

¹H-NMRの等価性、積分比

☆ 前回のおさらい

化学シフトδ

$$\delta / \text{ppm} = \frac{\text{Si(CH}_3)_4 \text{のピークからの差 (Hz)}}{\text{分光計の振動数 (MHz)}}$$

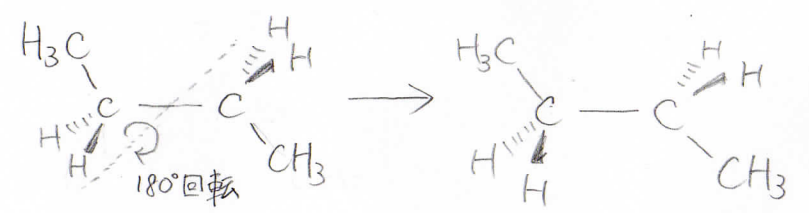
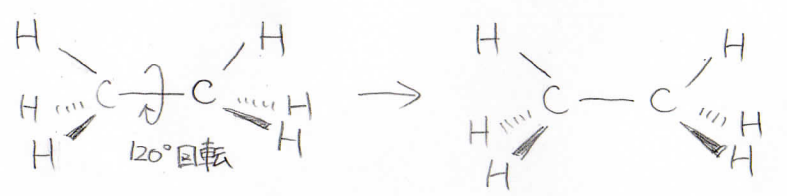
δ = 1~2 ppm → アルキル基の水素

δ = 3~4 ppm → ハロアルカン、アルコール、エーテルのα水素

☆ 化学的な等価性

化学的に等価な水素は同じ化学シフト値をもつ

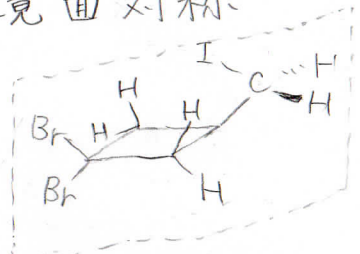
・ 回転対称



$\frac{360^\circ}{3}$ 回転したら元の形と一致 → 3回対称

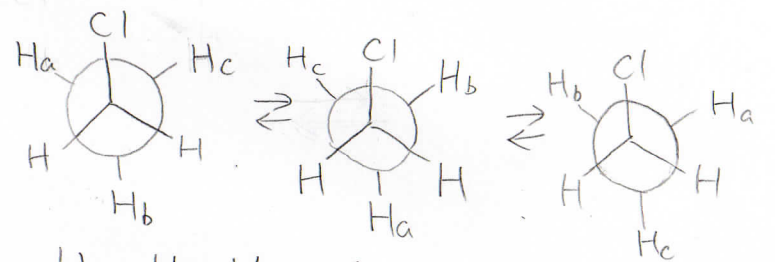
$\frac{360^\circ}{2}$ 回転したら元の形と一致 → 2回対称

・ 鏡面対称



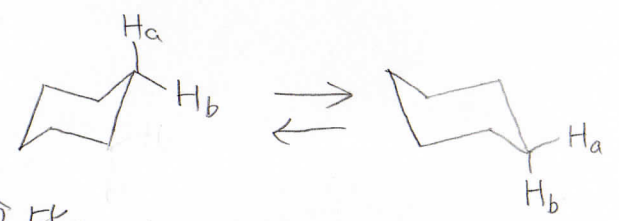
・ 立体配座の相互交換による平均化

クロロエタン



Ha, Hb, Hc の化学シフトは平均化される

シクロヘキサン



☆ 積分比

¹H-NMRでのピーク強度は水素原子の相対的な個数を反映する

