) 次頁のスペクトル、(NMR-1), (NMR-2), (NMR-3)それぞれが化合物 A - C の何れに対応するかを回答せよ。

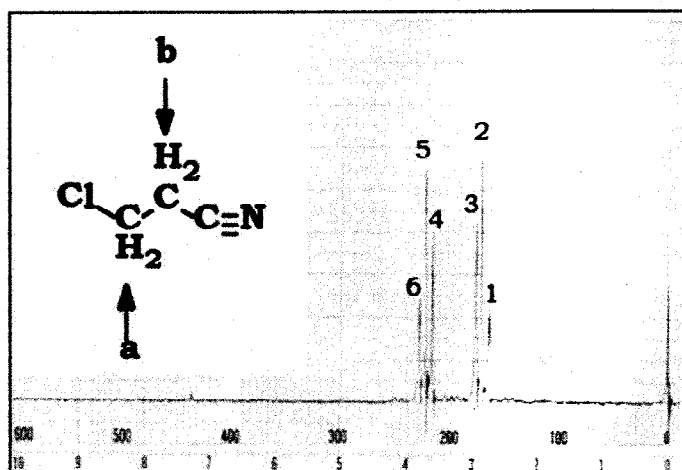


右図下に $\text{Cl}-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{CN}$ の NMR スペクトルを示した。信号 1-6 は本化合物中で a, b に分類された水素核に基づく吸収線であり、以下の様に説明される。

信号 1-3: 水素 b の吸収線。隣接炭素上の水素 a とのスピンスピン結合により 3 重線として現れている。

信号 4-6: 水素 a の吸収線。隣接炭素上の水素 b とのスピンスピン結合により 3 重線として現れている。

(問 8d) (NMR-1)について $\text{Cl}-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{CN}$ の例にならい、信号 1-18 を分類し各グループの起源と形状について説明せよ。この時、問題の化合物中の水素核は、下記の通りにグループ分けして表記する事(該当する化合物について a, b, ...の記号を用いて水素核を指定して回答せよ)。



(問 8d: 続き) この時、隣接炭素上にある水素核同士の結合定数は、総て等しいものとして解析せよ(実際には、この仮定は正しくはありませんが、今回与えたスペクトルの分解能の範囲内で吸収線の形状を理解する上では有用な仮定です)。

また、解答用紙中には"スピンスピン結合"を"結合"と略記して良い。

