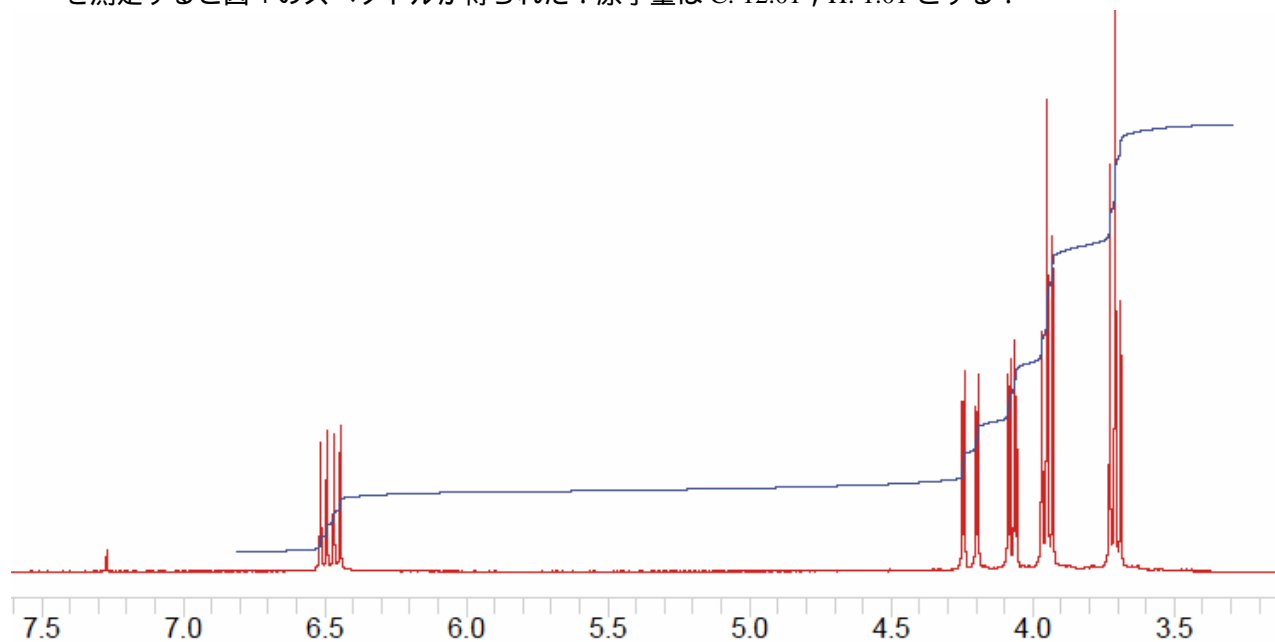


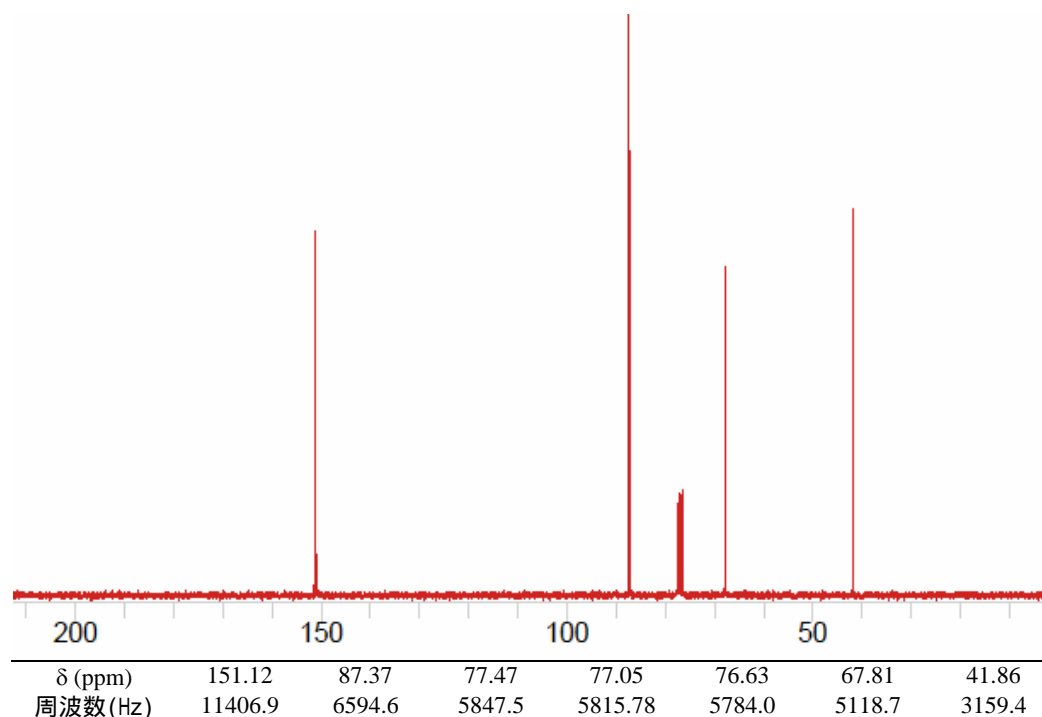
## 2011 年度有機機器分析（伊藤正人）試験問題

問 1 A 君は液体化合物 1 の構造を知りたいと考えて元素分析を行ったところ C, 45.09%; H, 6.62% という結果を得た。また化合物 1 は  $\text{CDCl}_3$  (99 atom%D) に溶解したのでその溶液の  $^1\text{H}$  NMR と  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR を測定するとそれぞれ図 1 と図 2 のスペクトルが得られた。図 1 に青色で示したのは積分曲線であり、ピークの化学シフトは付表に示されている。さらに化合物 1 の EI-MS を測定すると図 3 のスペクトルが得られ、液膜法で IR を測定すると図 4 のスペクトルが得られた。原子量は C: 12.01, H: 1.01 とする。



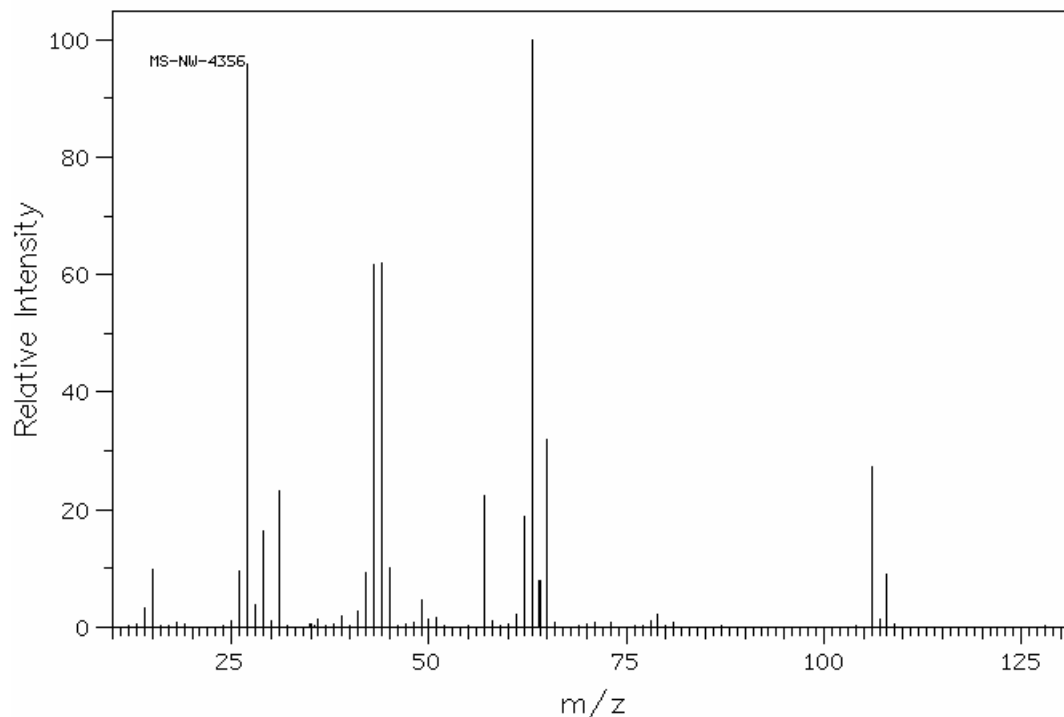
$\delta$ (ppm)	6.52	6.49	6.47	6.44	4.25	4.24	4.20	4.19	4.09
周波数(Hz)	1955.43	1948.83	1941.09	1934.49	1274.82	1272.62	1260.48	1258.28	1226.64
$\delta$ (ppm)	4.08	4.07	4.06	3.97	3.95	3.93	3.73	3.71	3.69
周波数(Hz)	1224.44	1220.04	1217.84	1191.20	1185.50	1179.80	1118.90	1113.20	1107.50

図 1



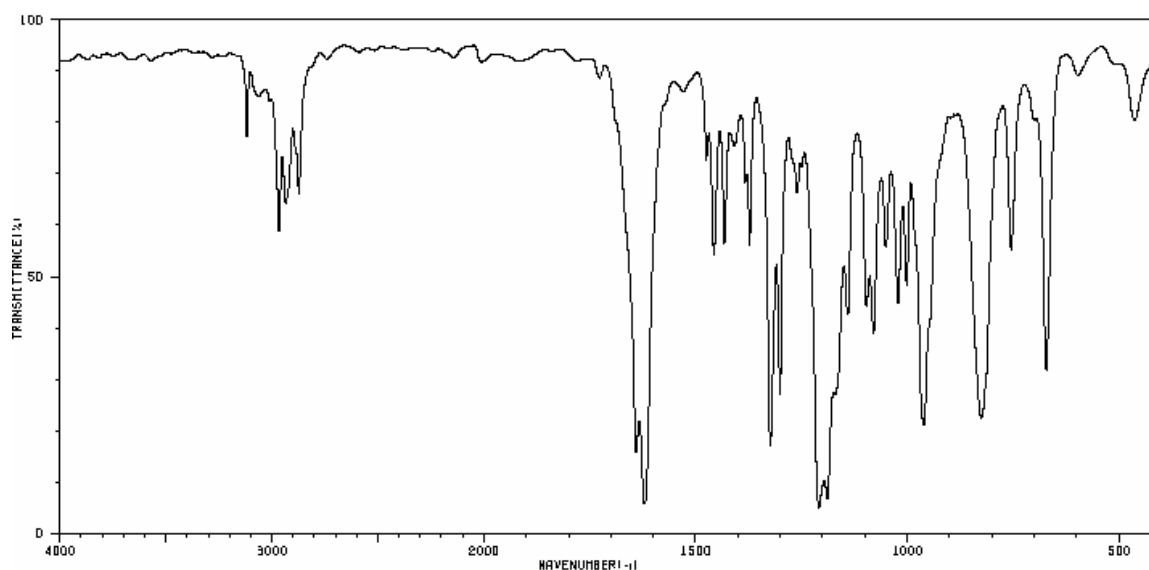
$\delta$ (ppm)	151.12	87.37	77.47	77.05	76.63	67.81	41.86
周波数(Hz)	11406.9	6594.6	5847.5	5815.78	5784.0	5118.7	3159.4

図 2



m/z	14	15	26	27	28	29	31	39	41	42	43	44
相对強度 (%)	3.2	9.9	9.4	95.8	3.8	16.4	23.1	2.0	2.6	9.2	61.8	61.9
m/z	45	49	57	61	62	63	64	65	79	106	108	
相对強度 (%)	10.2	4.5	22.3	2.1	18.7	100	7.9	32.0	2.2	27.3	8.9	

図 3



3119	74	1621	6	1373	63	1097	42	765	63
3058	81	1529	81	1324	16	1080	37	672	30
2967	57	1475	70	1301	26	1051	59	597	66
2934	62	1466	62	1261	64	1022	49	464	77
2872	64	1432	53	1209	4	1002	46		
1727	84	1409	72	1189	6	961	20		
1640	15	1383	66	1142	41	826	21		

図 4

- (1) 化合物 1 を構成する C と H 以外の元素について推定し、その理由を記しなさい。
- (2) 化合物 1 の推定構造を記しなさい。
- (3) 図 1 のスペクトルから読み取れる全てのカップリング定数を記すとともに、それらが (2) に記載した構造のどの核間に起因すると推定されるかを説明しなさい。
- (4) 化合物 1 の  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  オフレゾナンスデカップリングスペクトルの概略を図示し図 2 と違いについて説明せよ。
- (5) 化合物 1 のどの部分構造が、図 3 の  $m/z = 63, 65$  のフラグメントイオンを与えるか、説明しなさい。
- (6) 化合物 1 のどの部分構造が、図 4 の  $1600\sim 1700\text{ cm}^{-1}$  に吸収を与えるか、説明しなさい。