

スペクトルデータの表し方

スペクトルには、ある程度標準的な表し方があります。適切な表記方法を身につけましょう

オルト、メタ、パラはイタリック体（斜体）で表す

化合物に番号を振る場合はボールド体（太字）で表す

色を変える必要はない

シグマ σ ではなくデルタ δ

2-[*p*-(Dimethylamino)styryl]- α,α,α -trifluorotoluene (1c): $^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): $\delta =$

ボールド体（太字）でなくてもよい（この例では化合物名を見やすくするためにボールド体にしてある）

半角1字空ける

7.76 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.62 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.49 (t, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.43 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H),

結合定数の記号 J はイタリック体（斜体）で表す

句点「.」ではなく、半角コンマ「,」を用いる

7.31–7.22 (m, 2H), 7.03 (d, $J = 16.0$ Hz, 1H), 6.72 (d, $J = 8.8$ Hz, 2H), 2.99 (s, 6 H). $^{13}\text{C NMR}$

多重線（マルチプレット）は範囲で表す。「~」は通常使わない。

半角1字または2字空ける

(75 MHz, CDCl_3): $\delta = 150.5, 137.2$ (q, $^3J_{\text{C-F}} = 2.0$ Hz), 132.7, 131.71, 131.69, 128.0, 126.8 (q, $^2J_{\text{C-F}}$

結合定数を表す記号 J には、カップリングしている原子を右下に付す場合がある。また、カップリングしている原子を隔てる結合の数を左肩に付す場合もある。

$= 29.7$ Hz), 126.4, 126.2, 125.8 (q, $^3J_{\text{C-F}} = 5.6$ Hz), 125.2, 124.6 (q, $^1J_{\text{C-F}} = 272$ Hz), 119.7 (q, $J =$

波数の記号 $\tilde{\nu}$ は通常のワープロでは出力が難しいので、上付きチルダ (~) を使って、 ν^{\sim} でもよい。

2.0 Hz), 40.3. **IR** (CHCl_3): $\nu^{\sim} = 3649, 1600, 1522, 1313, 1163, 1124, 777$ cm^{-1} . **EA**: Found. C

ν は、ブイ「v」ではなく、ギリシャ文字のニュー「 ν 」（いったん n と入力して、フォントを symbol に変更すると表示される）。

69.91%, H 5.56%, N 4.65%; Calcd. for $\text{C}_{17}\text{H}_{16}\text{F}_3\text{N}$: C 70.09%, H 5.54%, N 4.81%. Colorless

crystal.

イタリック体・ボールド体を正しく使うこと、半角スペースを正しく入れることが大切です。