

## 分析事例の紹介

# 核磁気共鳴装置および赤外分光光度計を用いた 有機混合液体の分析

### キーワード

- ✓ 核磁気共鳴, NMR
- ✓ 赤外分光, IR
- ✓ 有機混合物

### 装置 JNM-ECX400, JEOL, FTIR-6000, JASCO



## はじめに

核磁気共鳴装置と赤外分光光度計を用いて、ベンゼン溶媒中のエステル化合物を定性分析した事例を紹介する。

## 実験

NMR 試料管にエステル化合物のベンゼン溶液と重クロロホルムを入れ、 $^1\text{H}$ -NMR 測定用試料とした。赤外スペクトルは、液膜法を用いて測定した。液膜法の窓剤には、KBr 板を用いた。

## 結果

### (1) $^1\text{H}$ -NMR

図 1 に  $^1\text{H}$ -NMR 測定の結果を示す。7.4, 7.3, 1.6ppm に、それぞれ溶媒であるベンゼン、重クロロホルム中のクロロホルムおよび水に由来するシングレットのピークが検出された。その他のピークは、データベース[1]との比較から酢酸イソプロピルおよび酢酸プロピルと同定した。図 2 に酢酸イソプロピルおよび酢酸プロピルの分子構造、表 1 に各化合物の NMR スペクトルにおける化学シフトとピーク分裂数を示す。観測された  $^1\text{H}$ -NMR ピークは、酢酸イソプロピルおよび酢酸プロピルに由来すると考えられる。エステル基に結合したメチル基に由来するピーク (2.0 ~ 2.1 ppm) の積分比から、酢酸イソプロピルと酢酸プロピルの含有比は、1 : 1 程度であると考えられる。

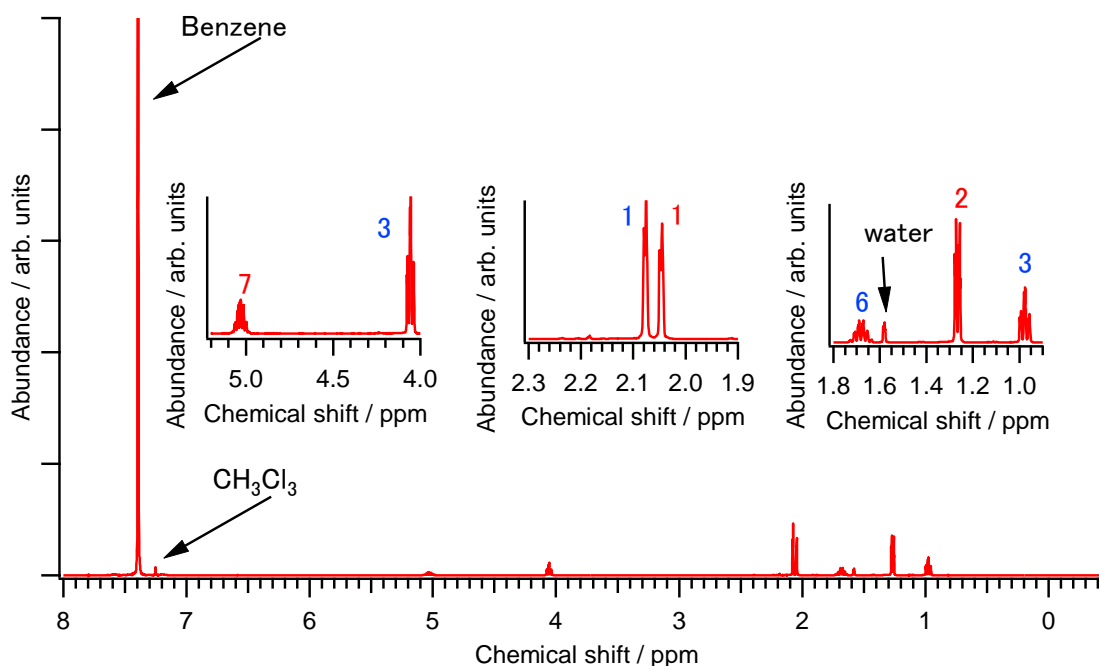


図 1  $^1\text{H-NMR}$  スペクトル。ピーク上の数字は、酢酸イソプロピル(赤)および酢酸プロピル(青)による分裂数を表す。

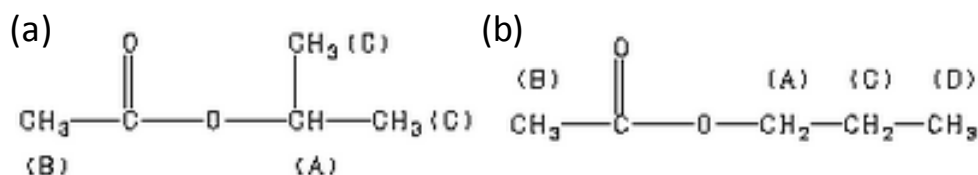


図 2 (a)酢酸イソプロピル, (b) イソプロピルアルコールおよび(c)酢酸プロピルの分子構造。

表 1 酢酸イソプロピル, イソプロピルアルコールおよび酢酸プロピルの NMR における化学シフトと分裂数。各水素核は図 2 参照。化学シフトは産業技術総合研究所が提供する有機化合物のスペクトルデータベース SDBS から抜粋した。

水素核	isopropyl acetate		propyl acetate	
	化学シフト / ppm	分裂数	化学シフト / ppm	分裂数
(A)	4.988	7	4.023	3
(B)	2.017	1	2.050	1
(C)	1.233	2	1.650	6
(D)	-	-	0.950	3

## (2) FTIR

図 3 に FTIR スペクトルを示す。3100  $\text{cm}^{-1}$  および 700  $\text{cm}^{-1}$  付近に、ベンゼンに由来した芳香族 CH 伸縮、CH 面外変角振動が観測された。また 1700  $\text{cm}^{-1}$  および 1200  $\text{cm}^{-1}$  付近には、エステル化合物に特徴的な C=O 伸縮、C-O 伸縮が観測された。観測された

FTIR スペクトルは、ベンゼン、酢酸イソプロピルおよび酢酸プロピルのピーク[1]と良く一致した。

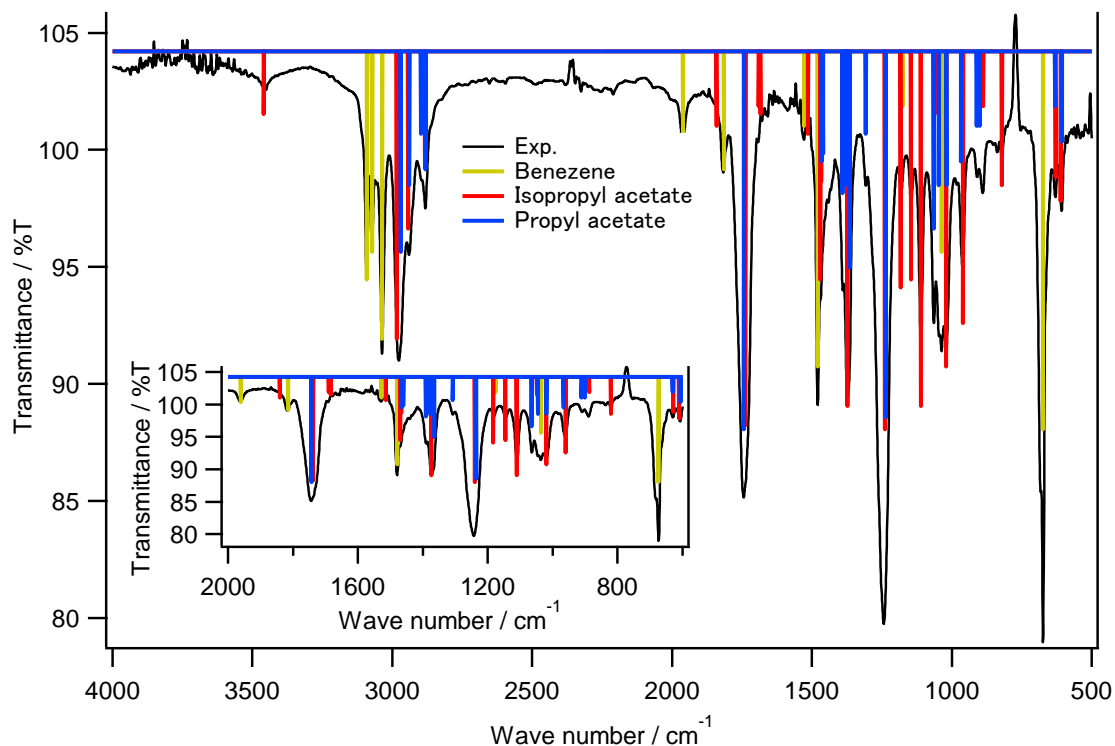


図 3 FTIR スペクトル。挿入図は、2000 ~ 600cm<sup>-1</sup>の拡大図である。ベンゼン(黄)、酢酸イソプロピル(赤)および酢酸プロピル(青)の各ピークは、参考文献[1]より抜粋した。

### まとめ

核磁気共鳴装置と赤外分光光度計を用いて、ベンゼン溶媒中のエステル化合物の分析を行った例を紹介した。NMR と FTIR を用いて複合分析することで、より確実な分析結果を得ることができる。

### 参考文献

[1] 有機化合物のスペクトルデータベース SDBS、産業技術総合研究所

**静岡理科大学 先端機器分析センター** [www.sist.ac.jp/kiki/](http://www.sist.ac.jp/kiki/)

Advanced Instrumental Analysis Center,  
Shizuoka Institute of Science and Technology



〒437-8555  
静岡県袋井市豊沢2200-2  
TEL : 0538-45-0175  
E-mail : kiki@ob.sist.ac.jp