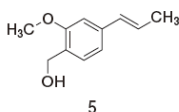
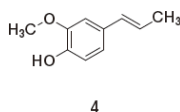
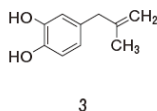
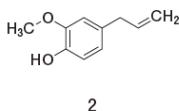
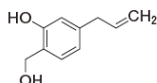
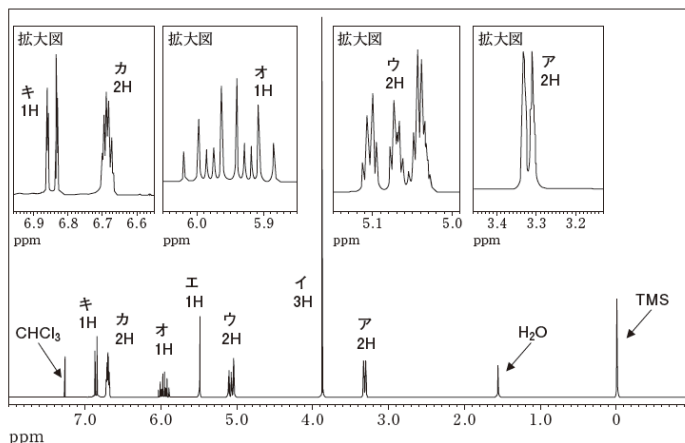


103-107

問題文

図は、ある化合物の ^1H -NMRスペクトル(300MHz、 CDCl_3 、基準物質はテトラメチルシラン(TMS))である。この化合物の構造式はどれか。1つ選べ。なお、イのシグナルは一重線であり、エのシグナルはヒドロキシ基のプロトンに由来する。



解答

2

解説

NMR スペクトルの問題はどこからアプローチしてもよいのですが、わかりやすいのはイの 3H です。

選択肢を見ると、1 には $-\text{CH}_3$ がいないので不適、4 と 5 は $-\text{CH}_3$ が 2 つあるのでこれらも不適です。

2 と 3 は $-\text{CH}_3$ が 1 つで、かつ、隣接炭素には水素が付いていないのでイのシグナルがシングレットであることに矛盾しません。よって、答えは 2 か 3 なので、これらで違うところに注目します。

2 と 3 では上記で注目した $-\text{CH}_3$ の場所が異なり、2 ではエーテルの隣、3 ではアリル位（アルケンの二重結合の 1 つ隣）です。

エーテルのシグナルは 3 ~ 4 ppm、アリル位のシグナルは 1.5 ~ 2 ppm くらいに出るはずですが、イのシ

グナルは 3.9 ppmなので、これはエーテルの隣が正しいと判断できます。

以上から、正解は 2 となります。一応、2 で正しいかをほかのシグナルから確認しておきます。

芳香環に直接付いている水素のシグナルは 6 ～ 9 ppmくらいに見られるので、カ と キ の計 3H 分がこれに当たります。

アルケンに付いている水素のシグナルは 4.5 ～ 6 ppm くらいに見られるので、ウ の2H がアルケンの末端側、オ の 1H がアルケンの他方側に対応します。エ のシグナルは問題文に記載された通りヒドロキシル基で、残る ア のシグナルがメチレン基の 2H ということになります。