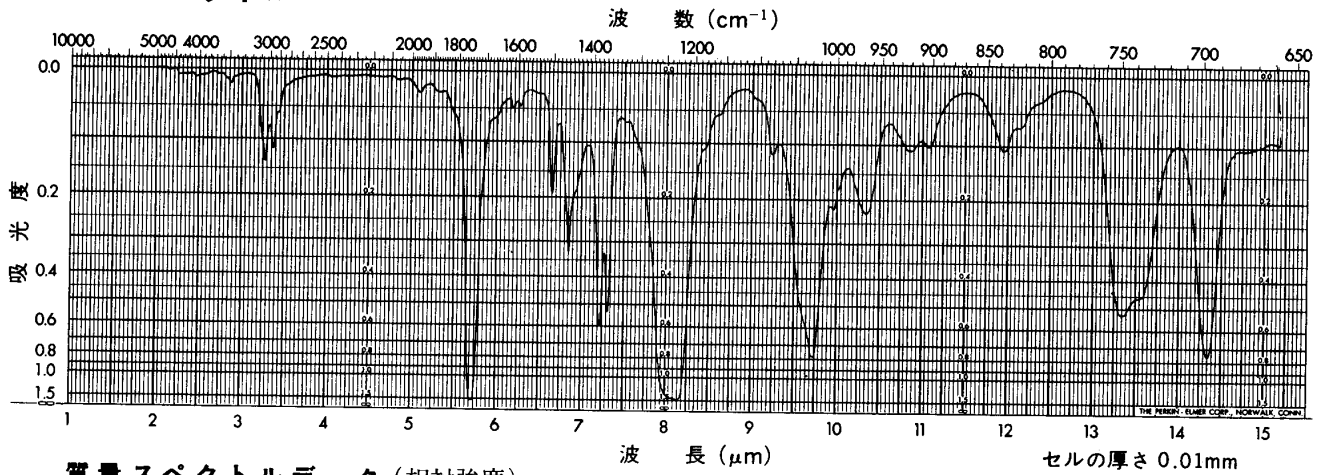
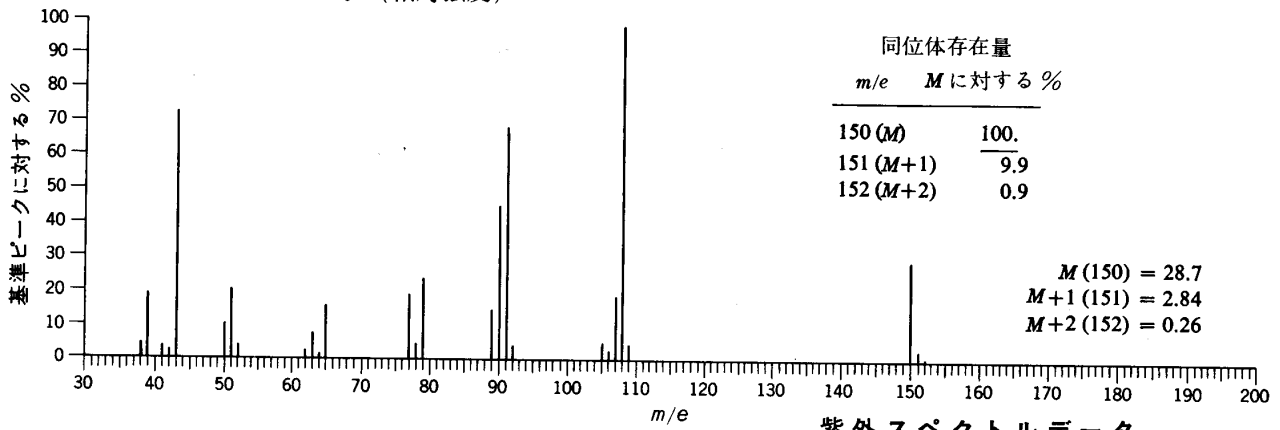


化合物 7・1  
赤外スペクトル



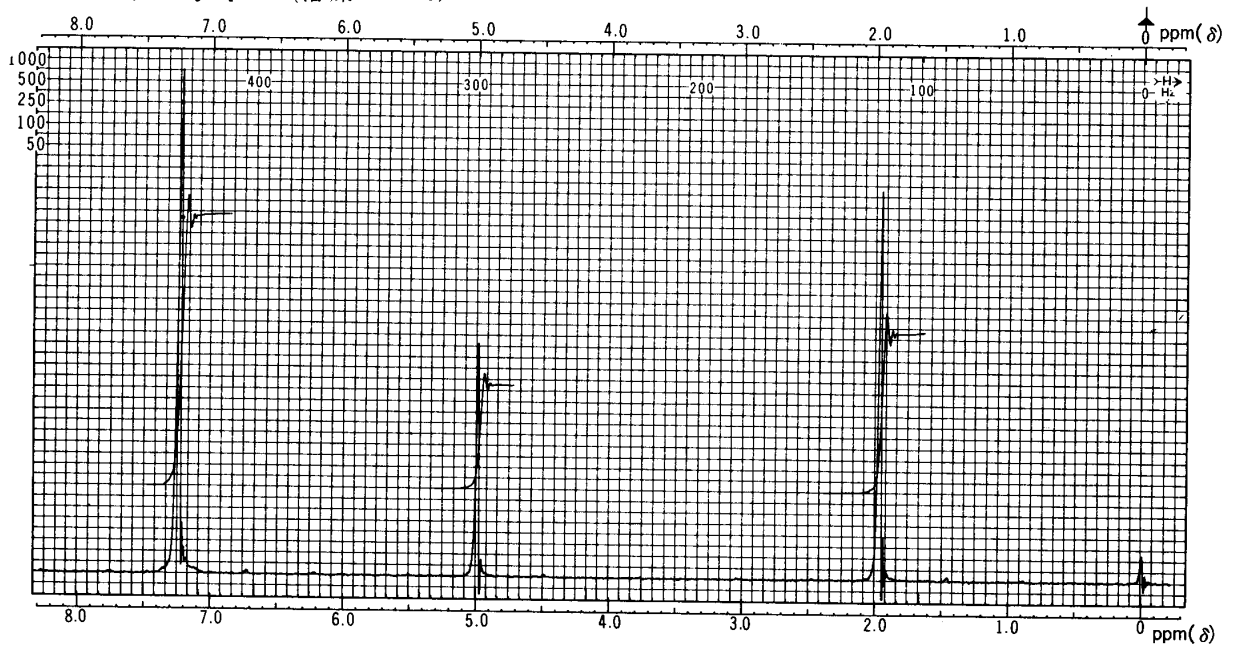
質量スペクトルデータ (相対強度)



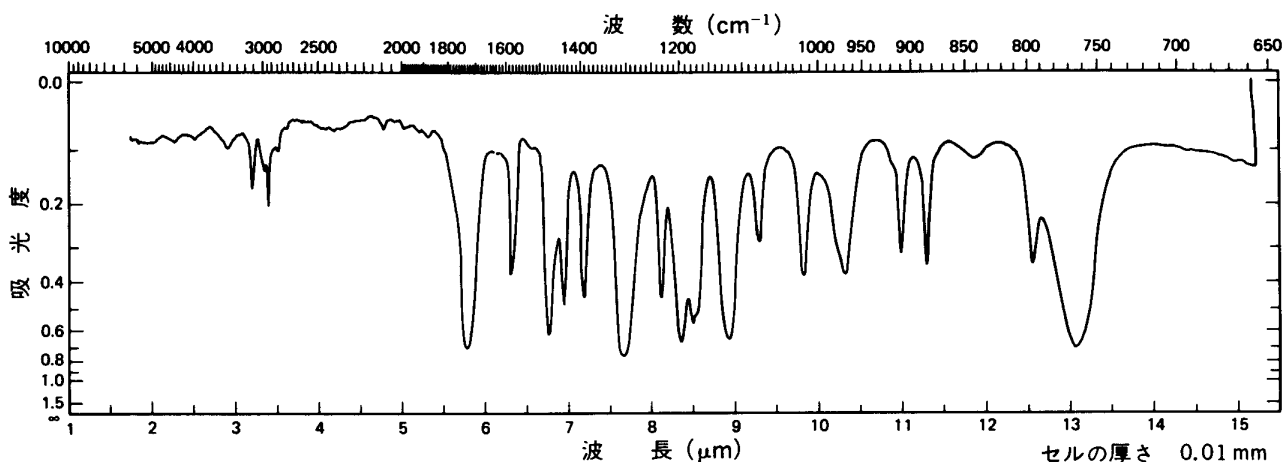
紫外スペクトルデータ

$\lambda_{\max}^{\text{EtOH}}$	$\epsilon_{\max}$		
268	101	252	153
264	158	248 (s)	109
262	147	243 (s)	78
257	194	(s) = 肩	

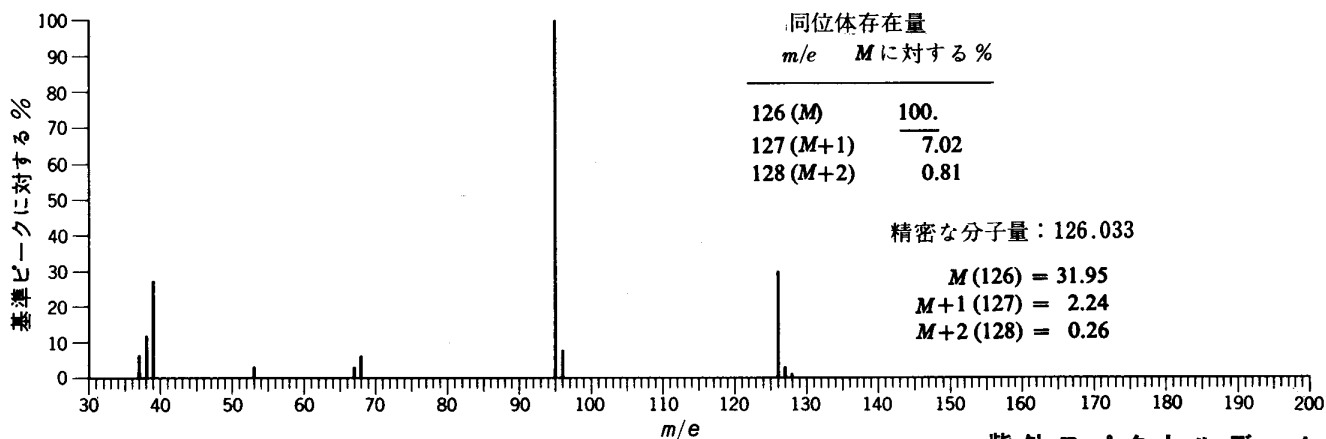
<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)



化合物 7・2  
赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

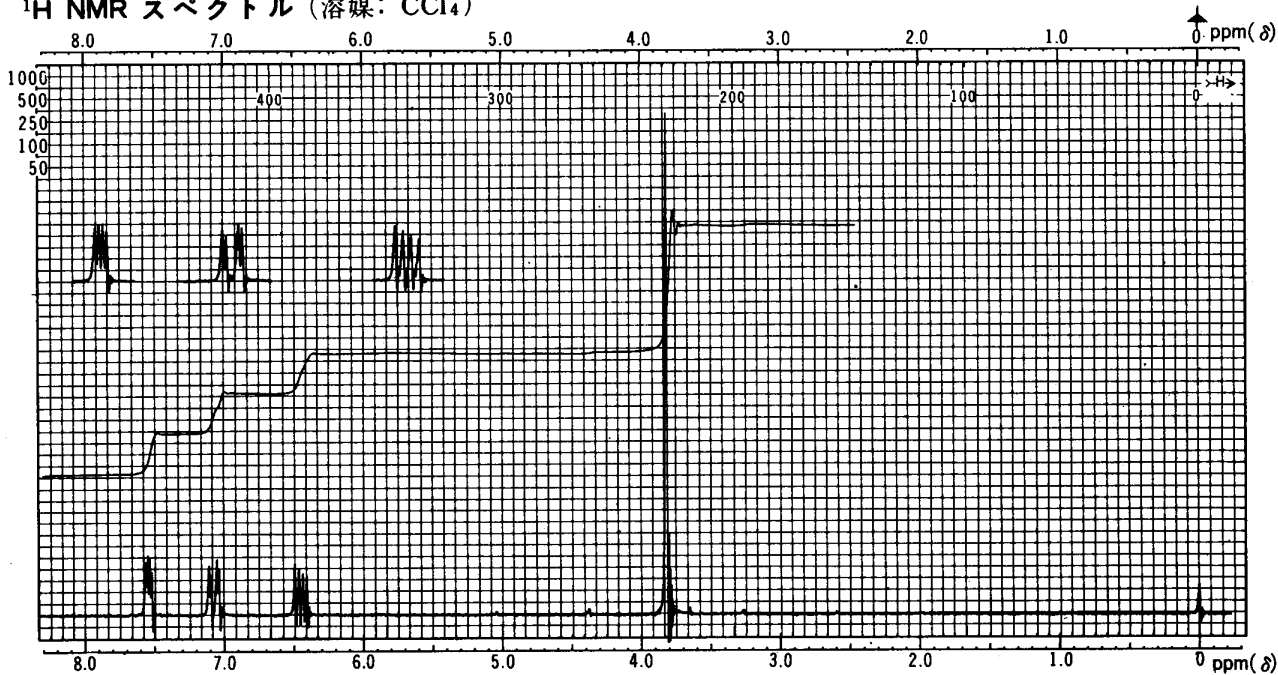


紫外スペクトルデータ

$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\log \epsilon_{\text{max}}$
220.0 (s)	3.47
250.5	4.13

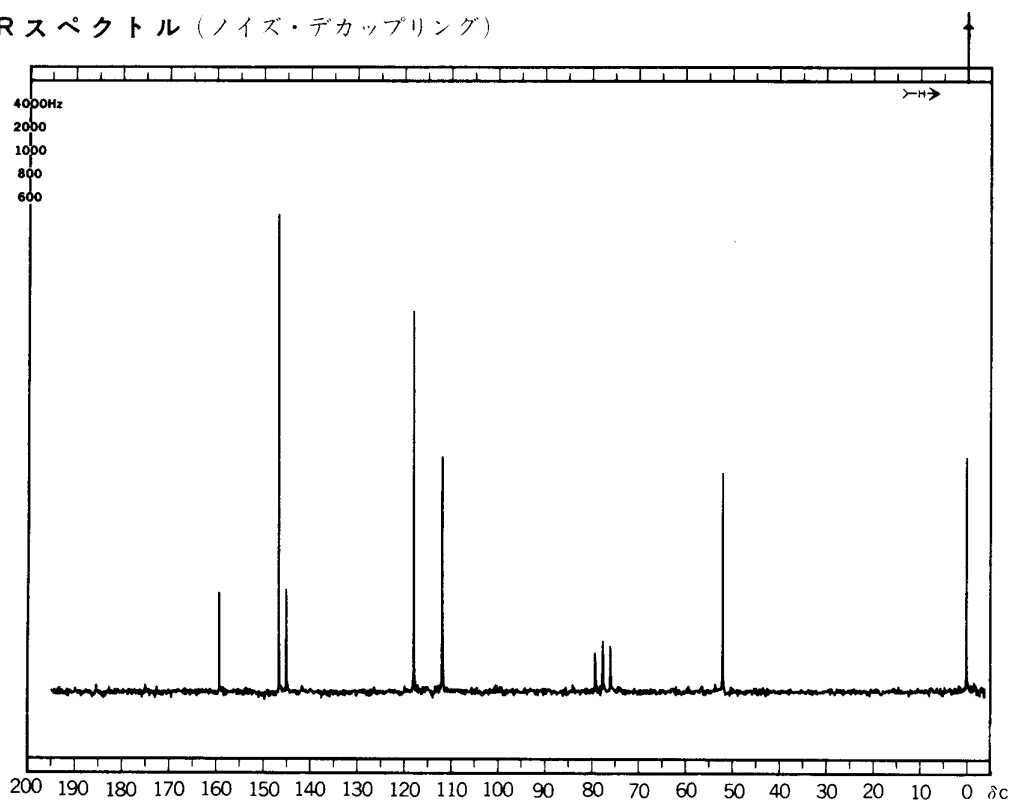
(s) = 肩

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

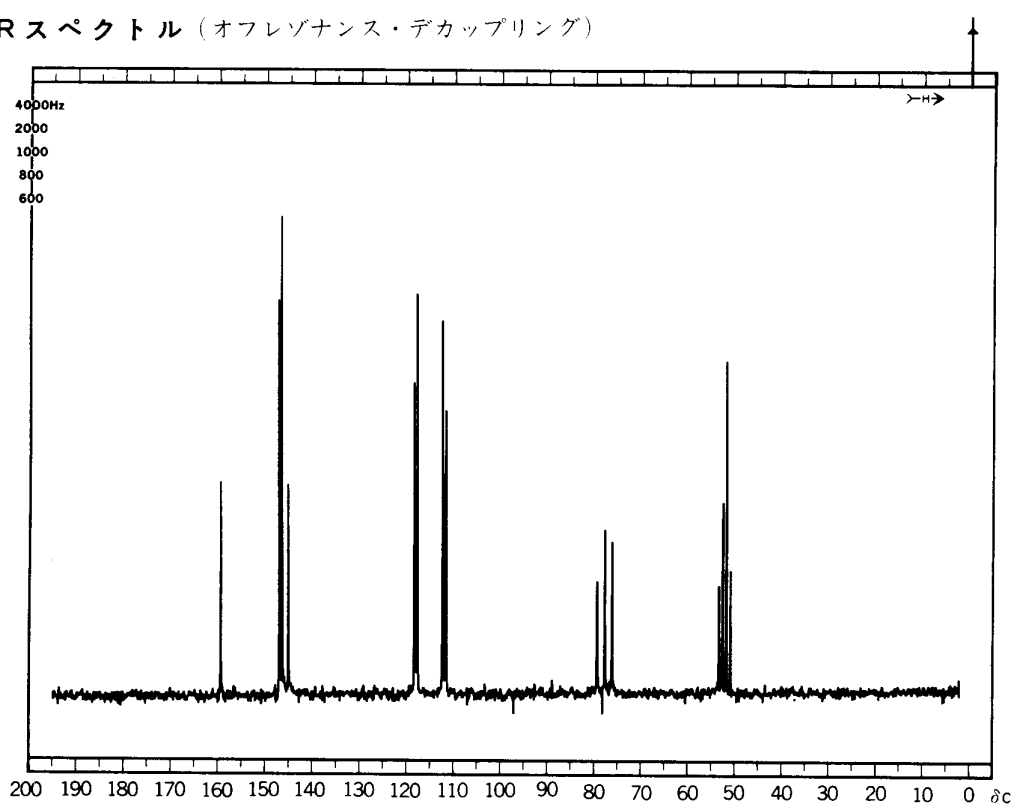


化合物 7・2 (つづき)

$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)

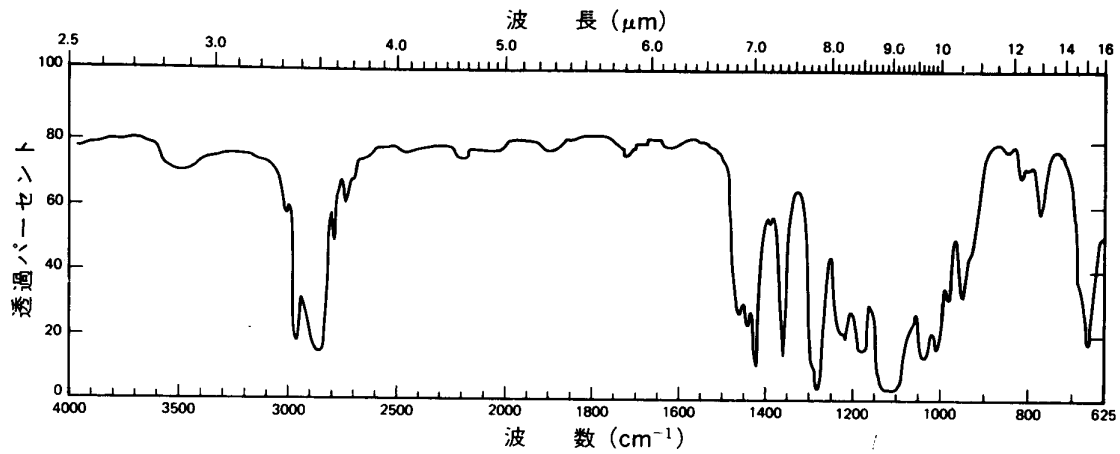


$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

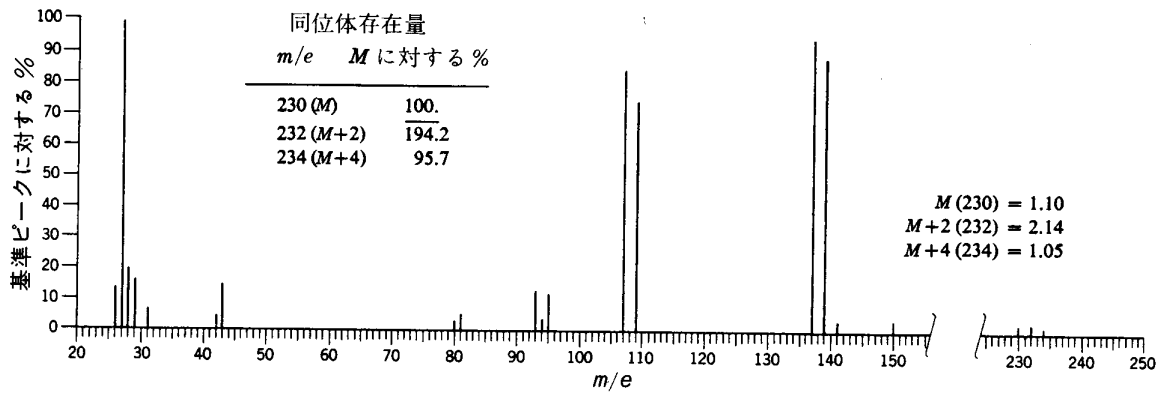


化合物 7・3

赤外スペクトル



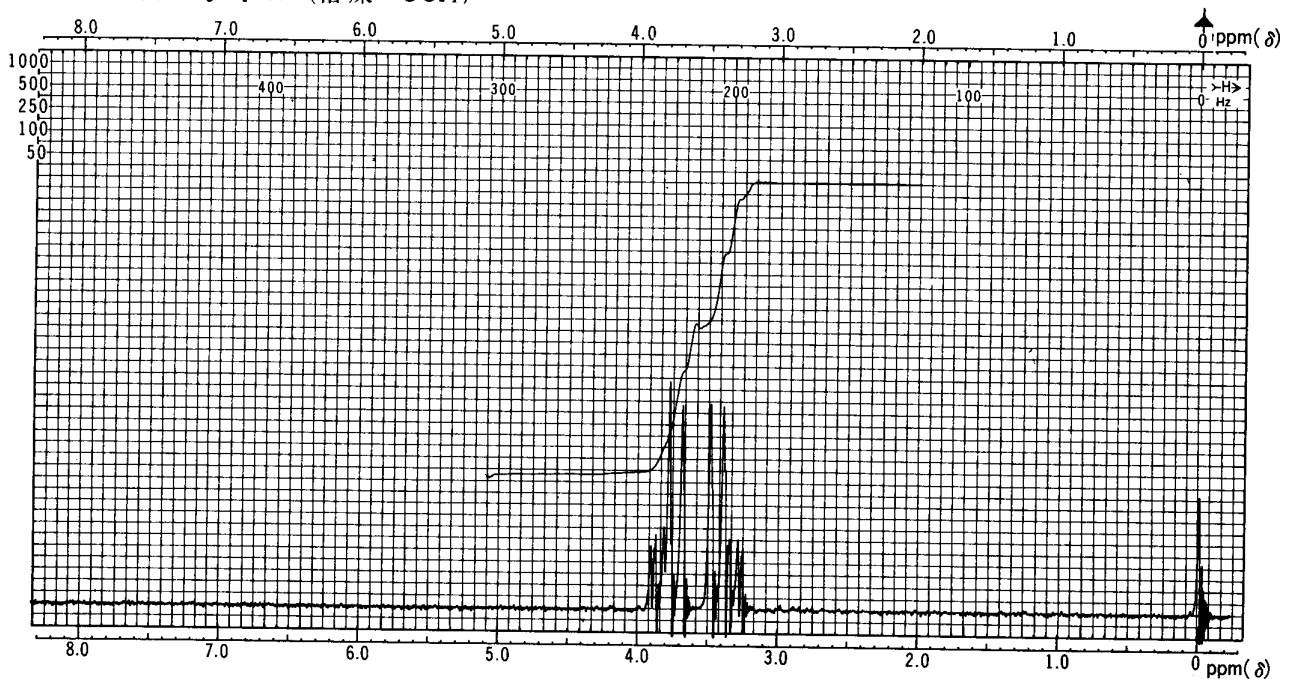
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

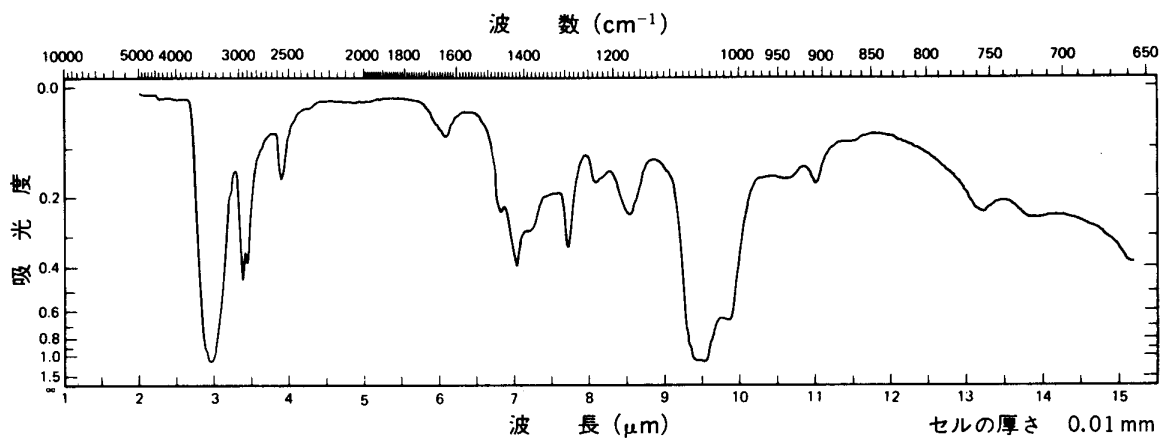
$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\epsilon_{\text{max}}$
305 (変曲点)	1.5

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

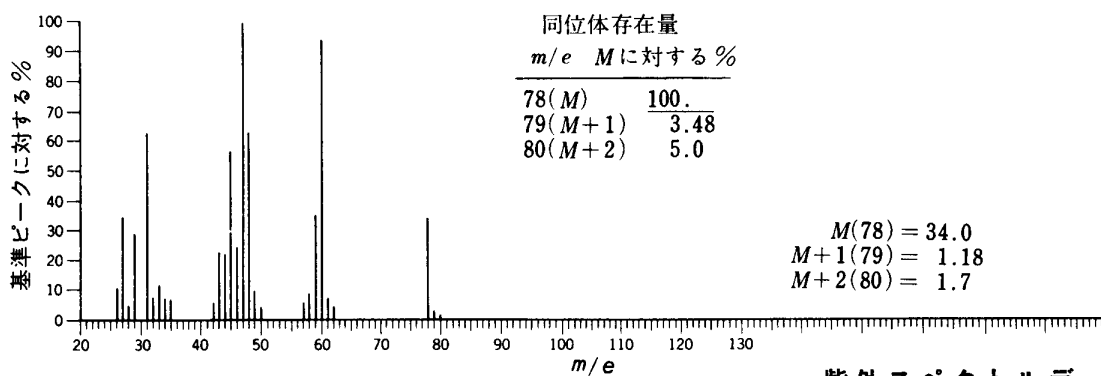


化合物 7・4

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

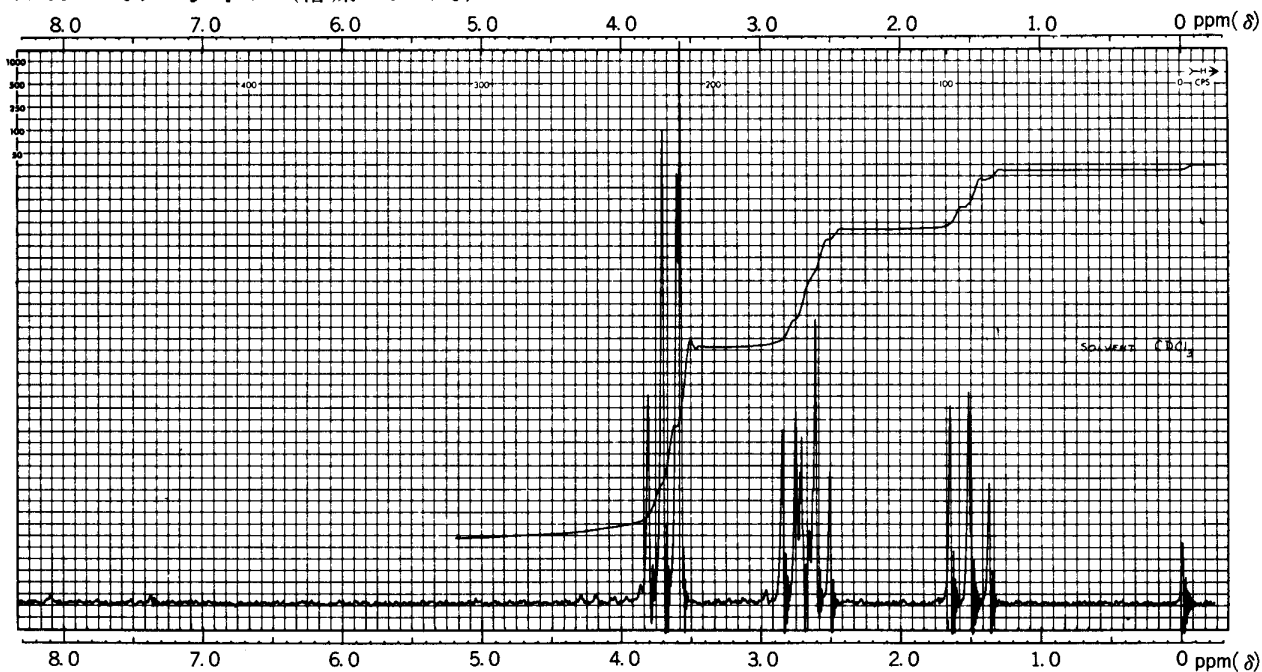


紫外スペクトルデータ

$\lambda_{inf}^{EtOH}$	$\epsilon_{inf}$
232	136

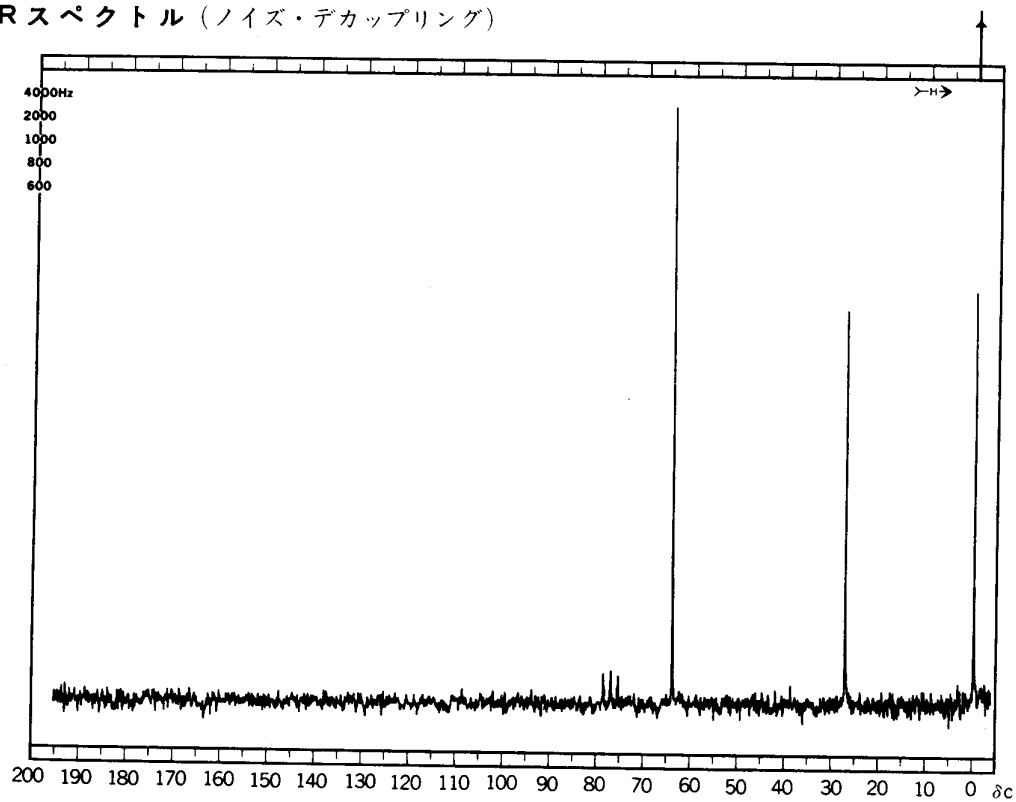
$inf$  = 変曲点

$^1H$  NMR スペクトル (溶媒:  $CDCl_3$ )

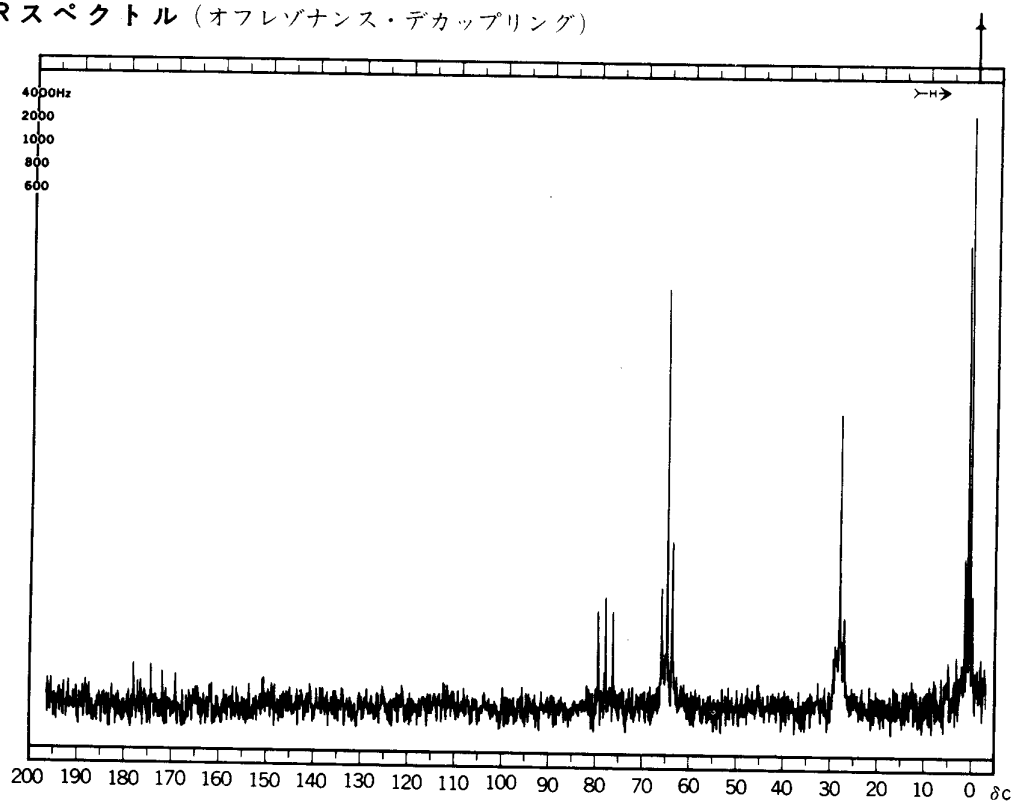


化合物 7・4 (つづき)

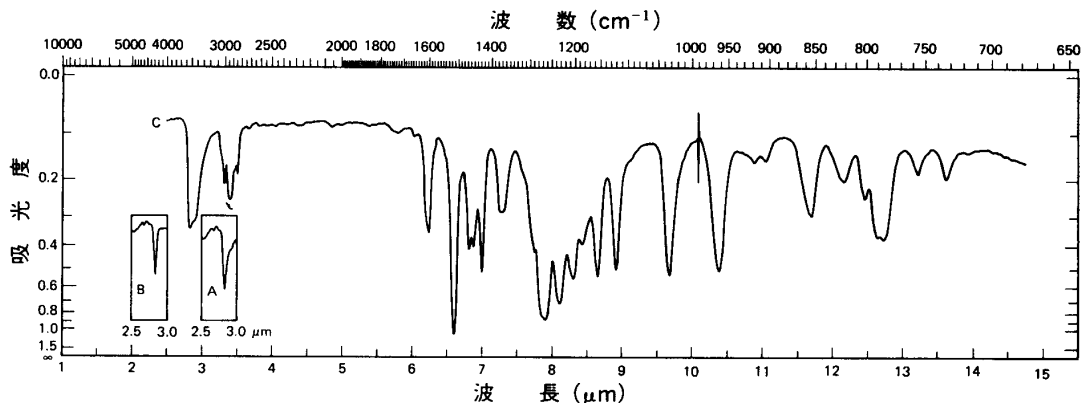
$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)



$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

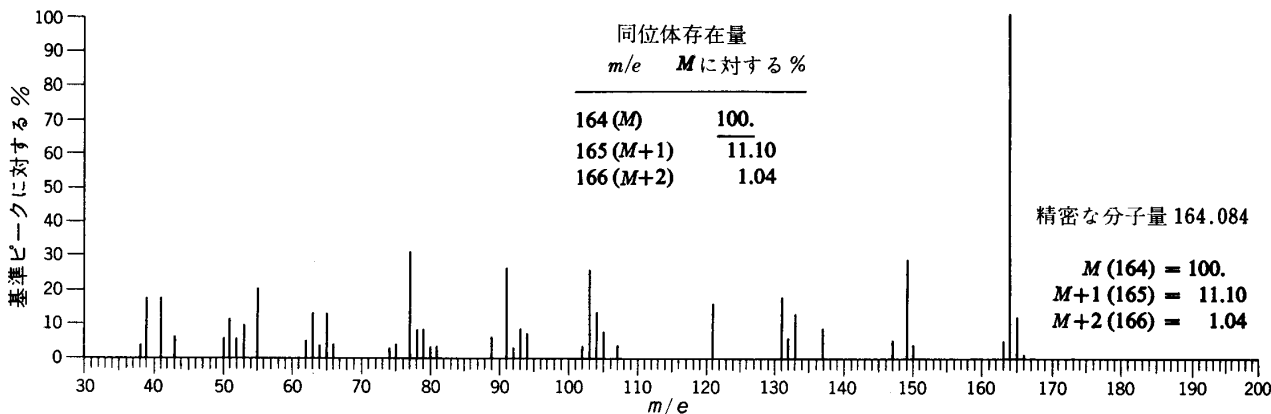


化合物 7・5  
赤外スペクトル



A : 光路長 0.406 mm (CCl<sub>4</sub> 中 0.03 M)  
B : 光路長 0.01 mm (CCl<sub>4</sub> 中 1.0 M)  
C : 薄いフィルム

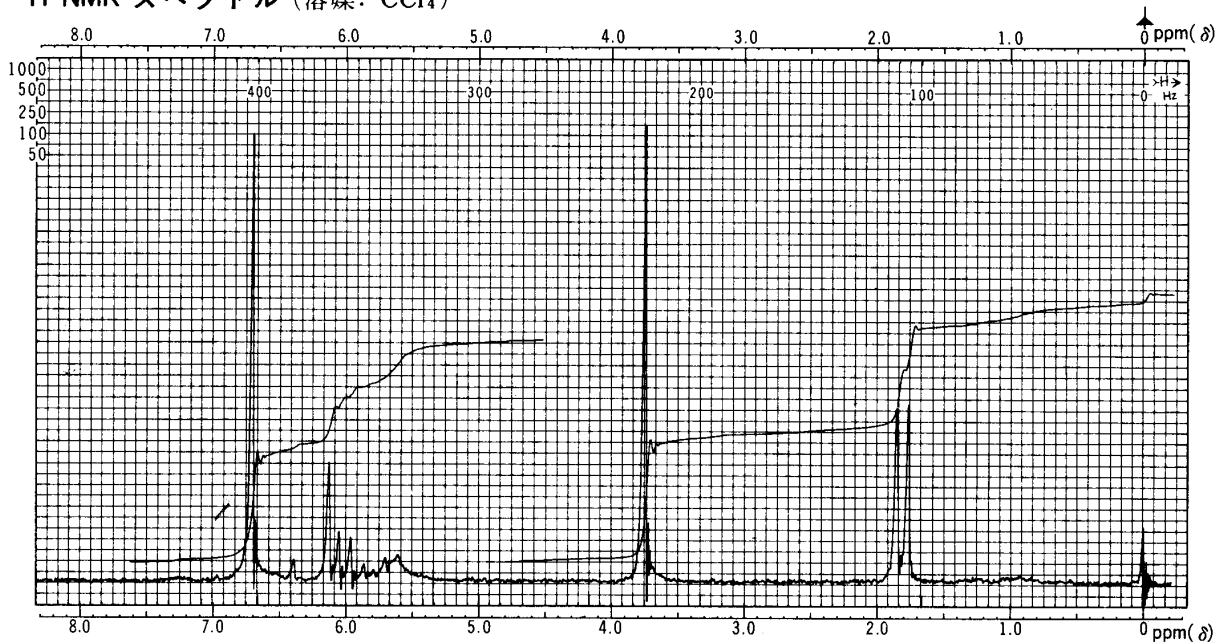
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

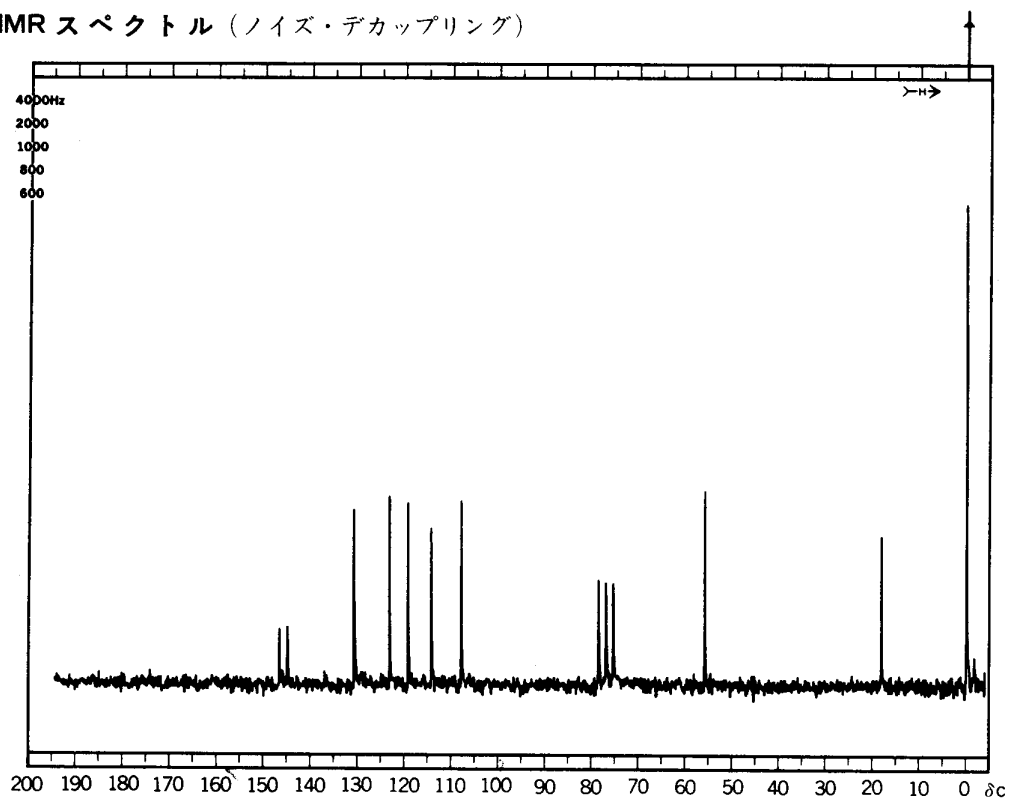
$\lambda_{\max}^{\text{EtOH}}$	$\log \epsilon_{\max}$	pH 13	
288	4.0	315 (s)	3.8
315 (s)	3.8		
pH 7	263	4.2	
	300 (s)	3.6	(s) = 肩

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

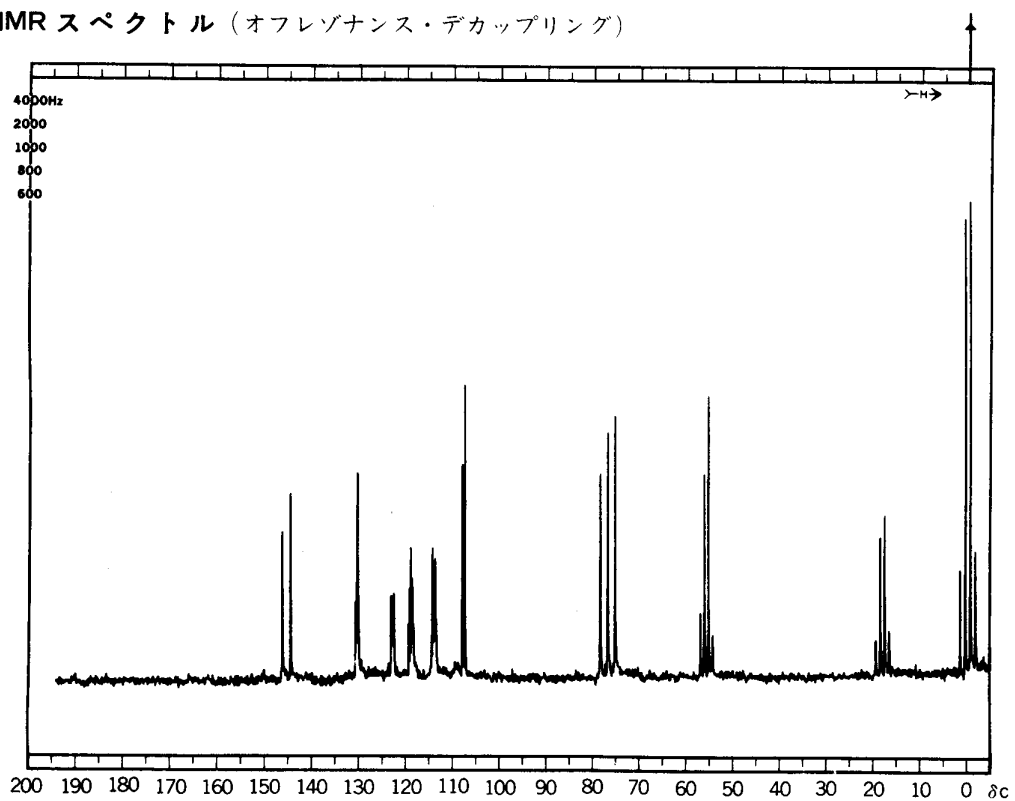


化合物 7・5 (つづき)

$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)



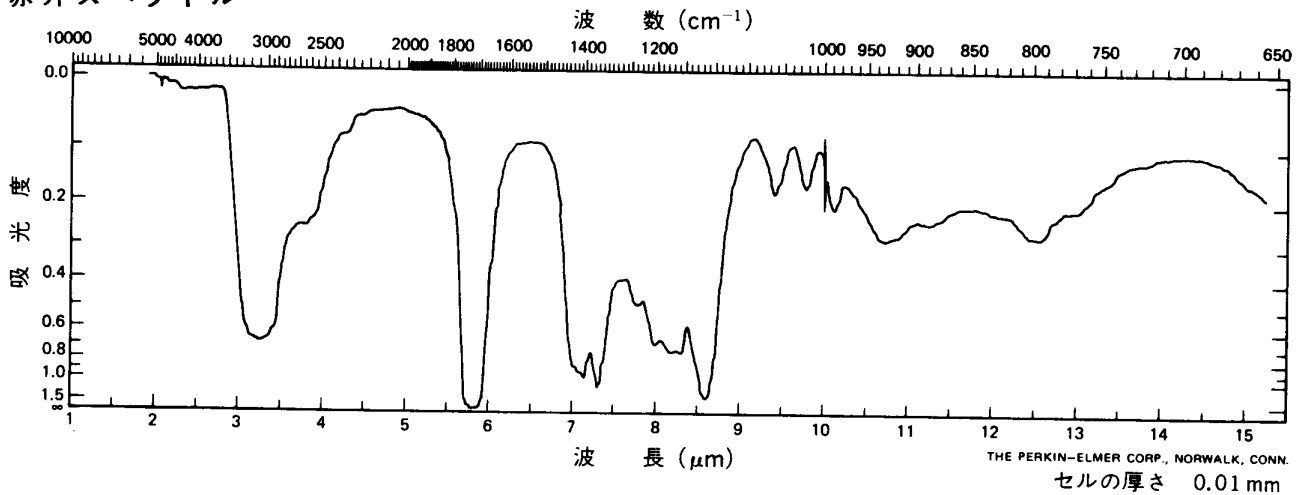
$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



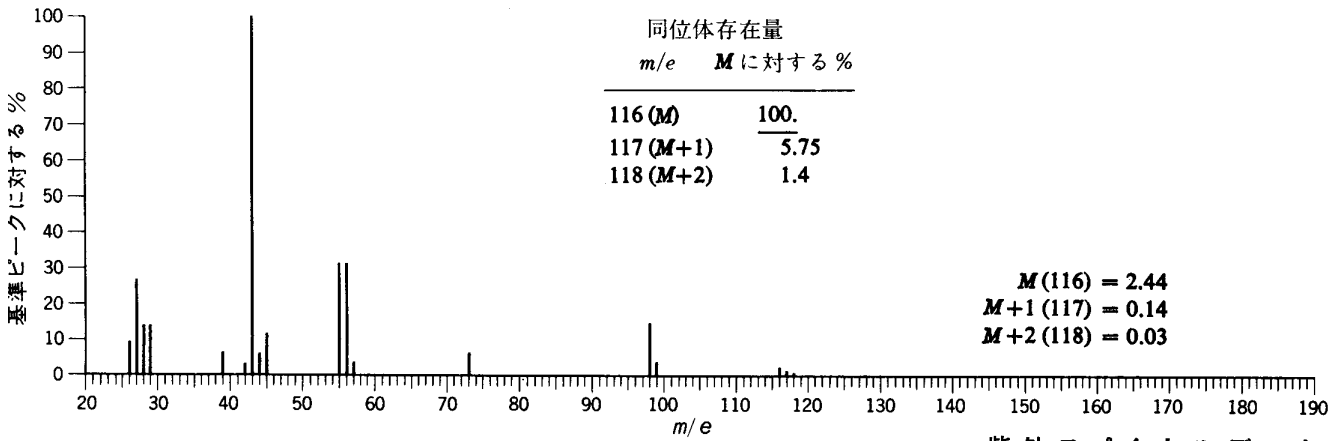


化合物 7・6

赤外スペクトル



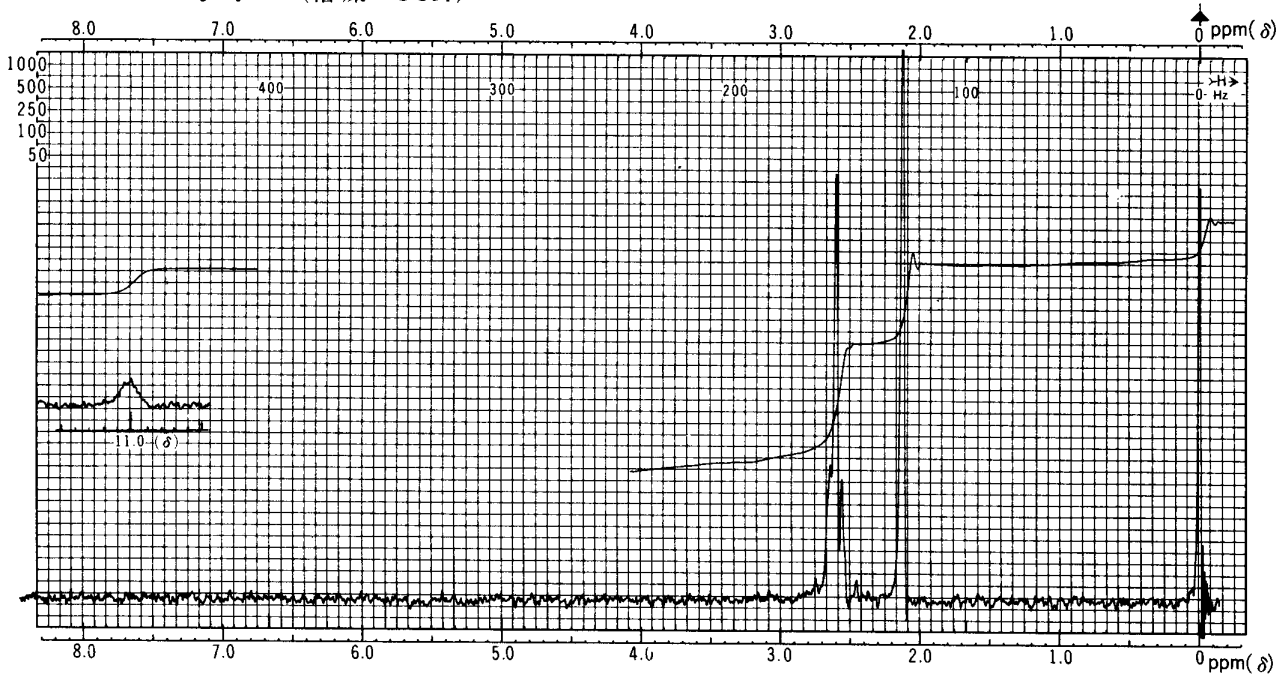
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

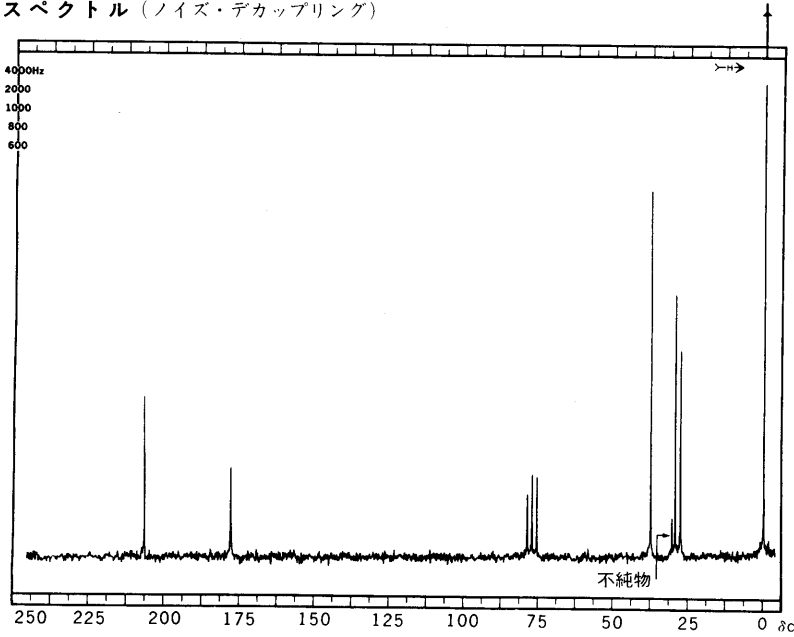
$\lambda_{\text{max}}^{\text{OH}}$	$\log \epsilon_{\text{max}}$
262	1.5

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

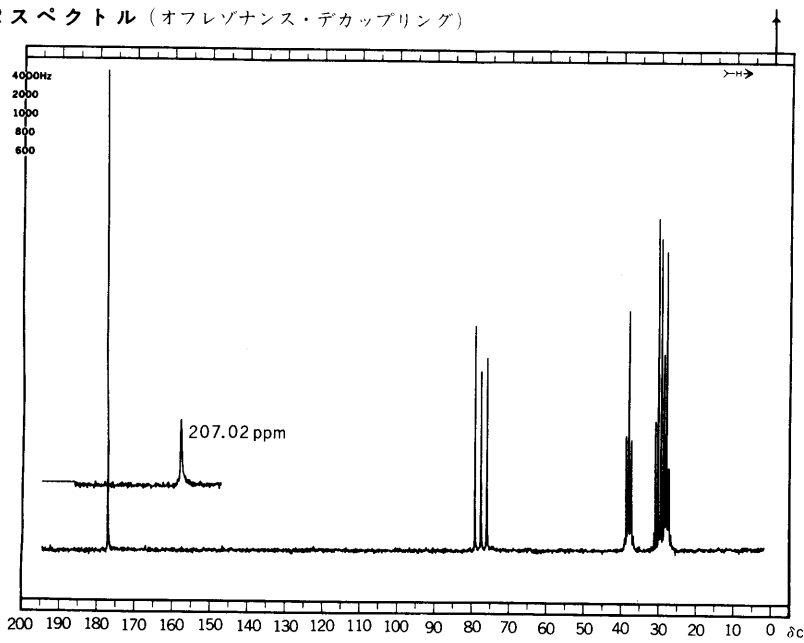


化合物 7・6 (つづき)

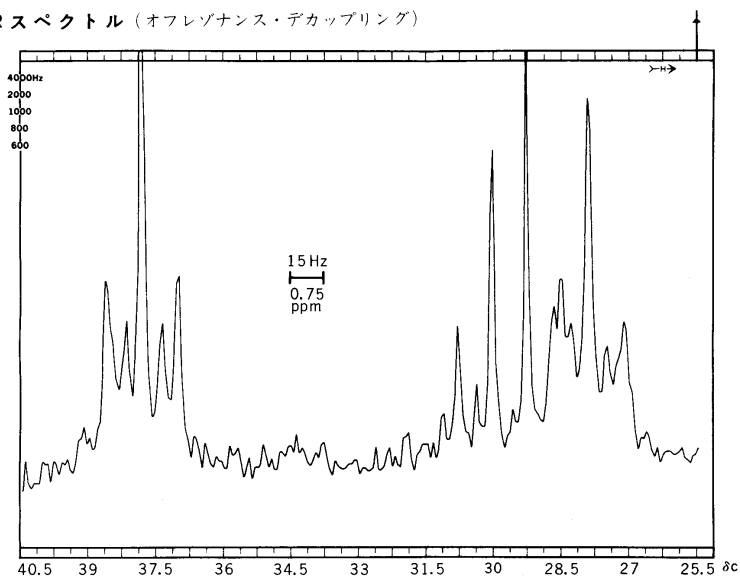
<sup>13</sup>C NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)



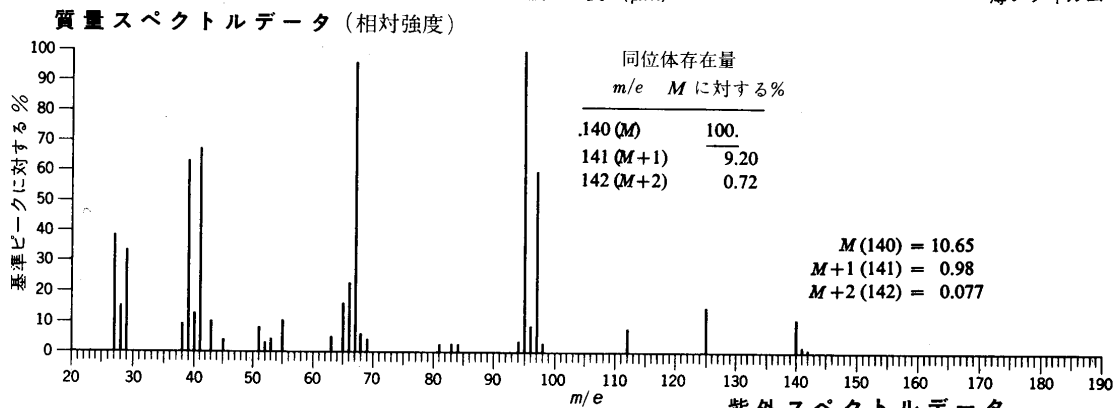
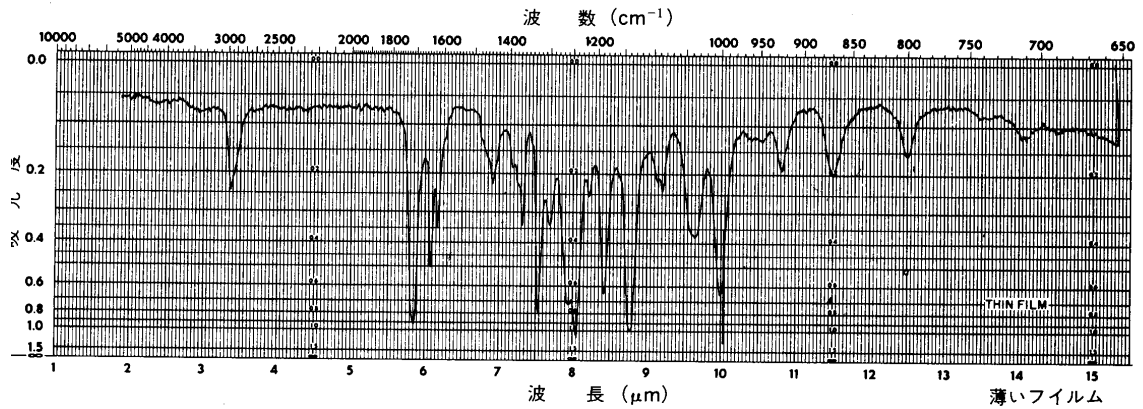
<sup>13</sup>C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



<sup>13</sup>C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



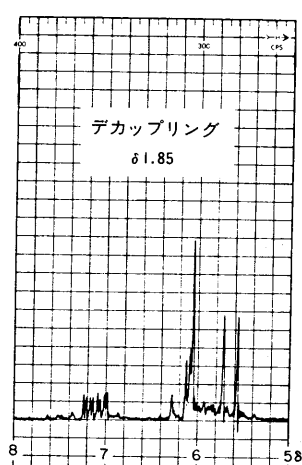
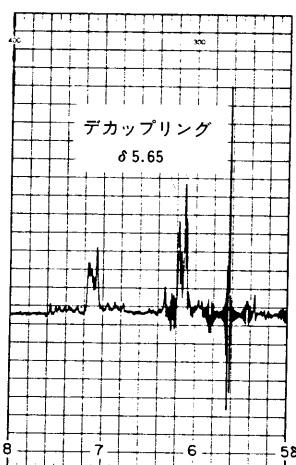
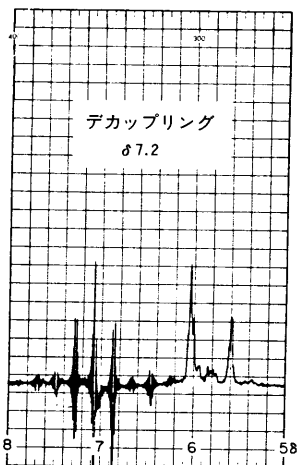
化合物 7・8  
赤外スペクトル



紫外スペクトルデータ

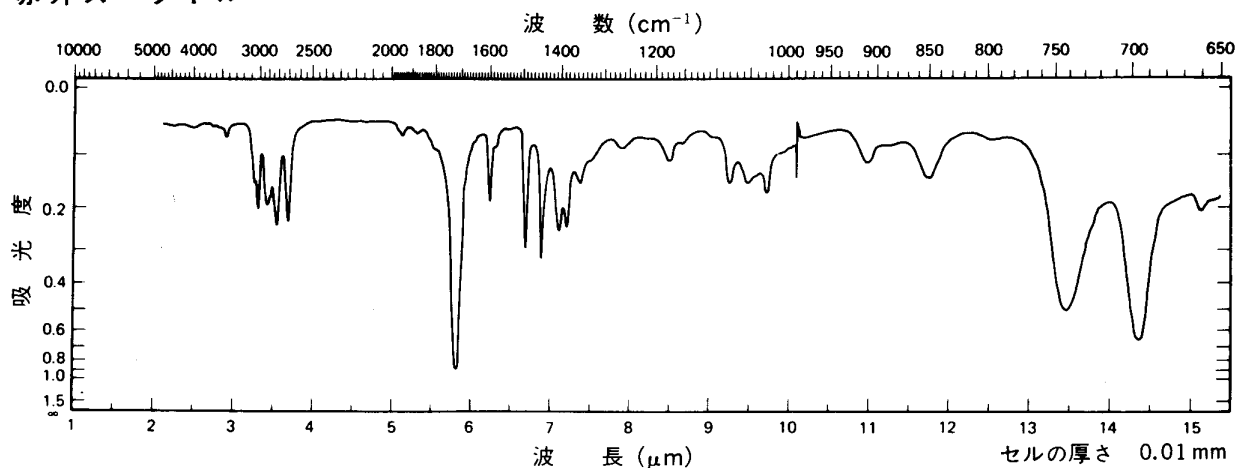
$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\log \epsilon_{\text{max}}$
259	4.4

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

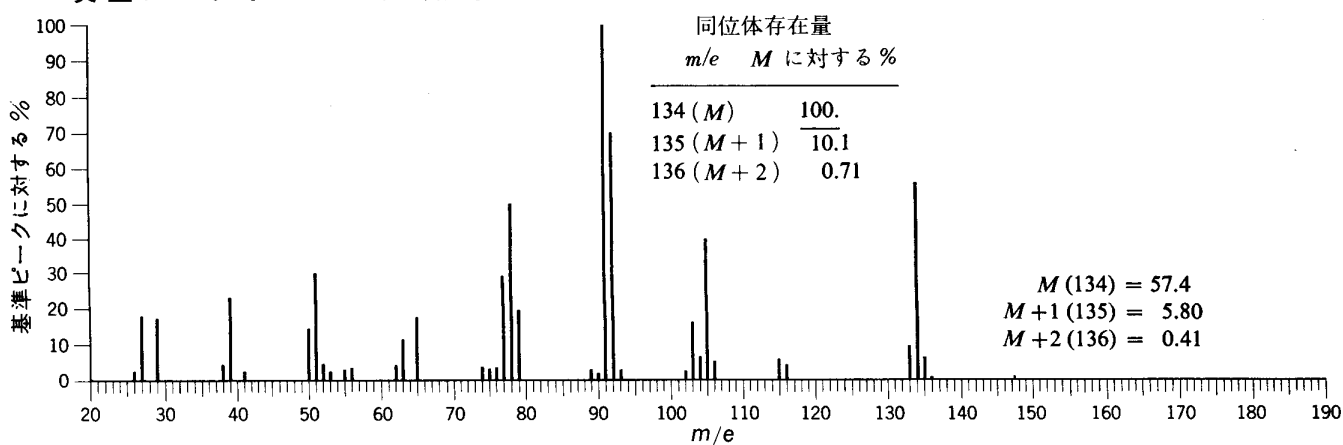


化合物 8・1 (Beilstein Ref.7,304)

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

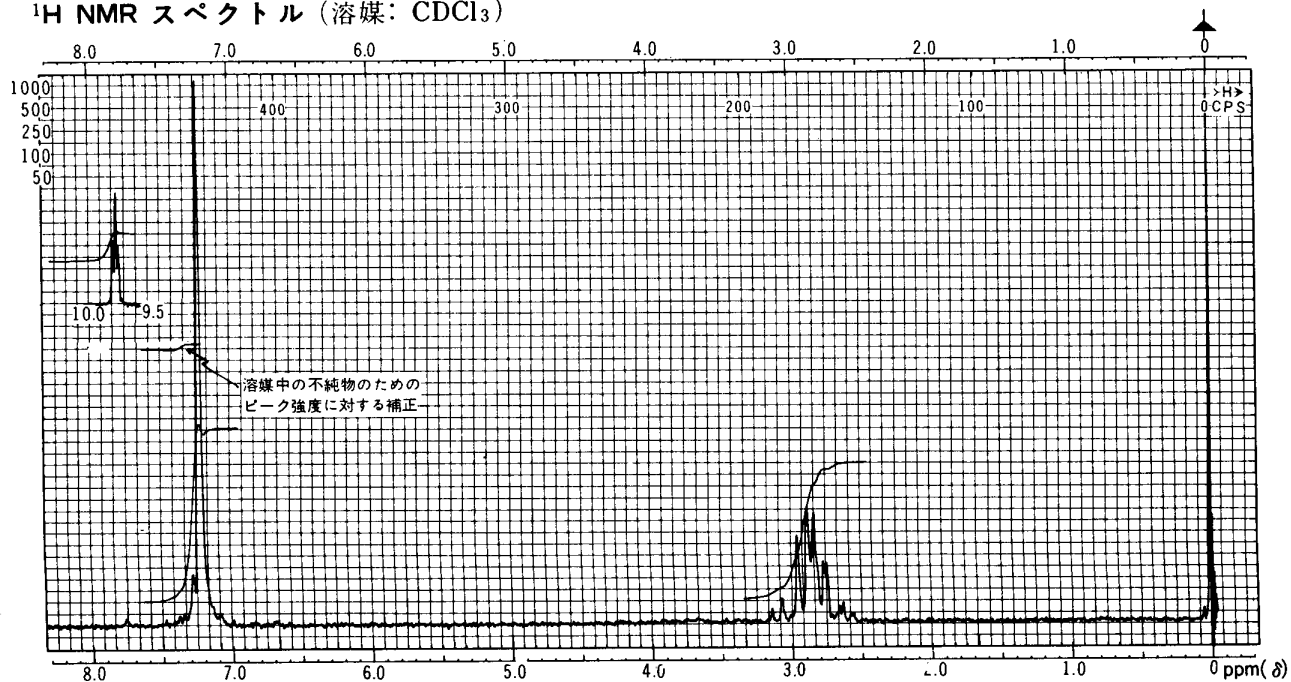


紫外スペクトルデータ

$\lambda_{max}^{n.s.g.}$	$\log \epsilon_{max}$	255	2.50	264	2.18
		259	2.47	268	2.25
		262	2.43	283	1.59
249	2.31				
253	2.50				

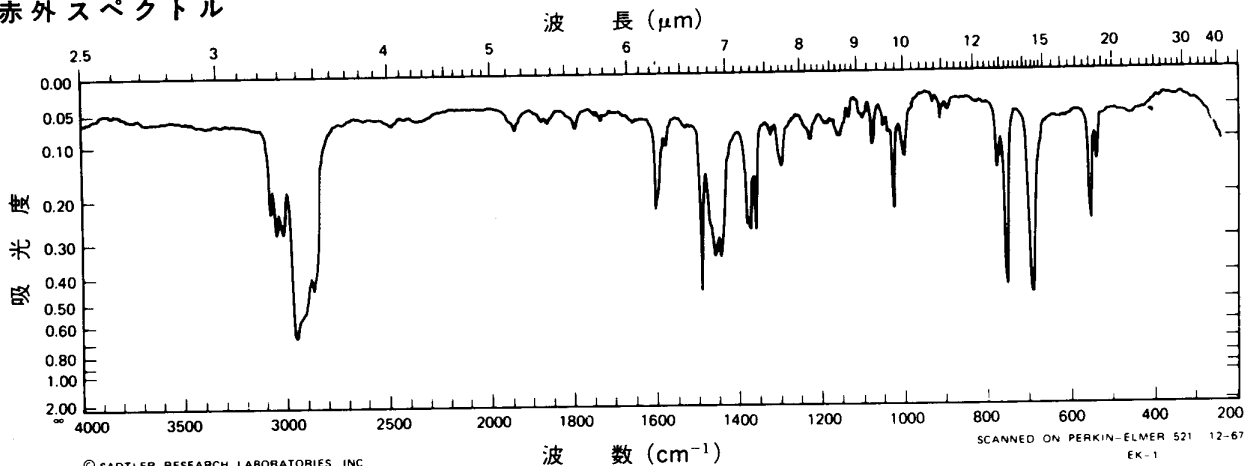
*n.s.g.* = 溶媒記載なし

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)



化合物 8・2 (Beilstein Ref.5,436)

赤外スペクトル



© Sadtler Research Laboratories, Inc.  
Philadelphia, PA. 19104 U.S.A.

SCANNED ON PERKIN-ELMER 521 12-67

EK-1

セルの厚さ 0.01 mm  
キャピラリーセル：純液体

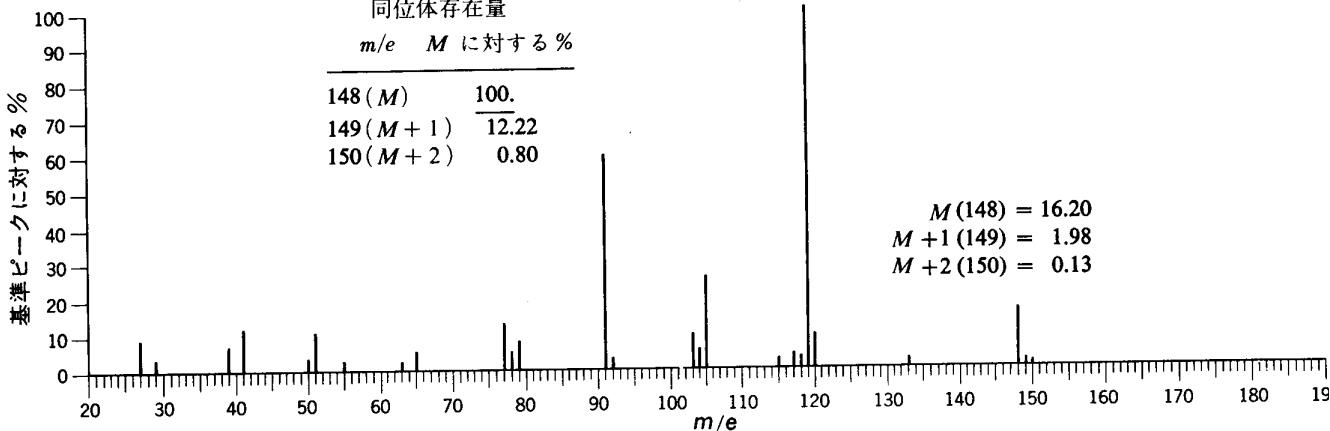
質量スペクトルデータ (相対強度)

同位体存在量

$m/e$   $M$  に対する %

148 ( $M$ )	100.
149 ( $M+1$ )	12.22
150 ( $M+2$ )	0.80

$M(148) = 16.20$   
 $M+1(149) = 1.98$   
 $M+2(150) = 0.13$

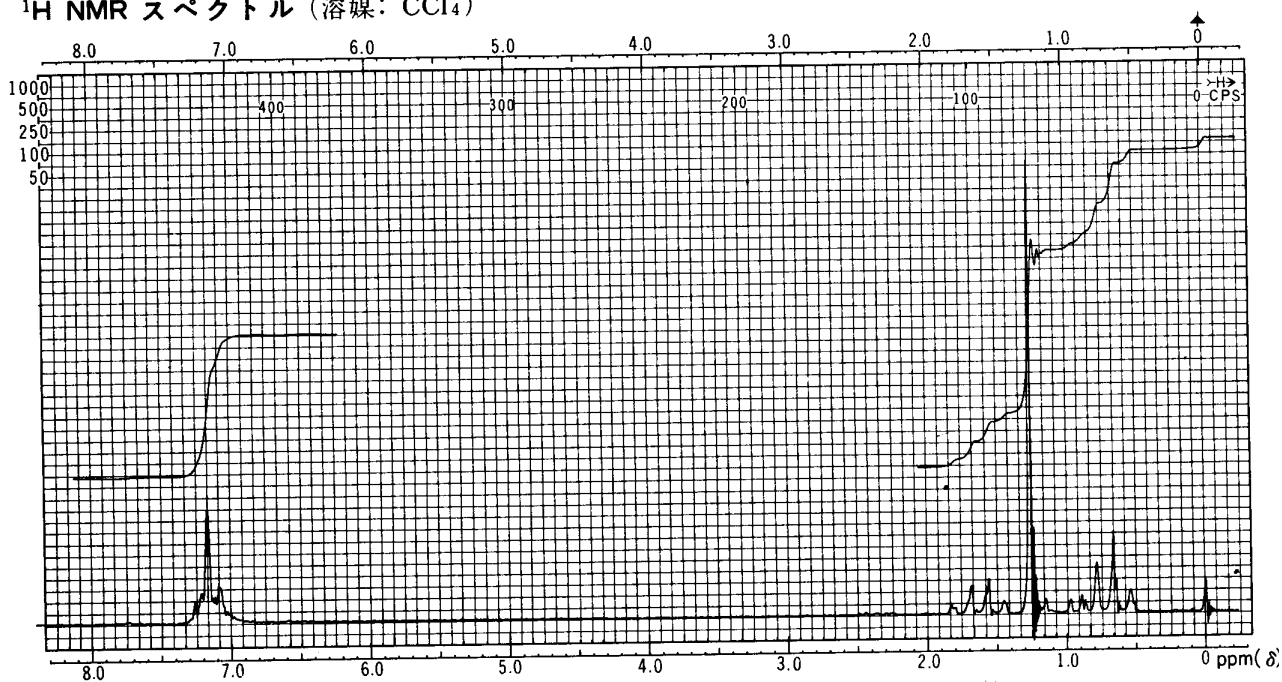


紫外スペクトルデータ

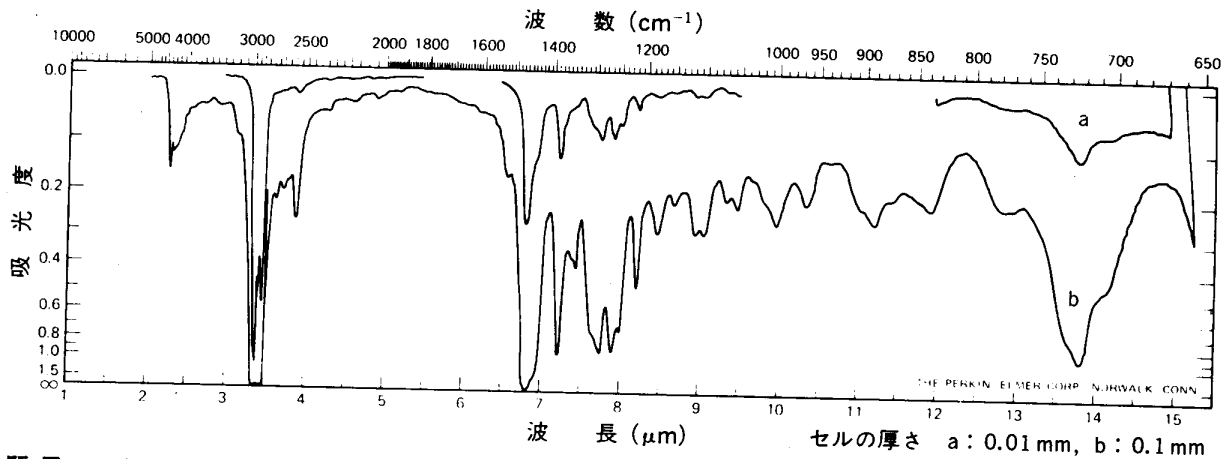
	242 (s)	1.85	258	2.25
$\lambda_{\text{Isooctane max}}$	247.5 (s)	2.09	261	2.20
	252.5	2.19	264	2.18
217 (s)	3.60			
236 (s)	1.57			

(s) = 肩

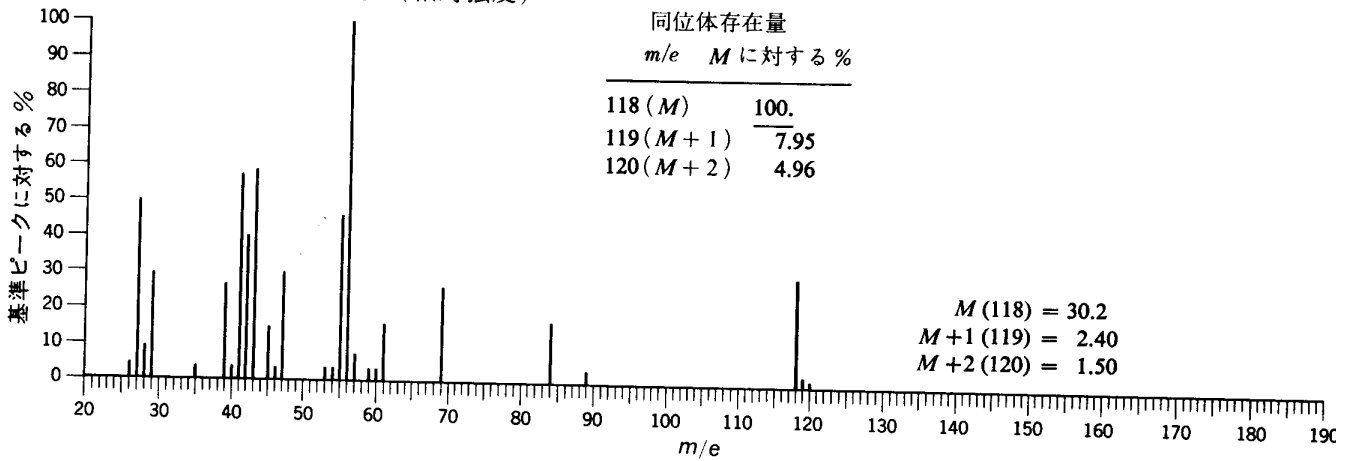
$^1\text{H NMR}$  スペクトル (溶媒:  $\text{CCl}_4$ )



化合物 8・3 (Beilstein Ref.1,408)  
赤外スペクトル



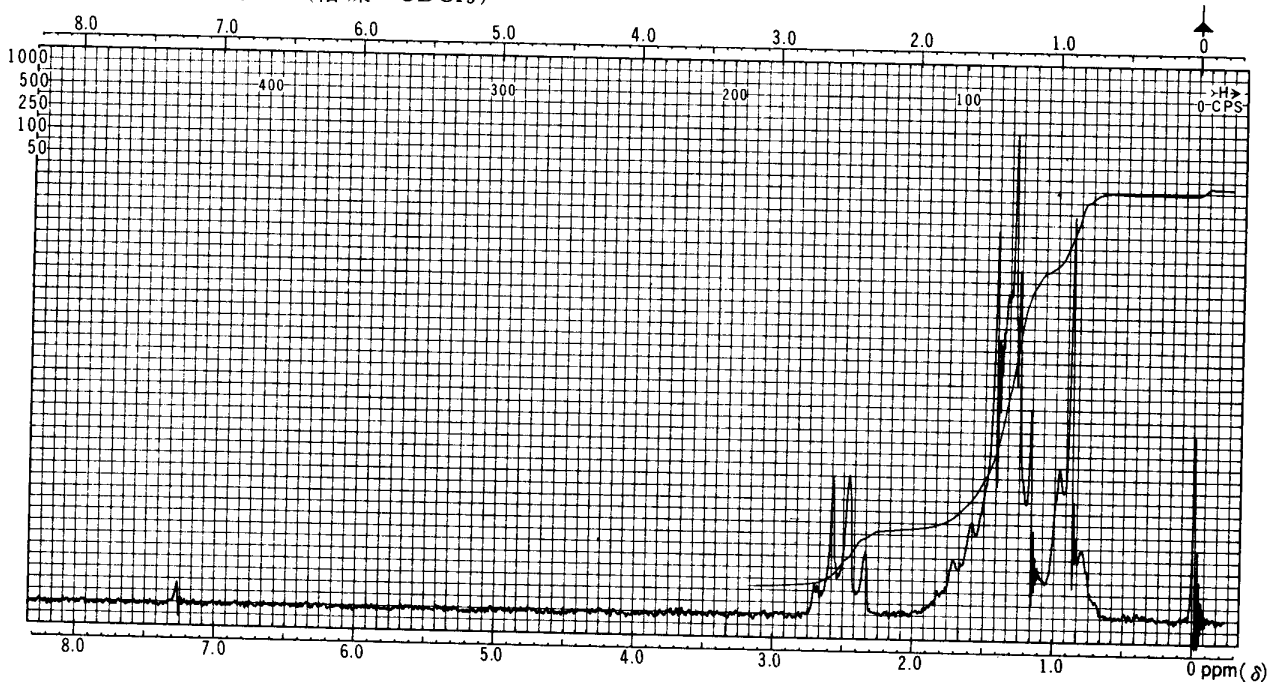
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

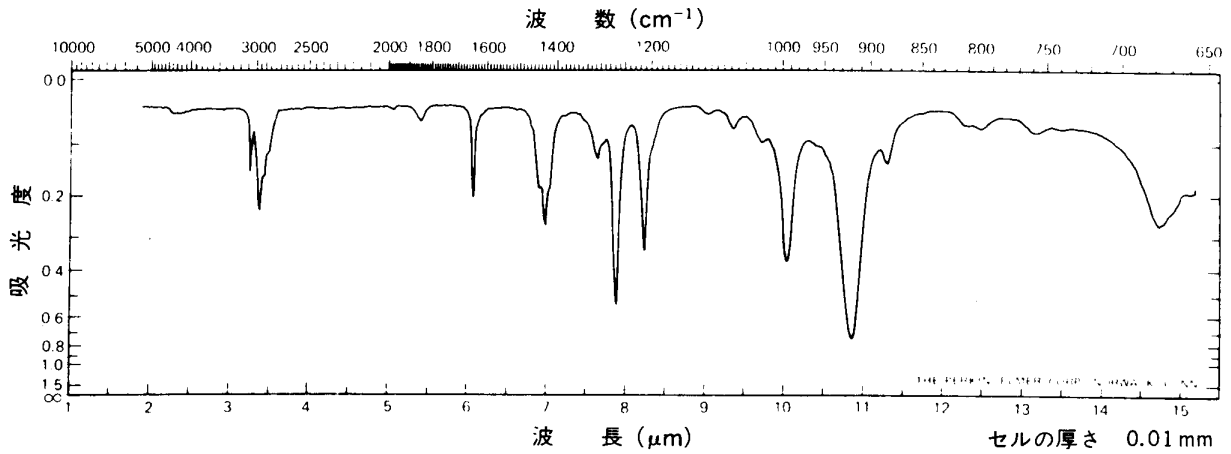
$\lambda_{\max}^{C_6H_5}$	$\epsilon_{\max}$
225 (s)	163 (s) = 肩

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)

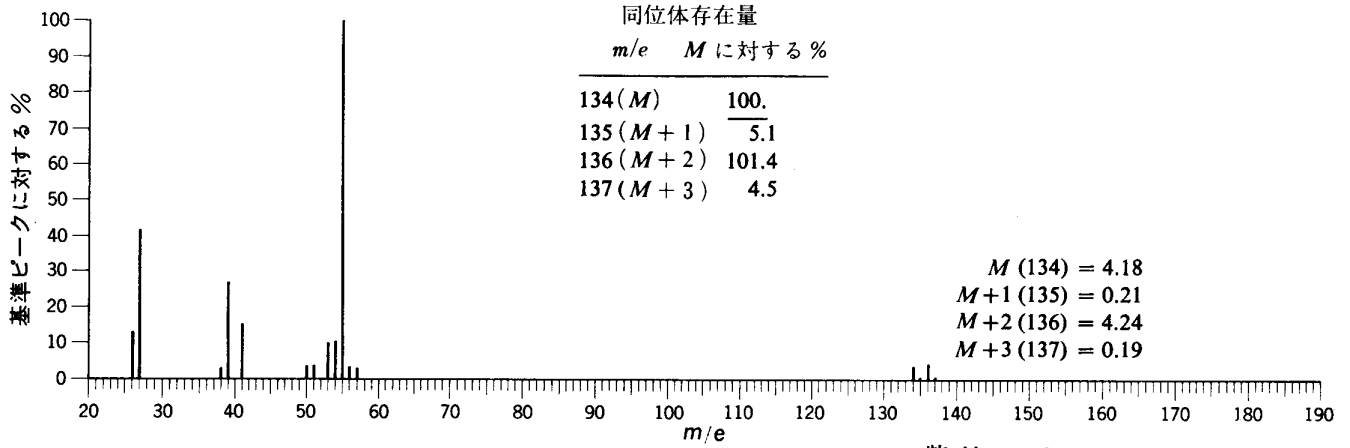


化合物 8・4 (Beilstein Ref.1(Suppl.3), 727)

赤外スペクトル

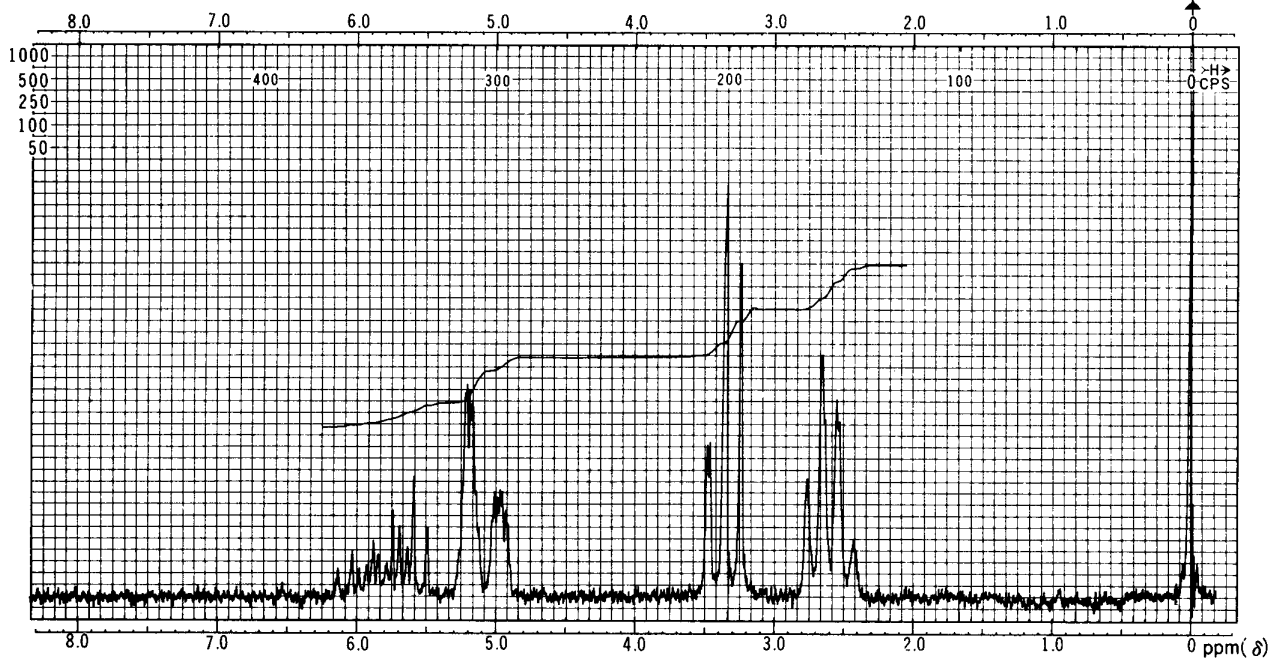


質量スペクトルデータ (相対強度)



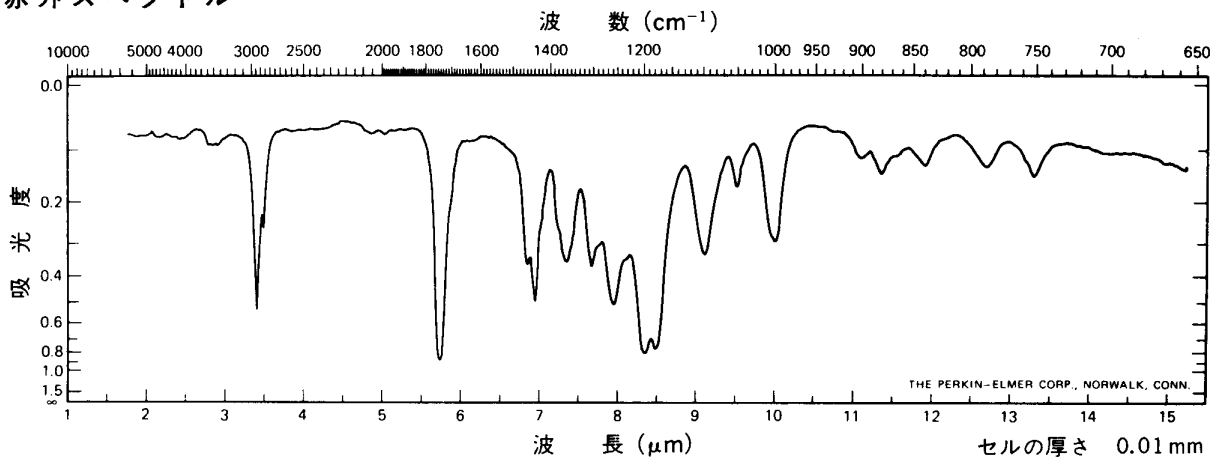
紫外スペクトルデータ  
200 nm 以上で特徴なし

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

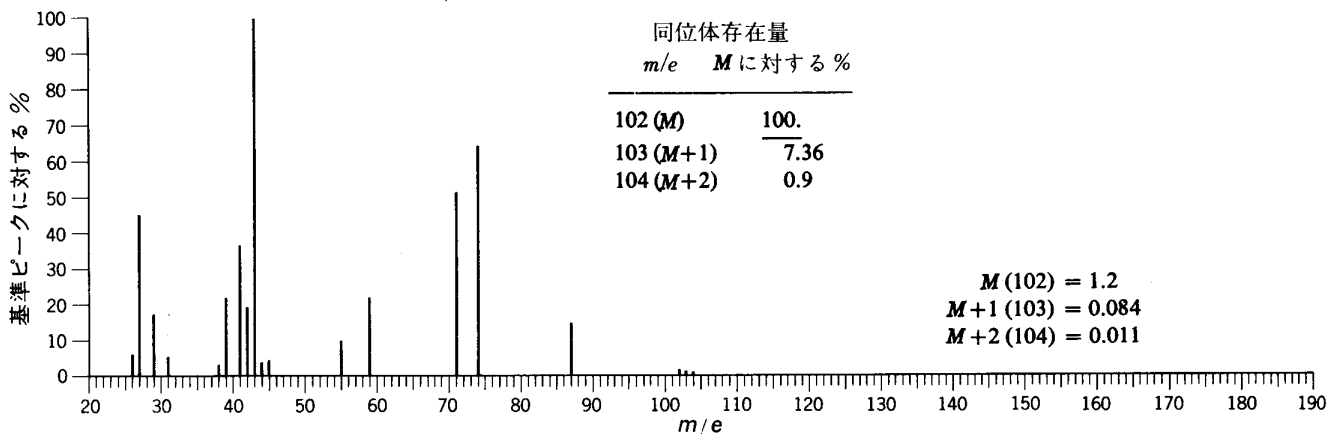


化合物 8・5

赤外スペクトル

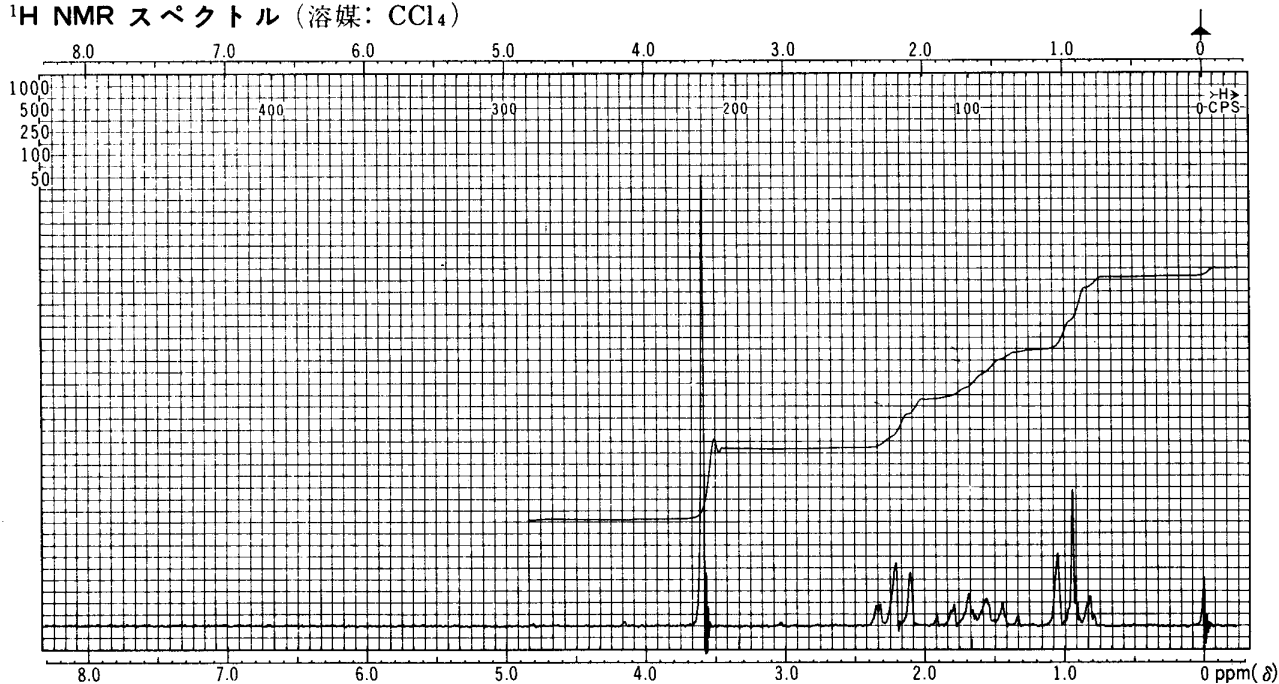


質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ  
210 nm以上で透明

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)



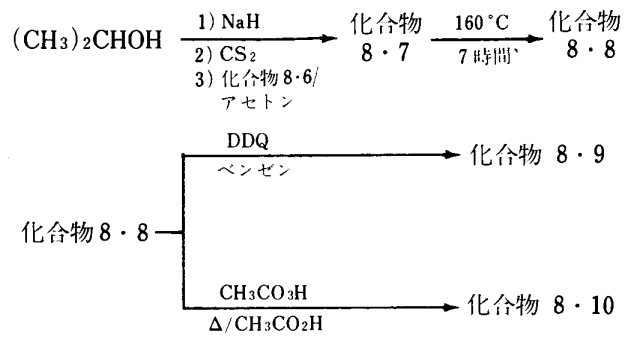


**化合物の処理過程が示された問題**  
**(化合物 8・6～8・10)**

示されたスペクトルから化合物 8・6 の構造を決定せよ。イソプロピルアルコールを NaH で処理して二硫化炭素を加えてナトリウム塩を遊離させ、化合物 8・6 のアセトン溶液をこの塩で処理すると化合物 8・7 が得られる。与えられたスペクトルから化合物 8・7 を同定せよ。化合物 8・7 を 160℃ で 7 時間熱分解を行うと、化合物 8・8 が得られる。与えられたスペクトルから化合物 8・8 を同定せよ。化合物 8・8 をベンゼン中でジシアノジクロロキノン (DDQ) を用いて室温で 20 分処理すると、化合物 8・9 が得られる。また化合物 8・8 を過酸化水素を含む氷酢酸で還流しながら処理すると化合物 8・10 が得られる。与

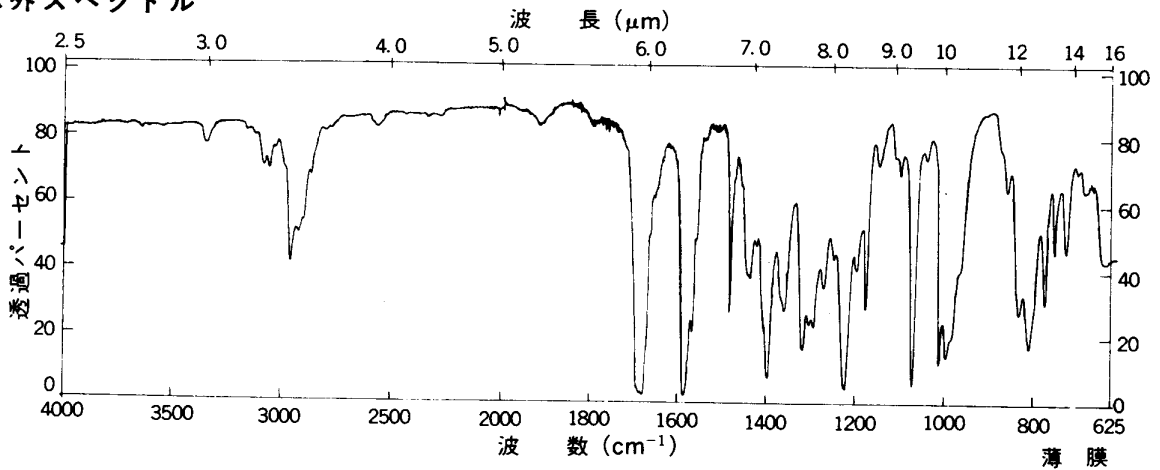
えられたスペクトルから化合物 8・9 および 8・10 を同定せよ。

**反応過程の概要**

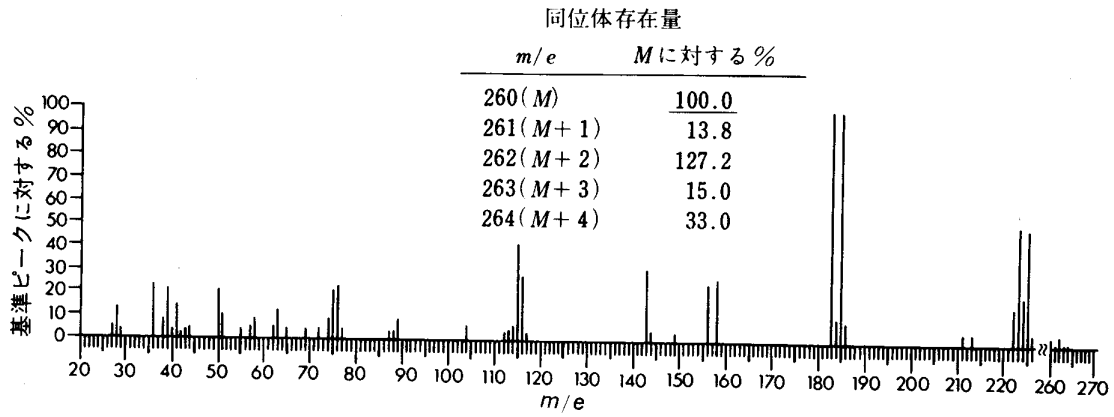


化合物 8・6

赤外スペクトル



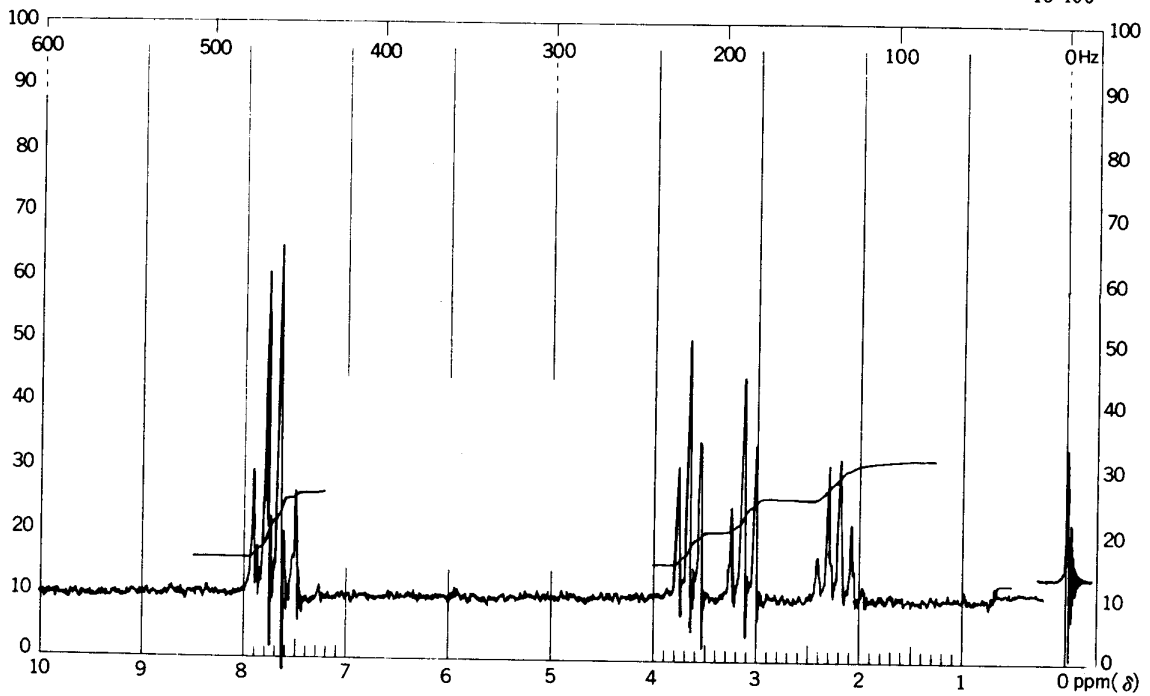
質量スペクトルデータ (相対強度)



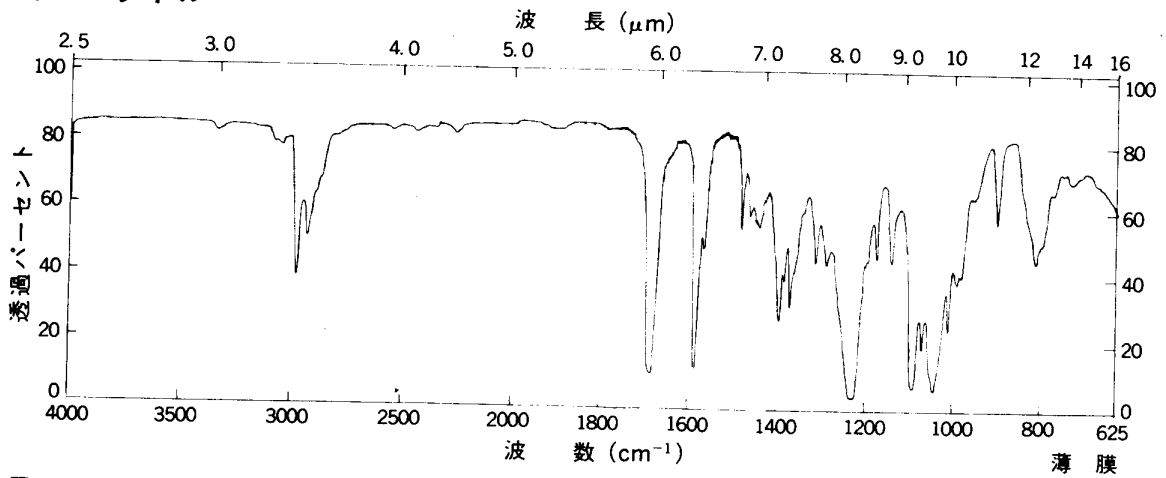
紫外スペクトルデータ

$\lambda_{max}$	$\epsilon_{max}$
253	46 400

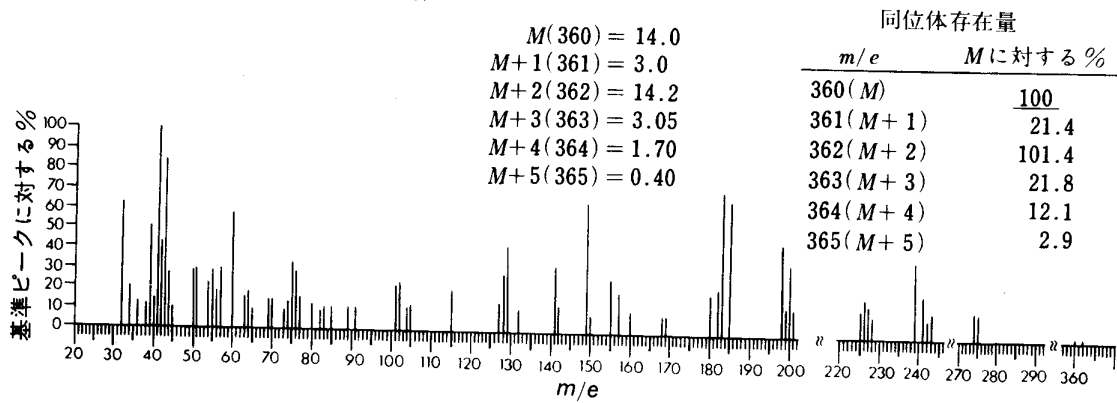
$^1\text{H}$  NMR スペクトル (溶媒:  $\text{CDCl}_3$ )



化合物 8・7  
赤外スペクトル



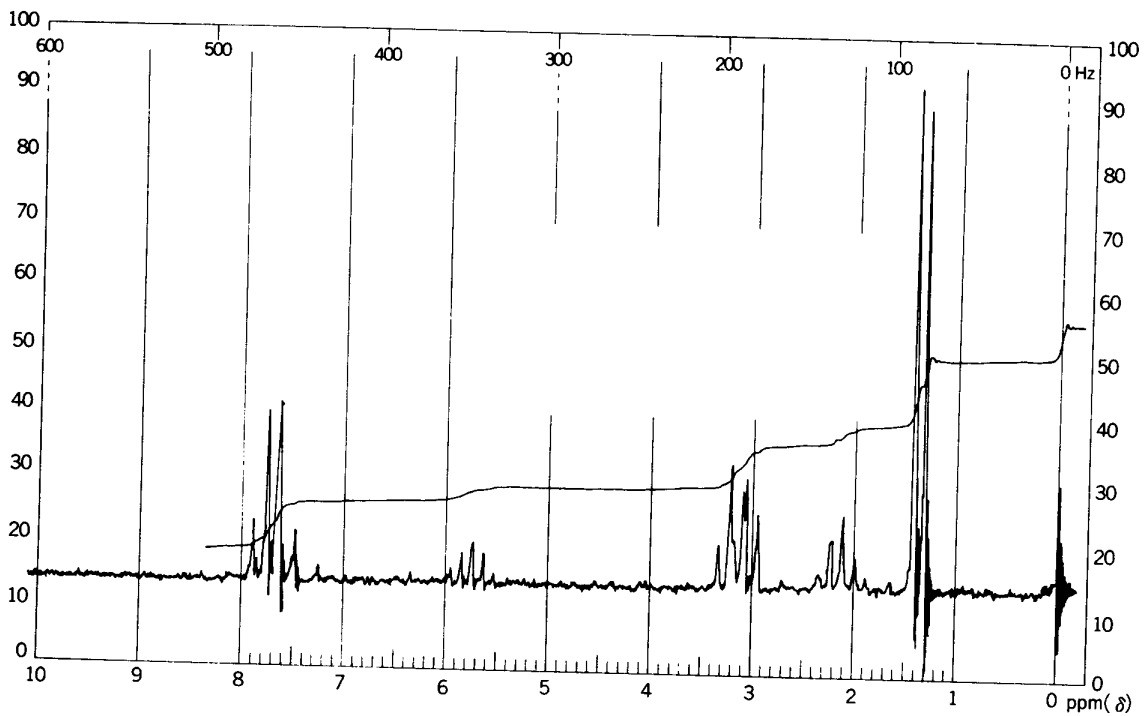
質量スペクトルデータ (相対強度)



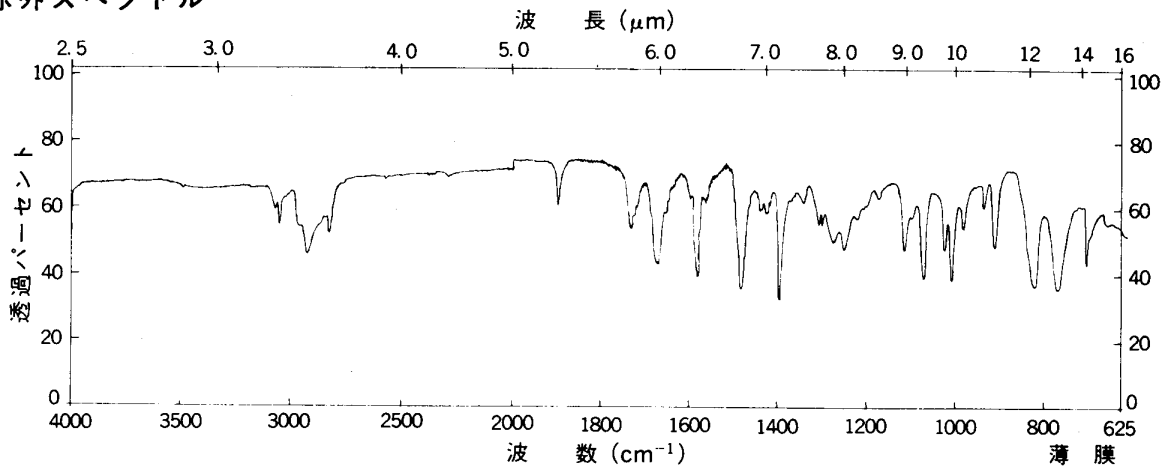
紫外スペクトルデータ

$\lambda_{max}^{CH_3OH}$	$\epsilon_{max}$
253	46400
276	1400

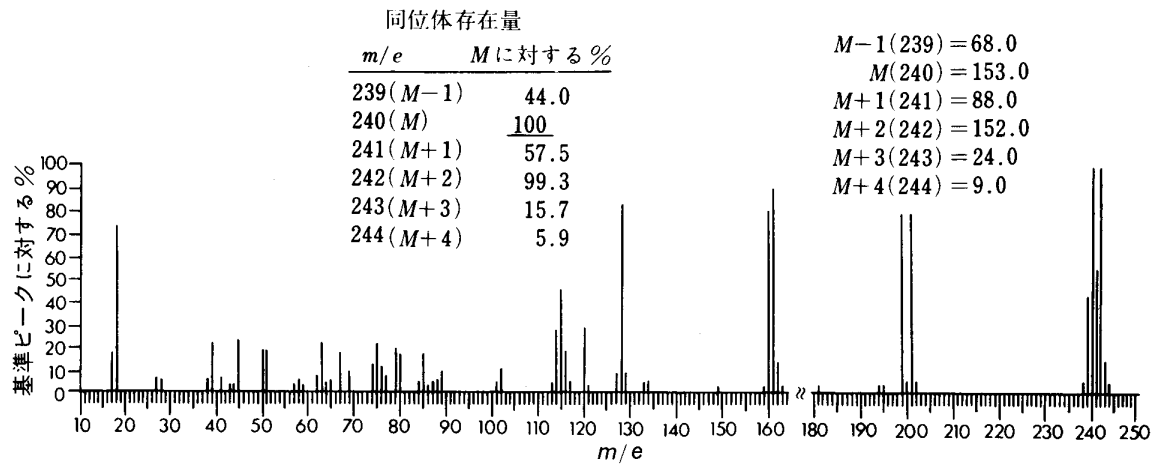
<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)



化合物 8・8  
赤外スペクトル



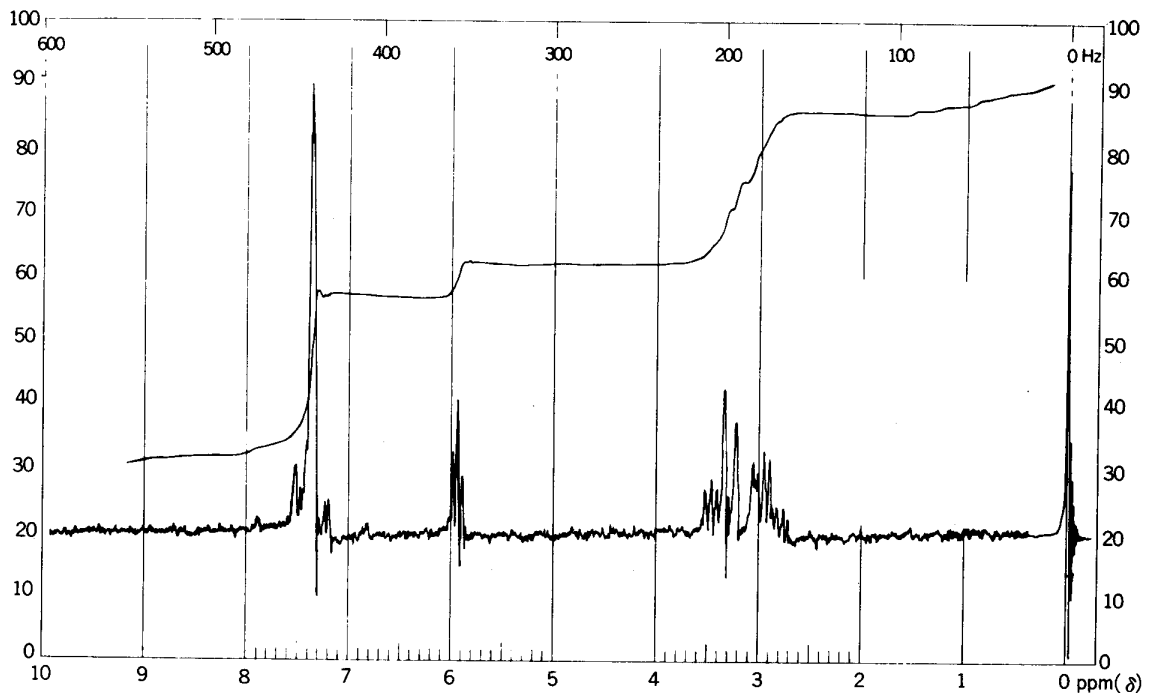
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

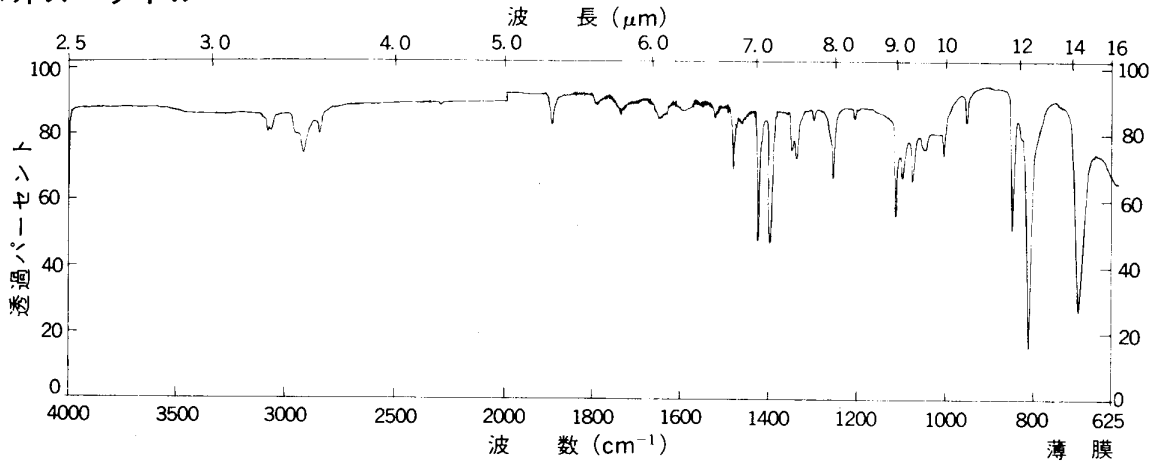
$\lambda_{\max}^{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\epsilon_{\max}$
237	18600
301	5540

$^1\text{H}$  NMR スペクトル (溶媒:  $\text{CDCl}_3$ )

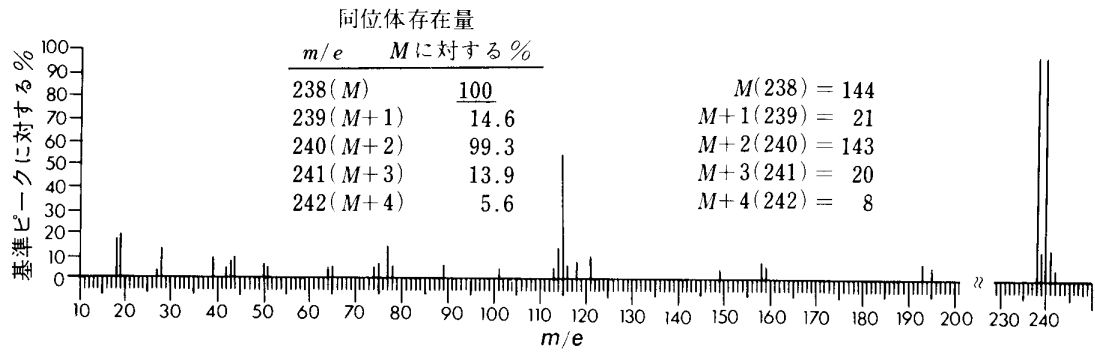


化合物 8・9 (Beilstein Ref.11, (17), 64)

赤外スペクトル



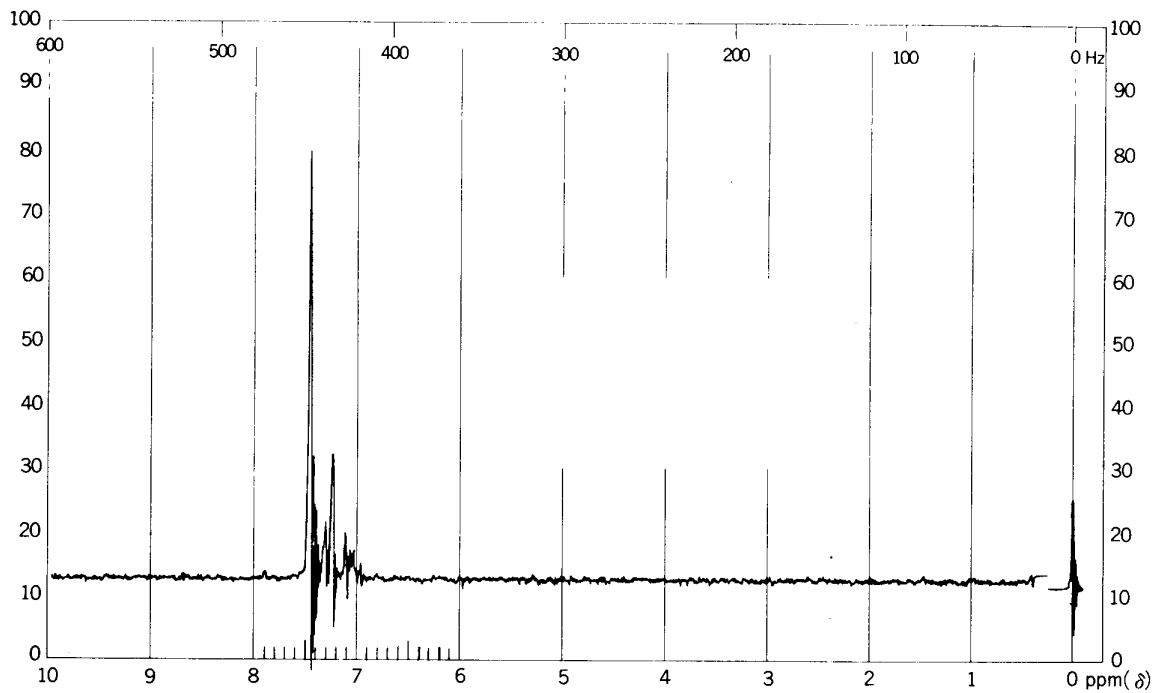
質量スペクトルデータ (相対強度)



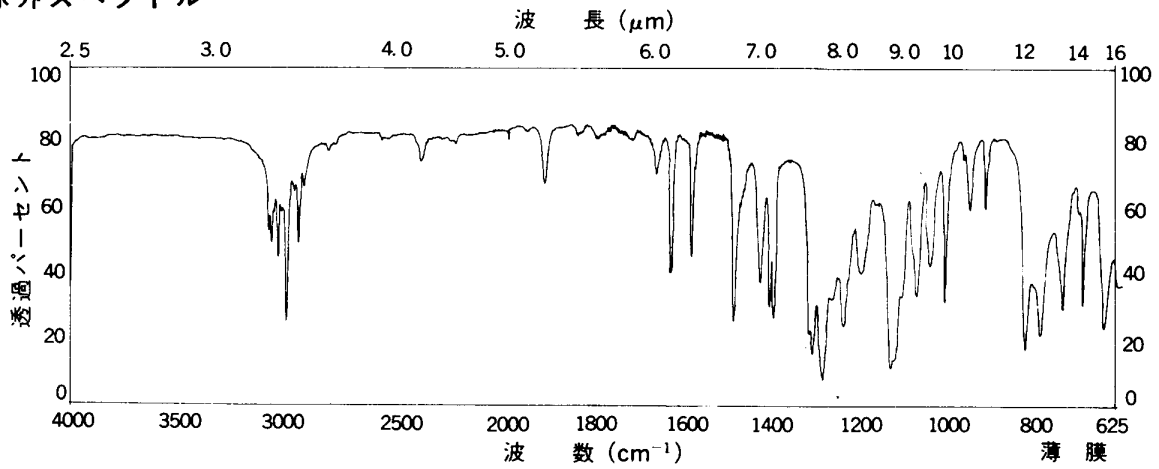
紫外スペクトルデータ

$\lambda_{\max}^{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\epsilon_{\max}$
285	23400

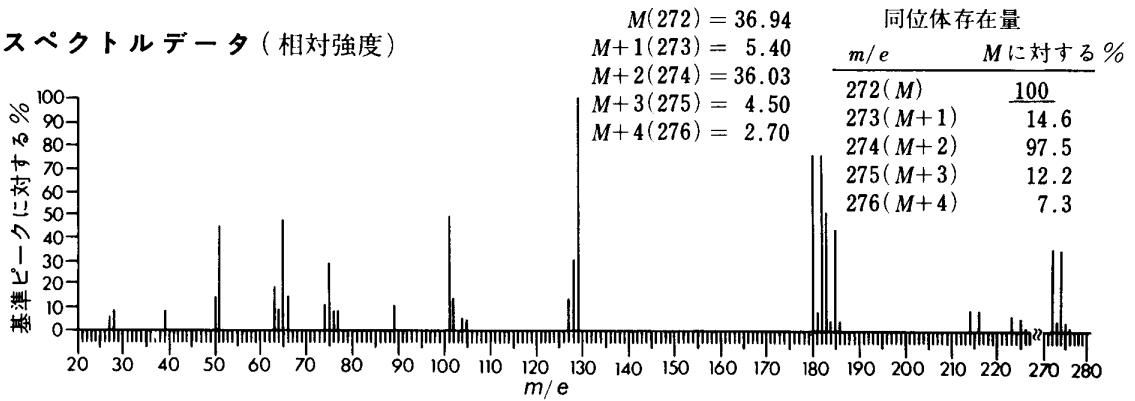
$^1\text{H}$  NMR スペクトル (溶媒:  $\text{CDCl}_3$ )



化合物 8・10  
赤外スペクトル



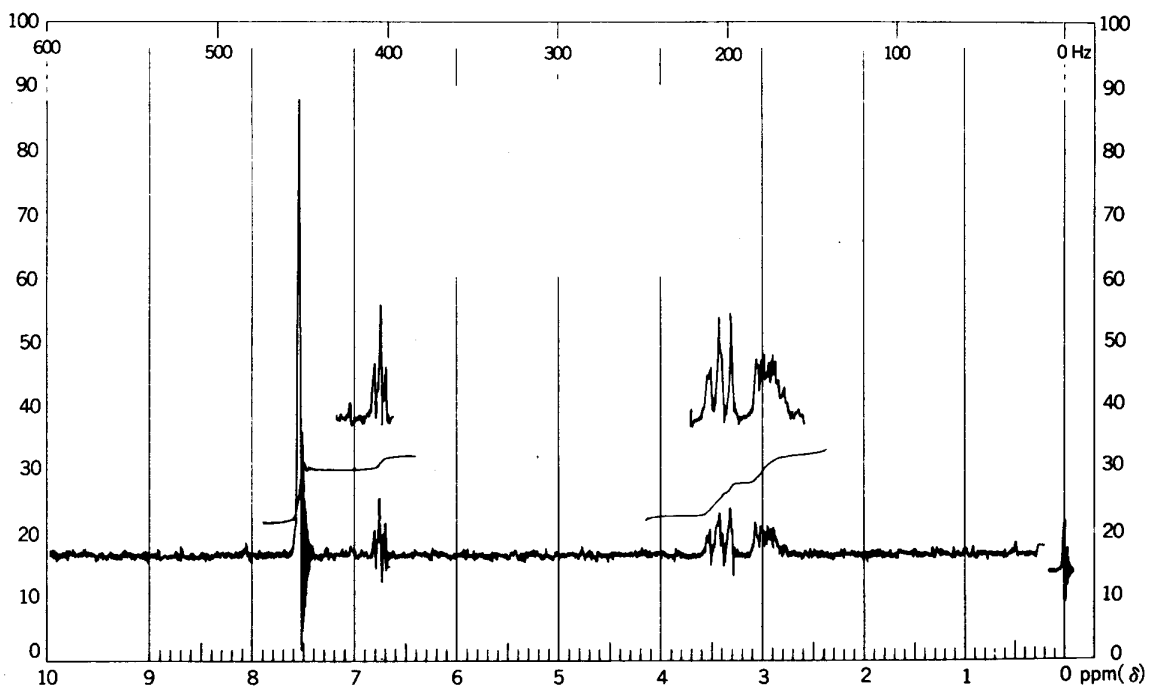
質量スペクトルデータ (相対強度)



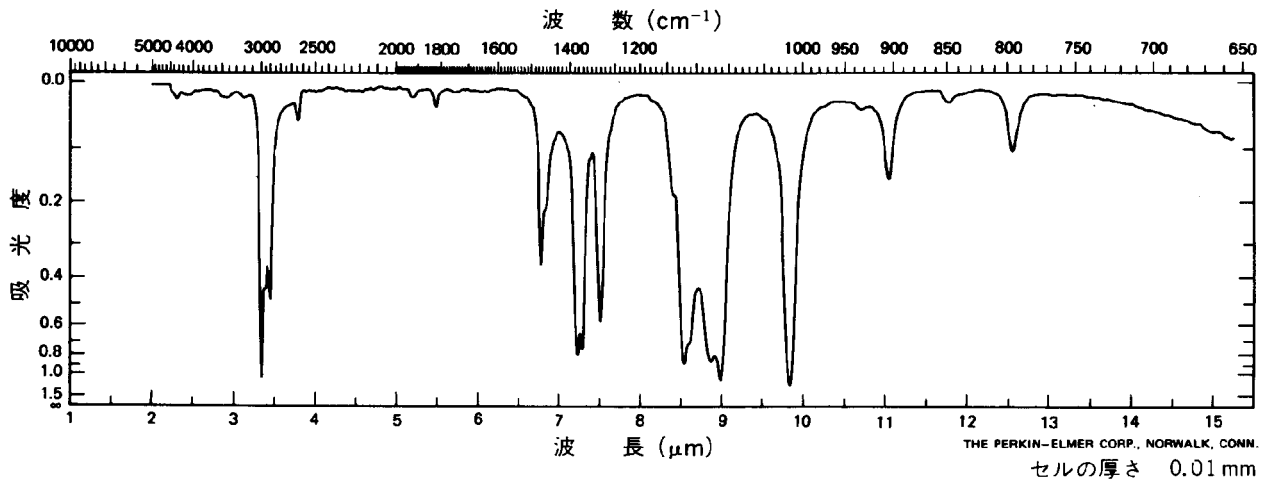
紫外スペクトルデータ

$\lambda_{\max}^{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\epsilon_{\max}$
255	21800

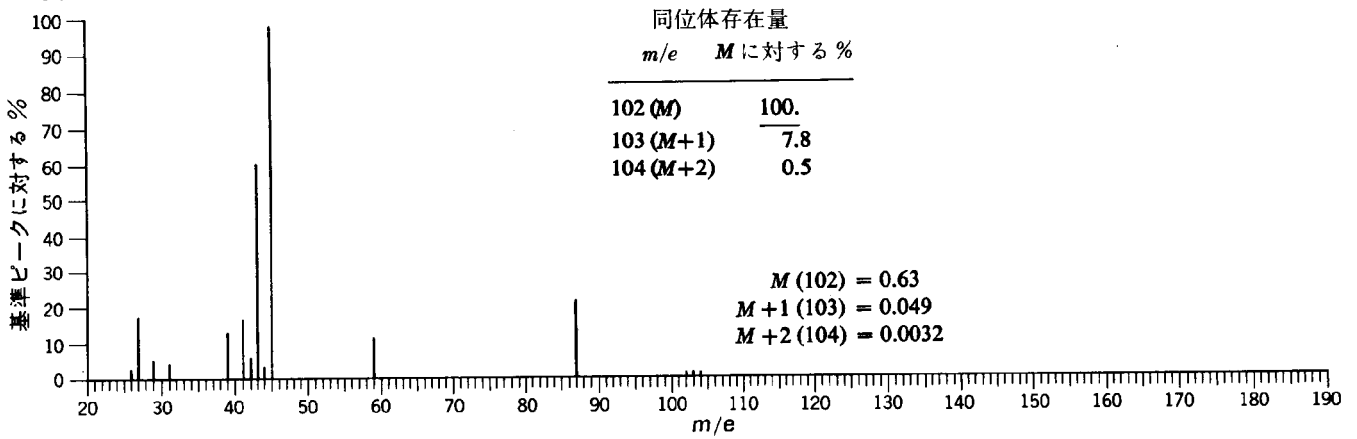
$^1\text{H}$  NMR スペクトル (溶媒:  $\text{CDCl}_3$ )



化合物 8・12  
赤外スペクトル

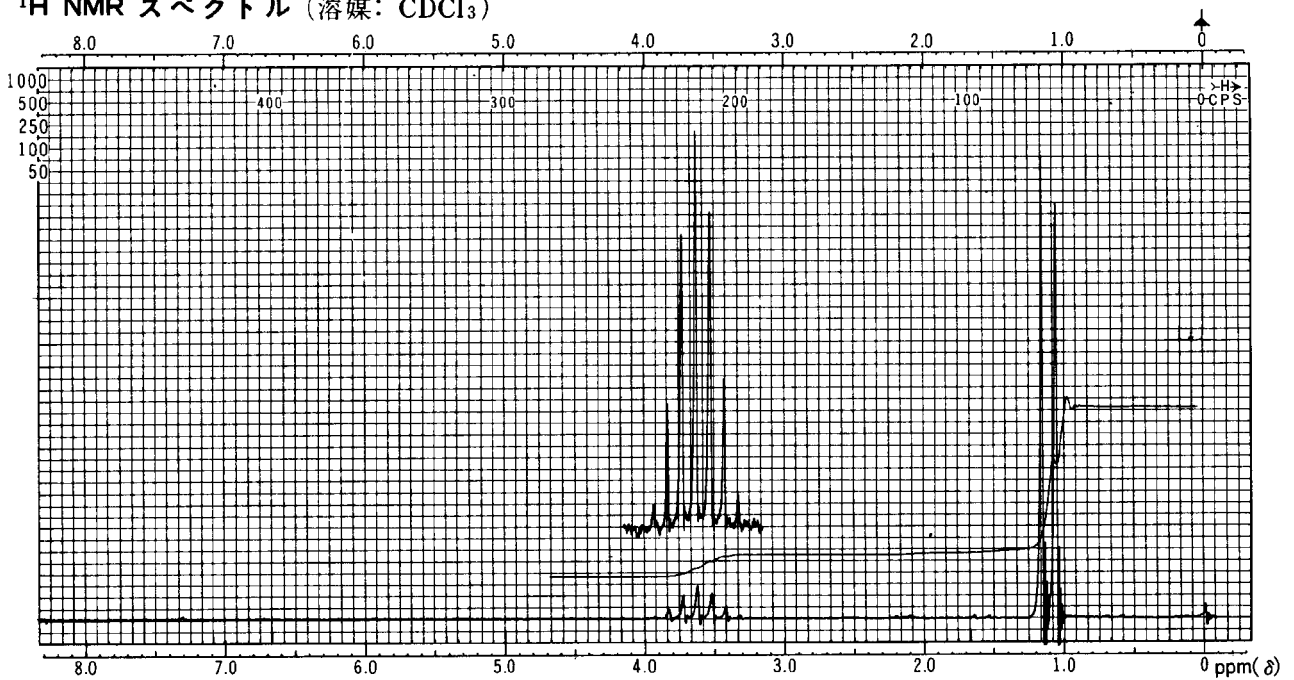


質量スペクトルデータ (相対強度)

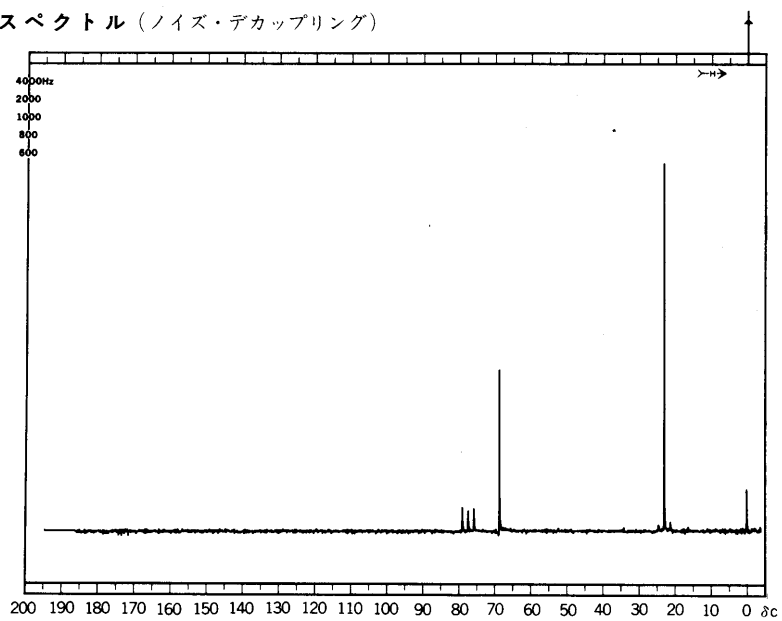
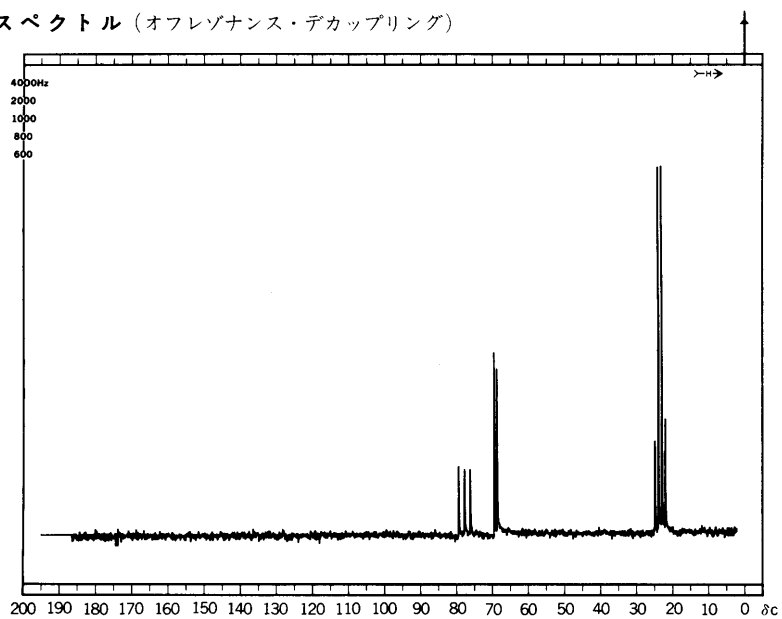


紫外スペクトルデータ  
200 nm 以上で透明

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)



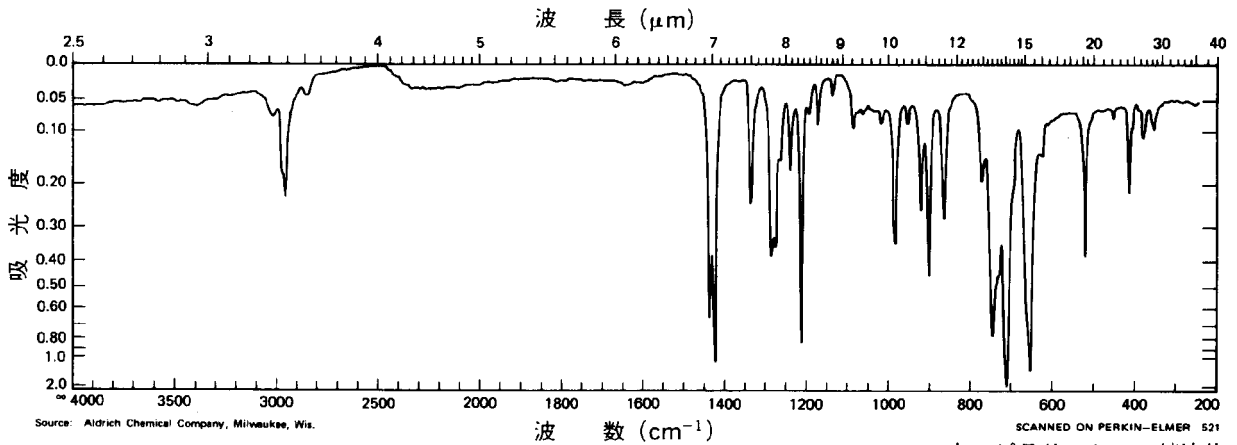
化合物 8・12 (つづき)

 $^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング) $^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



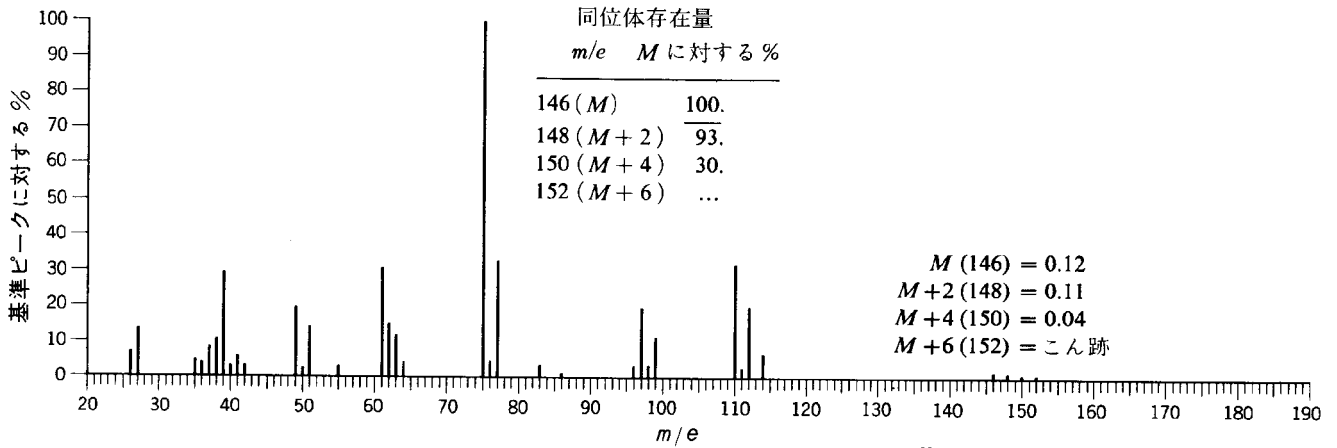
化合物 8・13 (Beilstein Ref.1,106)

赤外スペクトル



キャピラリーセル：純液体

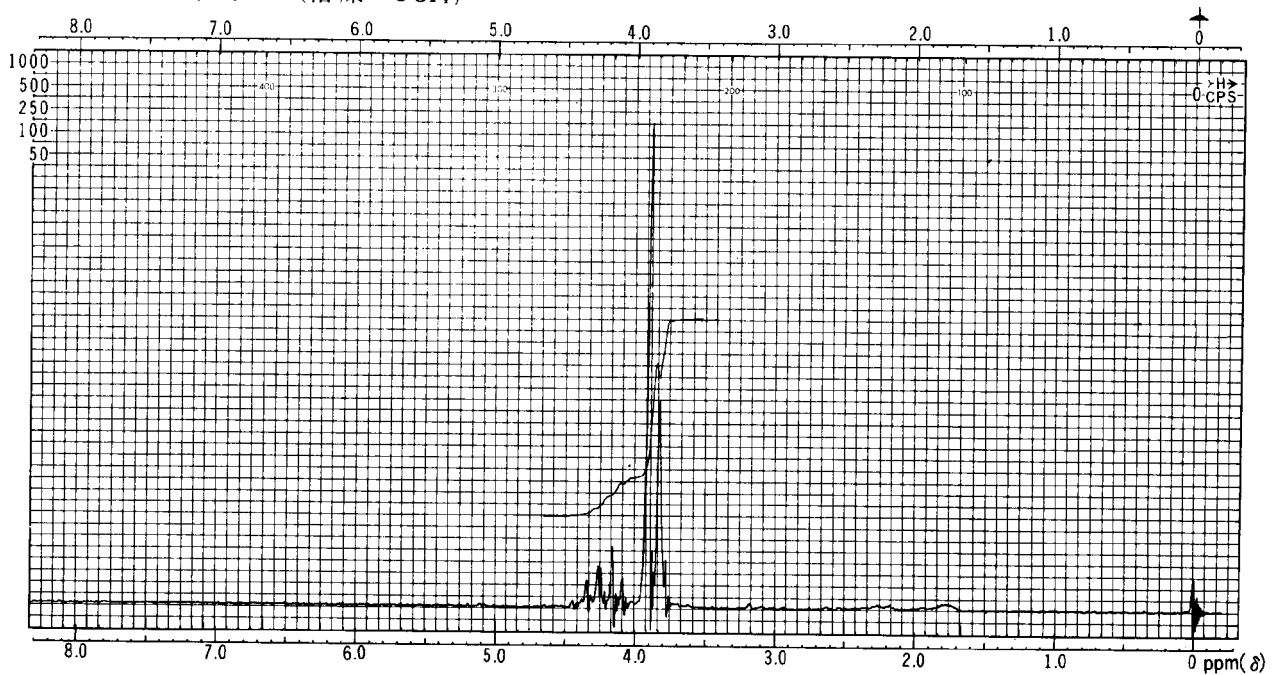
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

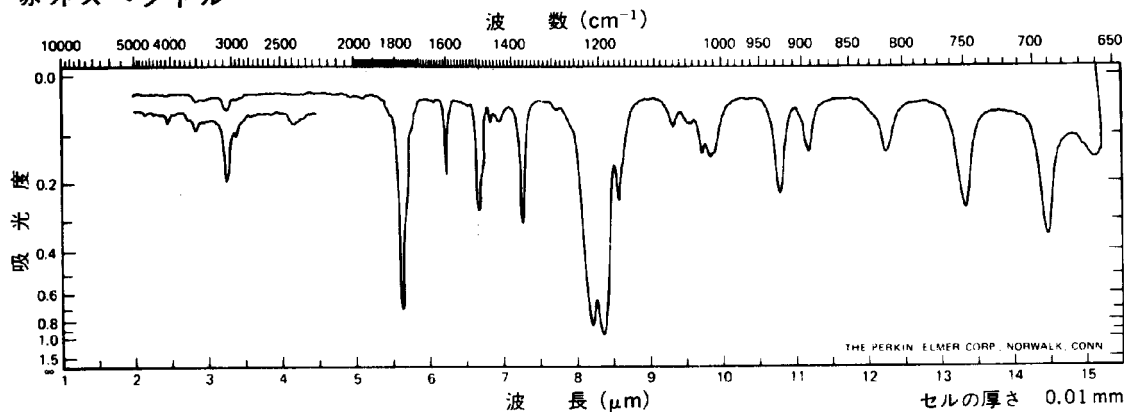
$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\epsilon_{\text{max}}$
242	14.5

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)

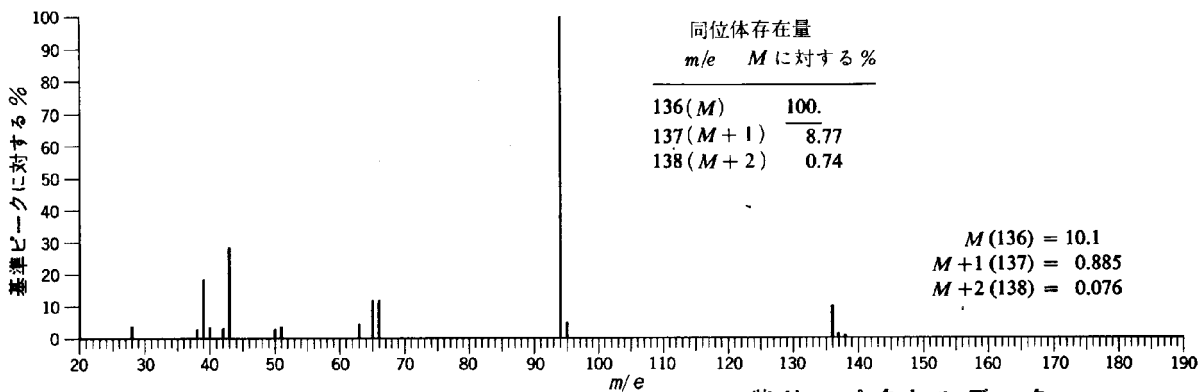


化合物 8・16 (Beilstein Ref. 6, 152)

赤外スペクトル



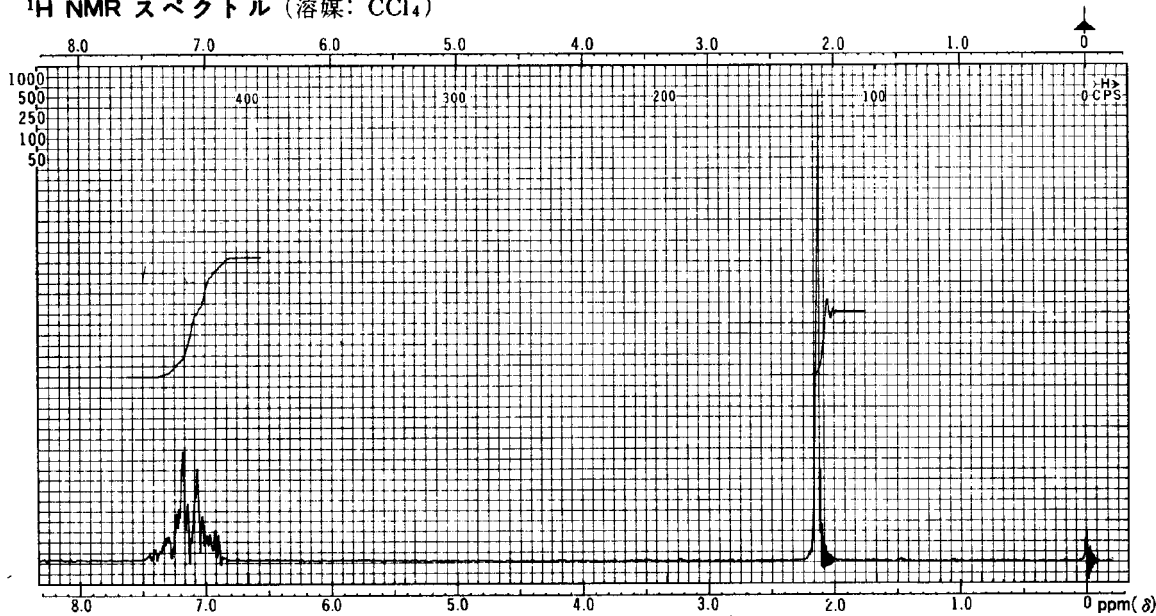
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

$\lambda_{max}^{EtOH}$	$\log \epsilon_{max}$
253	2.15
259	2.24
248	2.02
265	2.12

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CCl<sub>4</sub>)



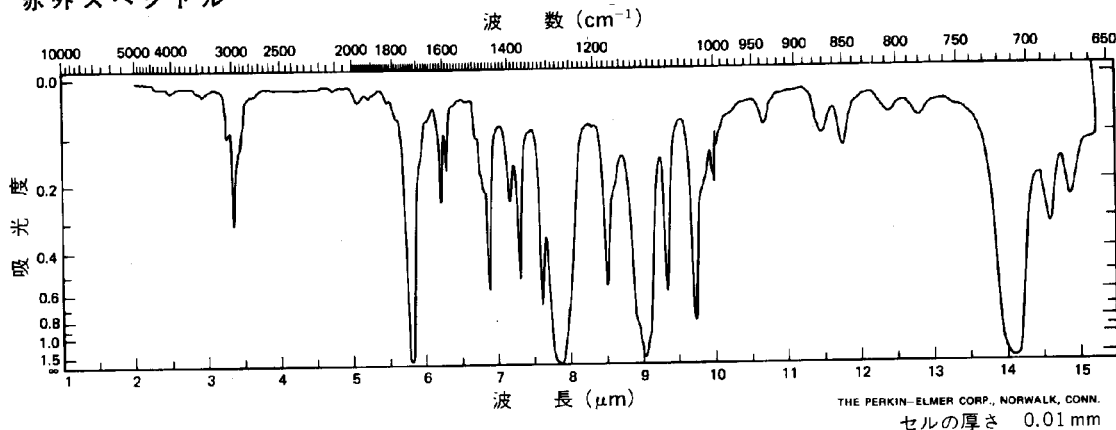
化合物 8・16

<sup>13</sup>C NMR データ (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)

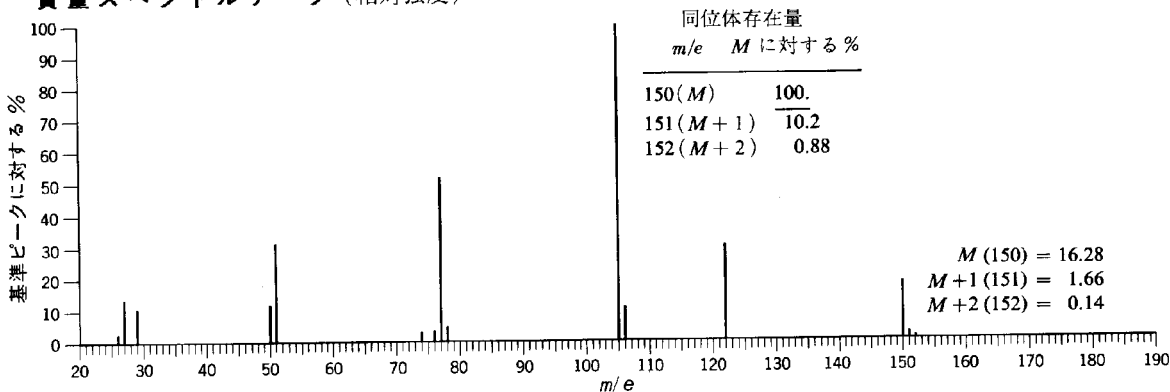
$\delta$	強度	オフレゾナンス・デカップリング多重線
20.8	20	q
121.7	90	d
125.6	65	d
129.4	100	d
151.1	15	s
169.2	17	s

化合物 8・17 (Beilstein Ref.9,110)

赤外スペクトル



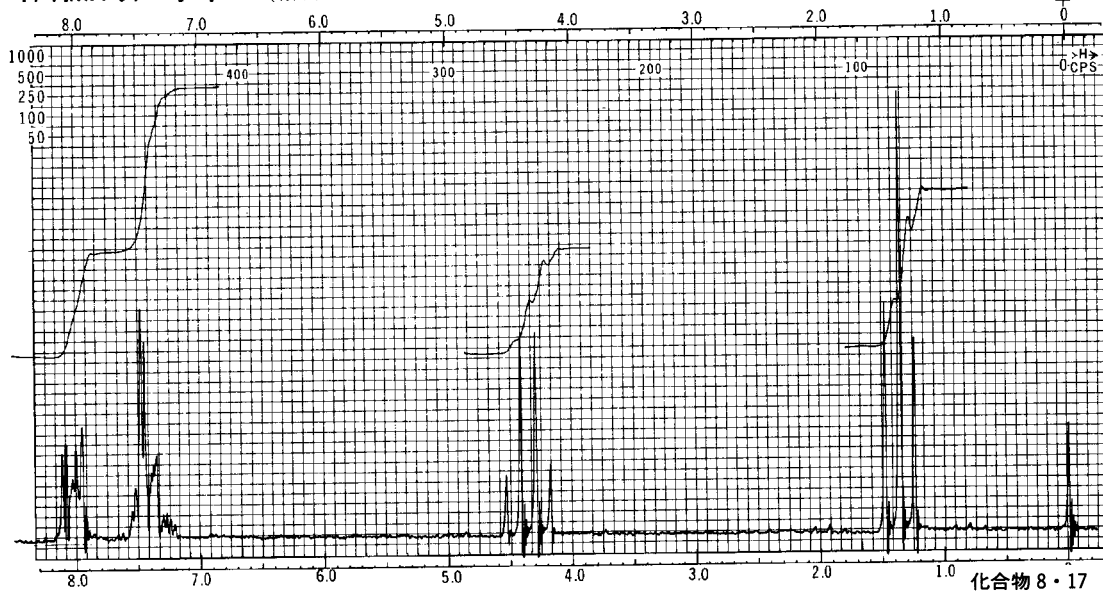
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\log \epsilon_{\text{max}}$
229	4.08
272	2.90
280	2.85

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)

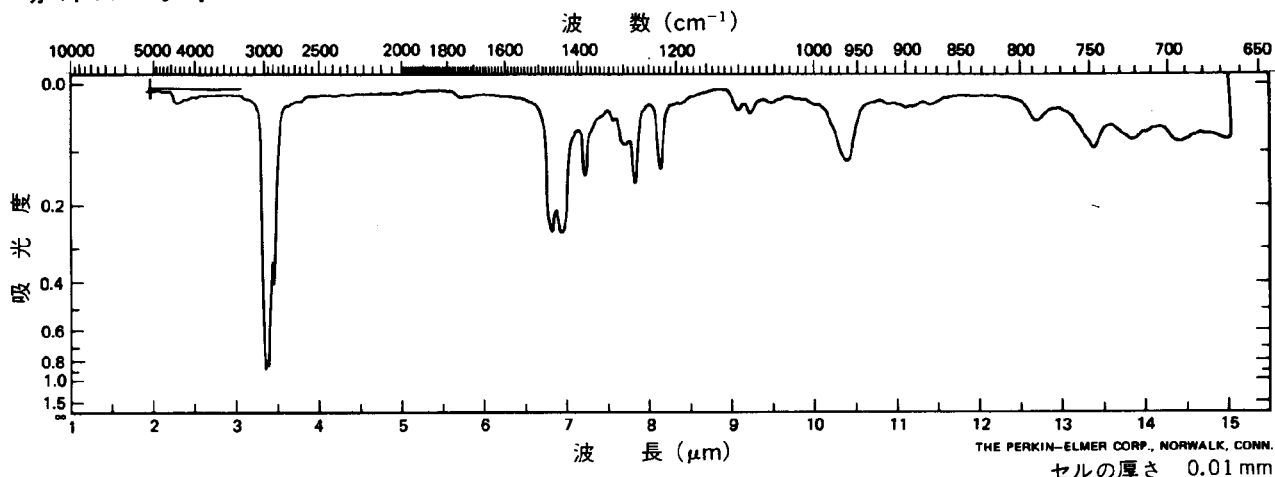


<sup>13</sup>C NMR データ (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)

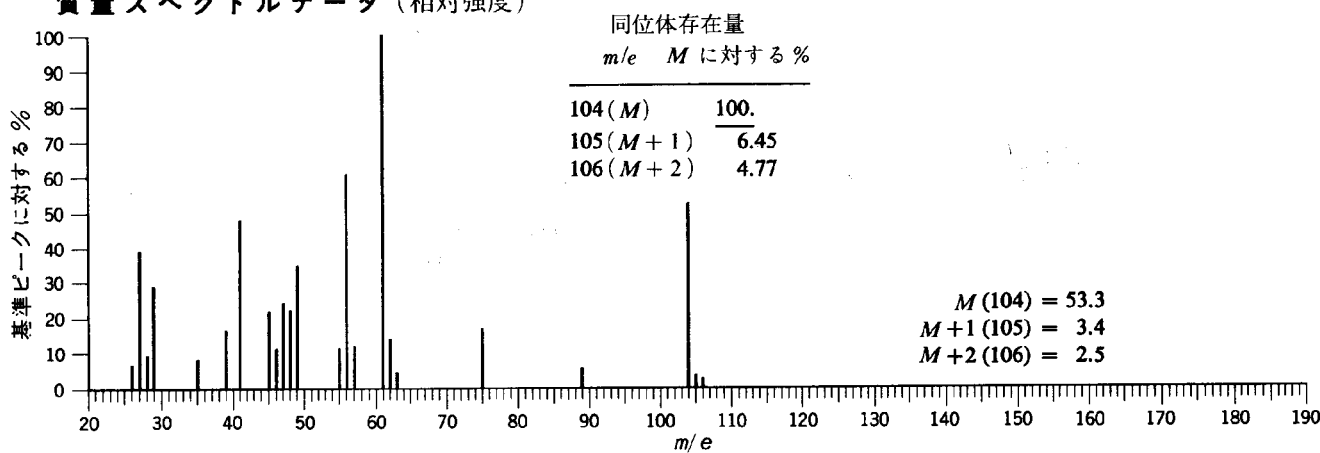
$\delta$	強度	オフレゾナンス・デカップリング多重線
14.4	47.0	q
60.8	39.7	t
128.4	87.0	d
129.7	100.0	d
130.9	8.7	s
132.8	50.2	d
166.3	9.2	s

化合物 8・21 (Beilstein Ref.1(3rd Suppl.), 1521)

赤外スペクトル



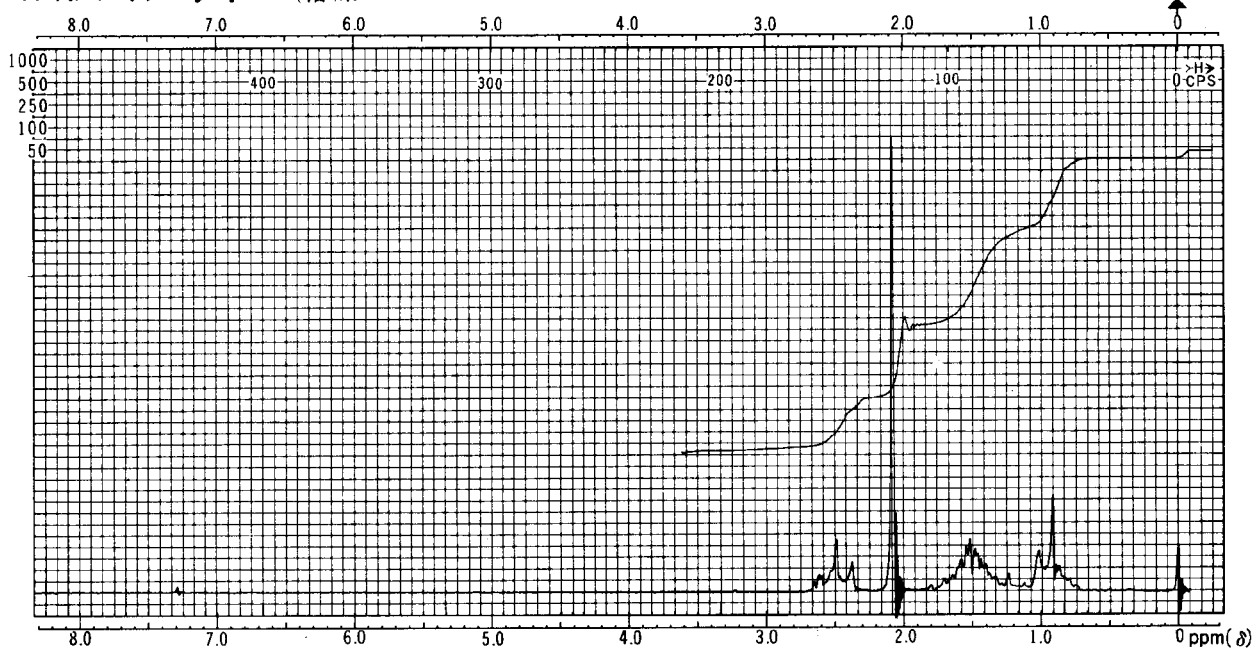
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

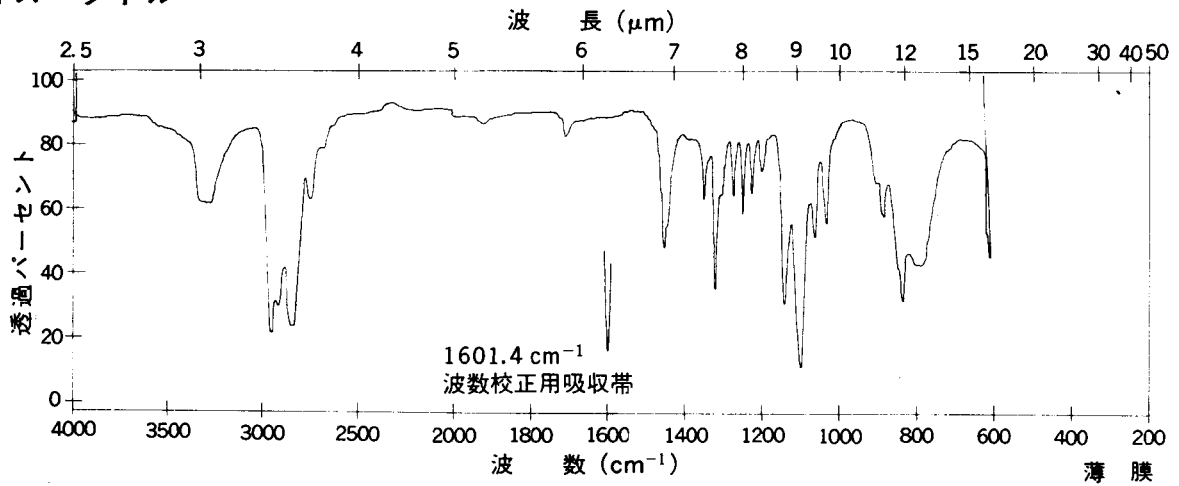
$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	$\epsilon_{\text{max}}$
228 (変曲点)	106

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>)

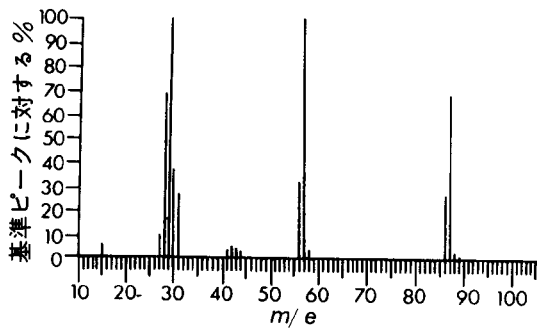


化合物 8・22 (Beilstein Ref.27, 5)

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

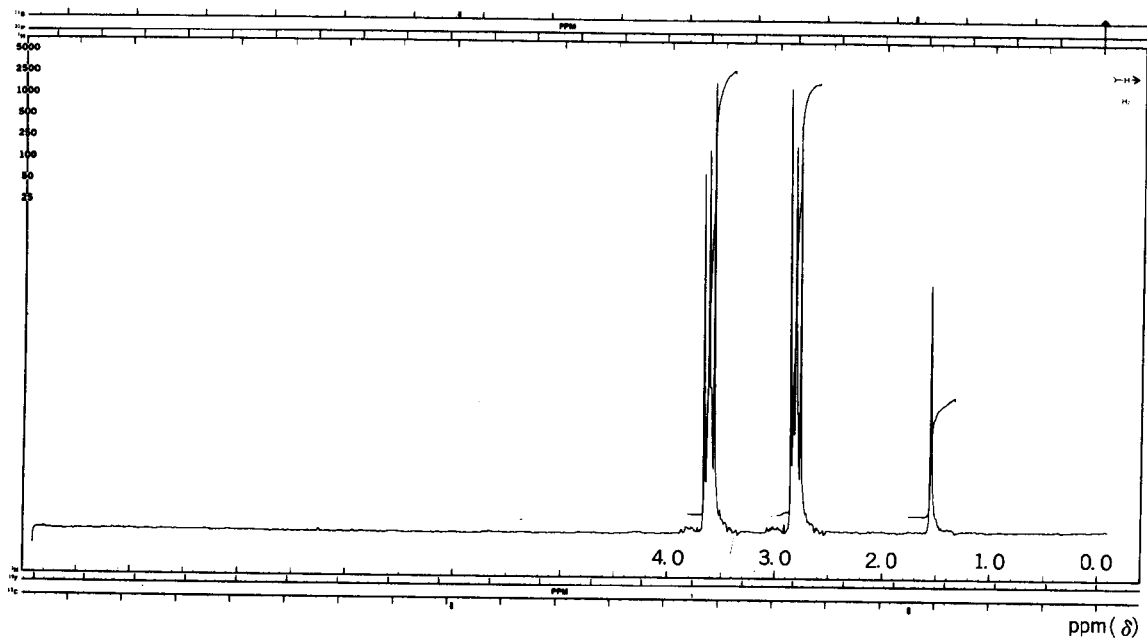


同位体存在量

<i>m/e</i>	<i>M</i> に対する %
86 ( <i>M</i> -1)	40.70
87 ( <i>M</i> )	100.00
88 ( <i>M</i> +1)	4.48
89 ( <i>M</i> +2)	0.29

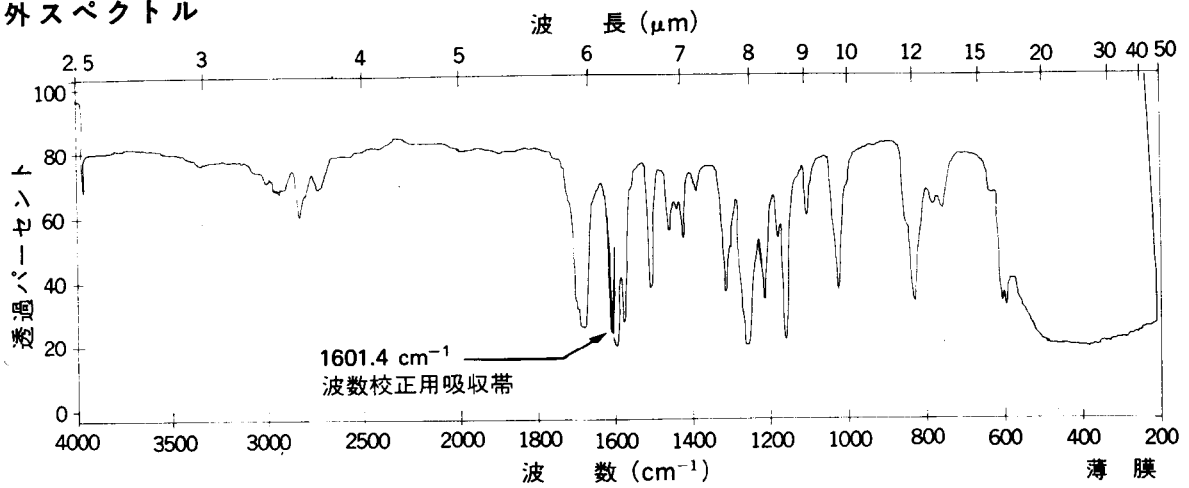
紫外スペクトルデータ  
200 nm 以上で透明

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>, 100 MHz)

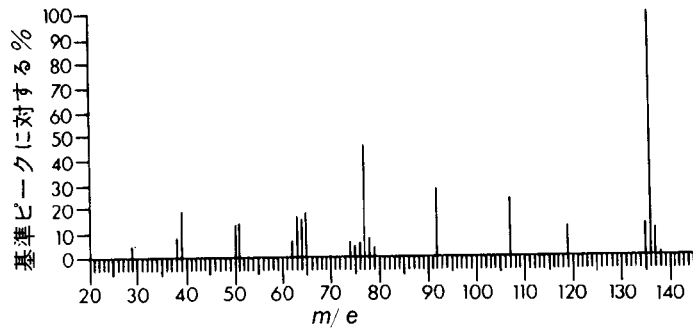


化合物 8・20 (Beilstein Ref.8, 67)

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)



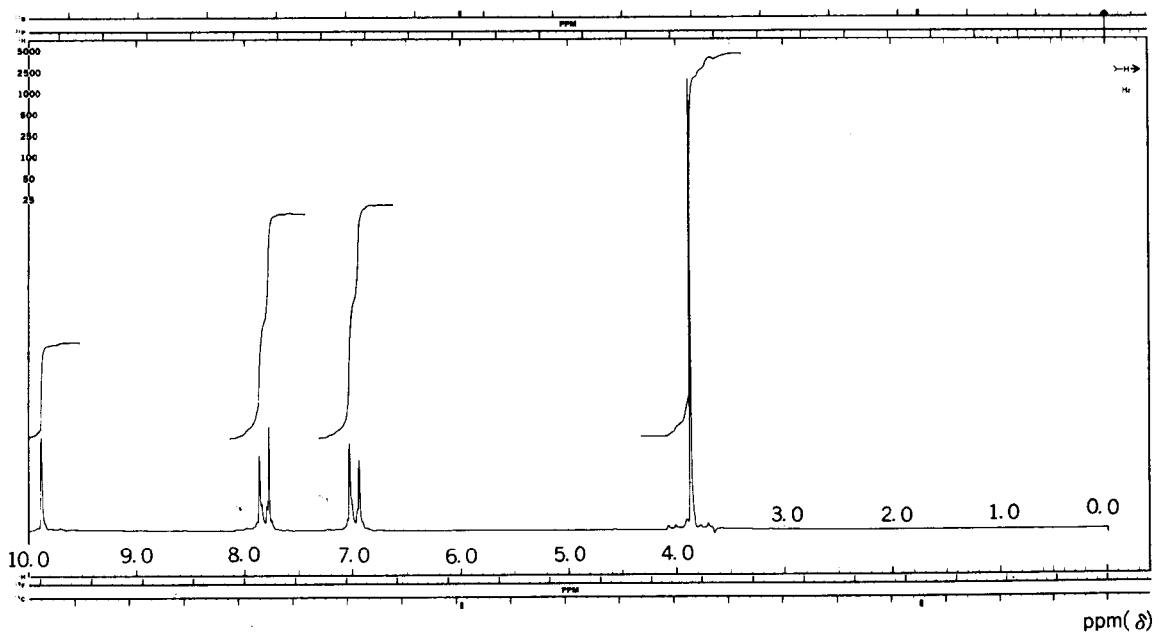
同位体存在量

<i>m/e</i>	<i>M</i> に対する%
135 ( <i>M</i> -1)	14.0
136 ( <i>M</i> )	100.0
137 ( <i>M</i> +1)	11.1
138 ( <i>M</i> +2)	1.1

紫外スペクトルデータ

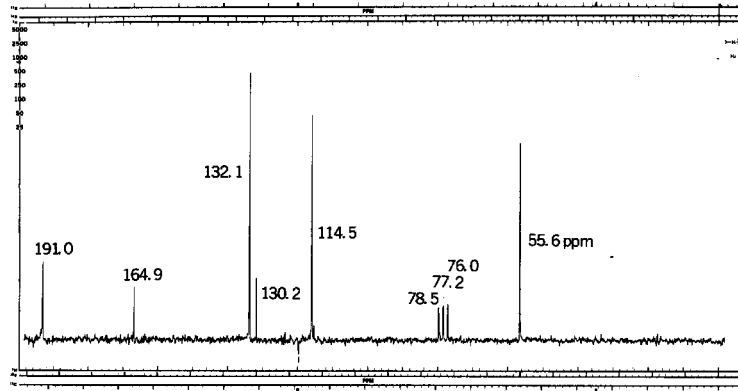
$\lambda_{\max}^{\text{Cyclohexane}}$	$\epsilon_{\max}$
215	21 500
221	20 000
266	25 500
288	8 500
312	90
324	83
360	25

<sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>, 100 MHz)

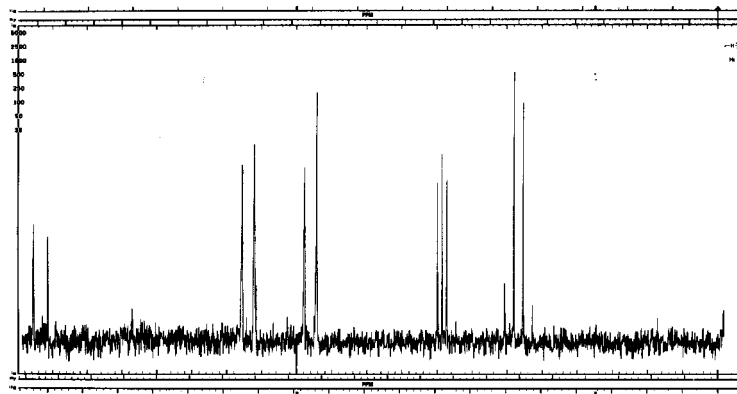


化合物 8・20 (つづき)

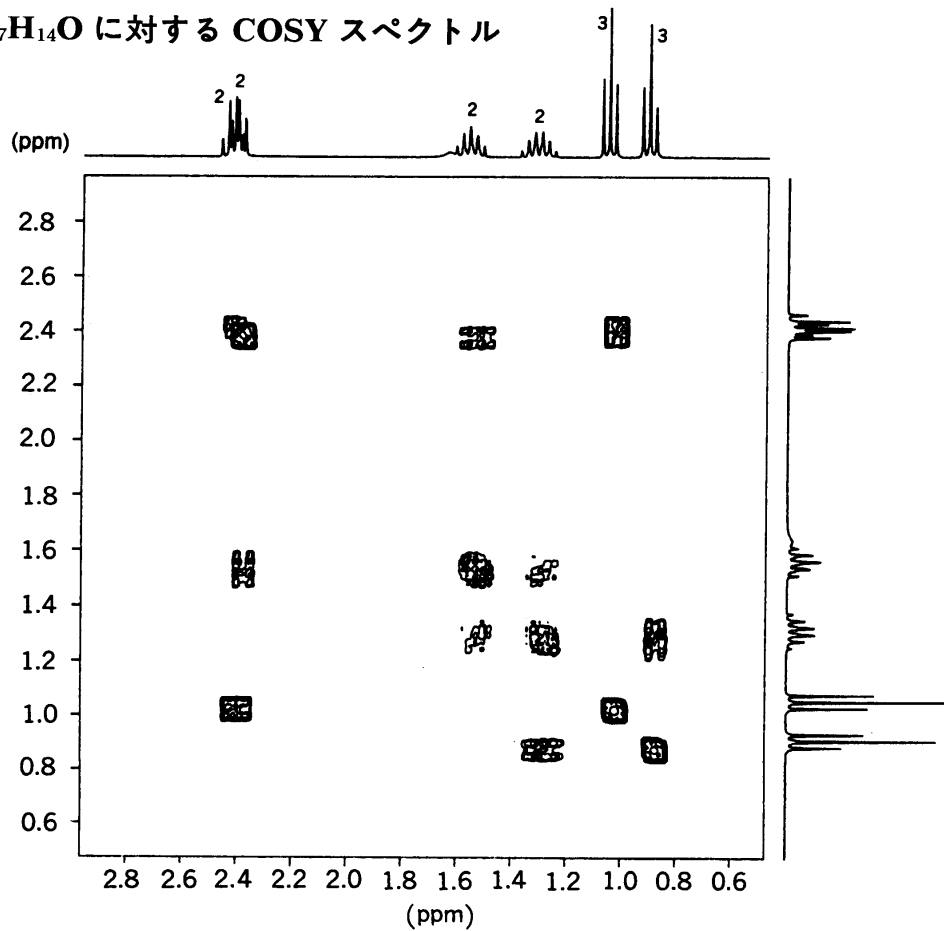
$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (デカップリング)



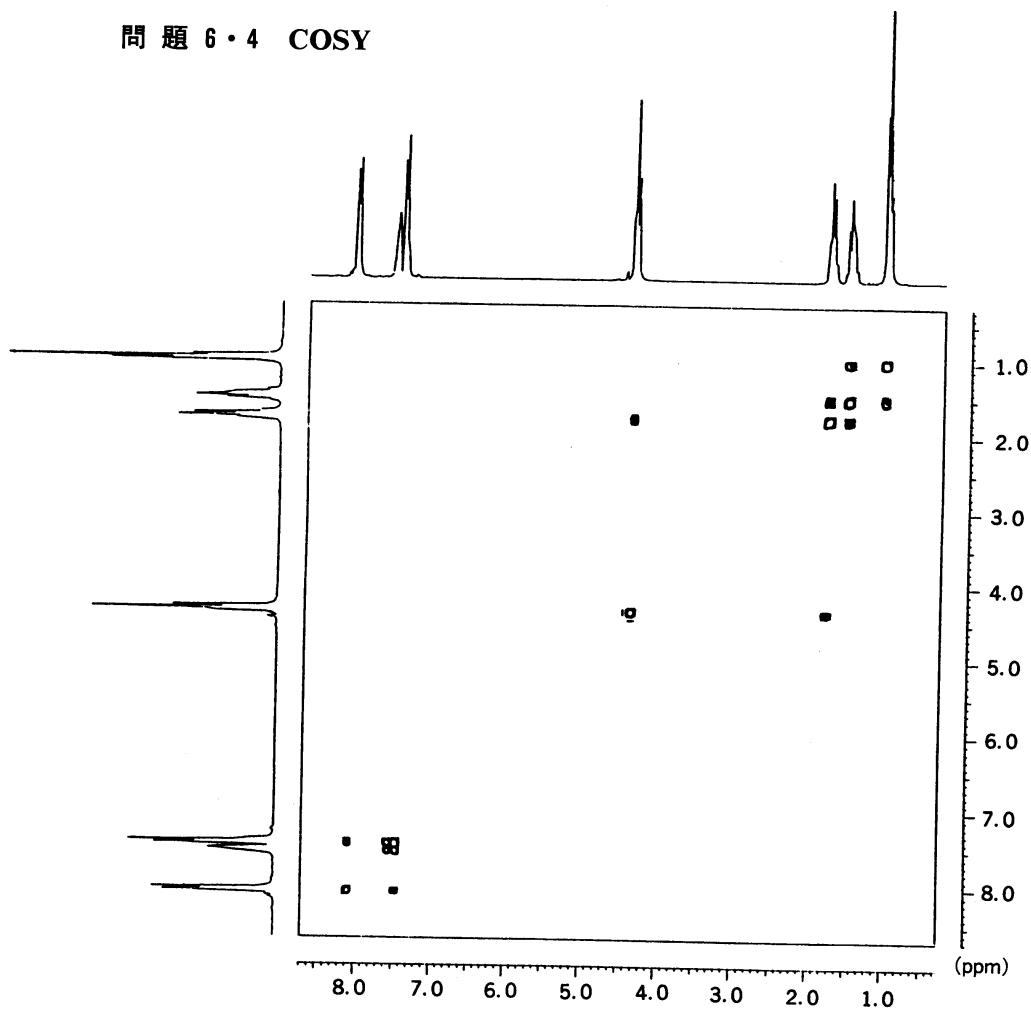
$^{13}\text{C}$  NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



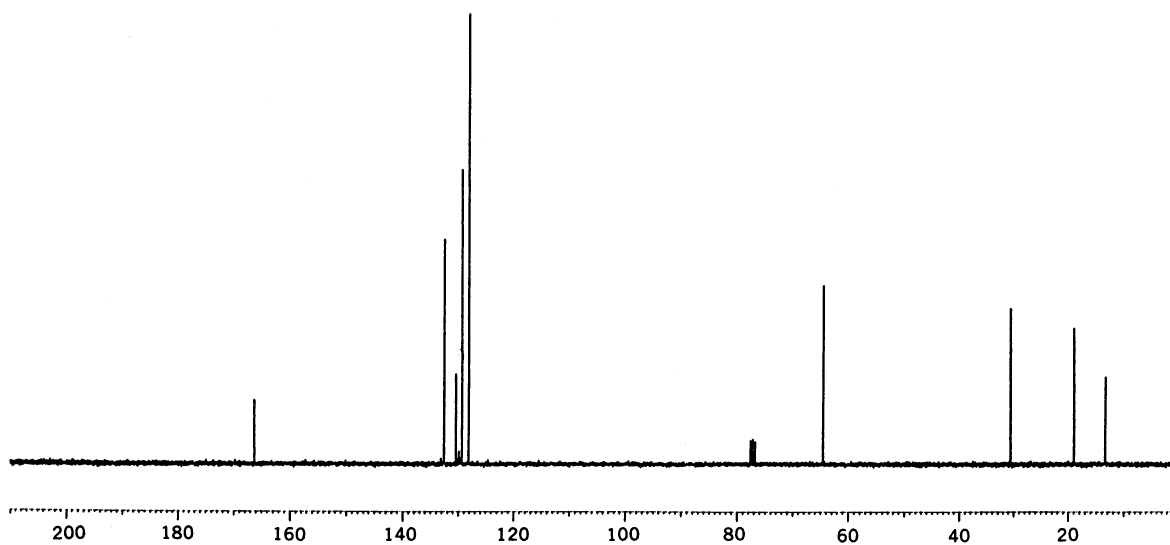
問題 6・3  $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$  に対する COSY スペクトル



問題 6・4 COSY



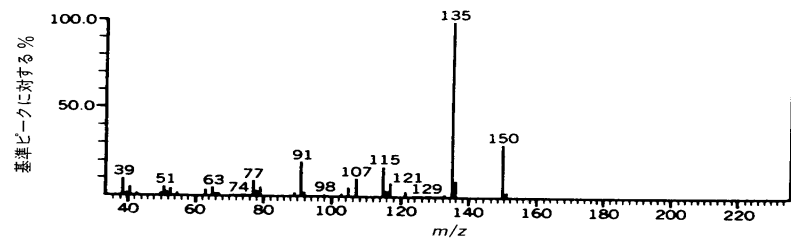
問題 6・4 一次元のプロトンデカップルした <sup>13</sup>C スペクトル



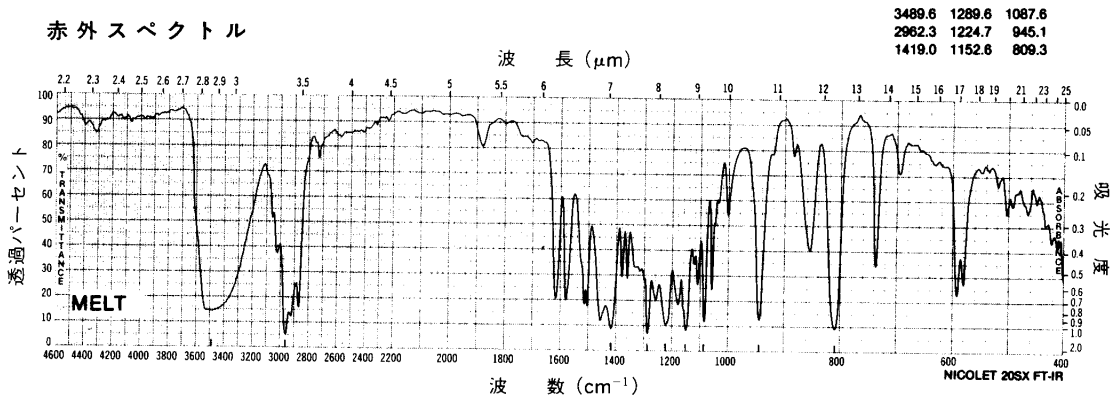


化合物 8. 2

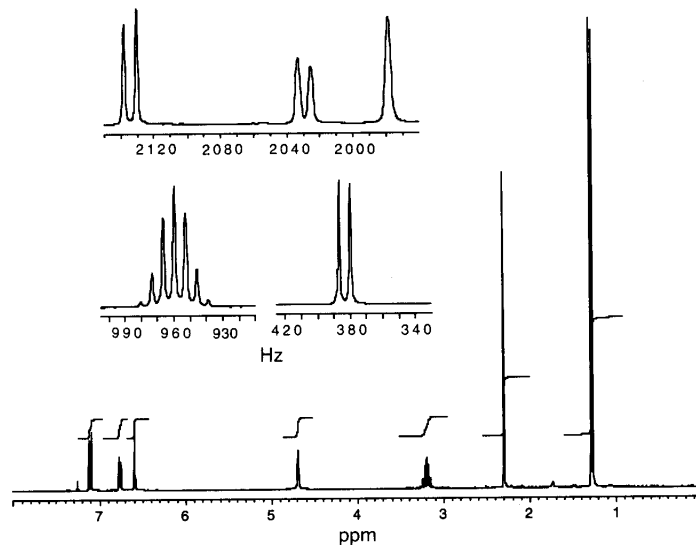
質量スペクトルデータ (相対強度)



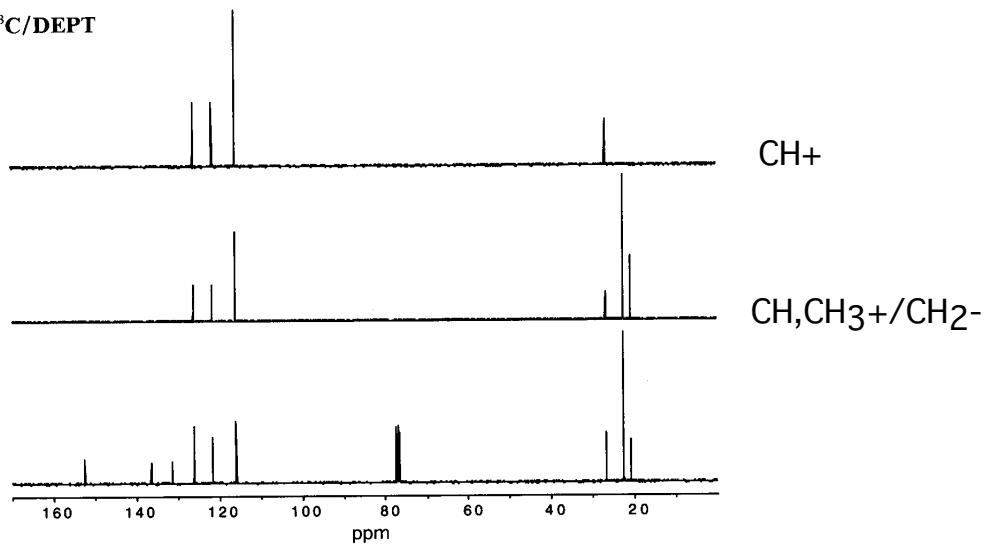
赤外スペクトル

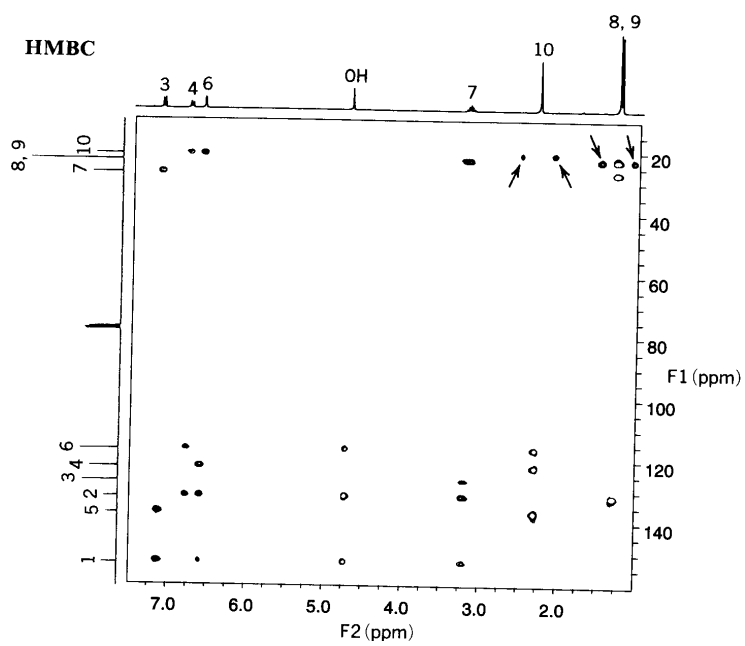
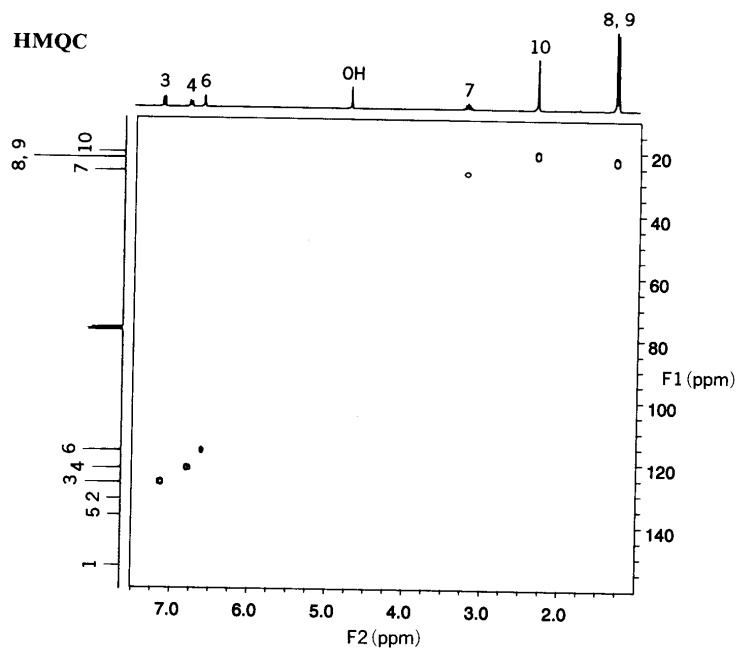
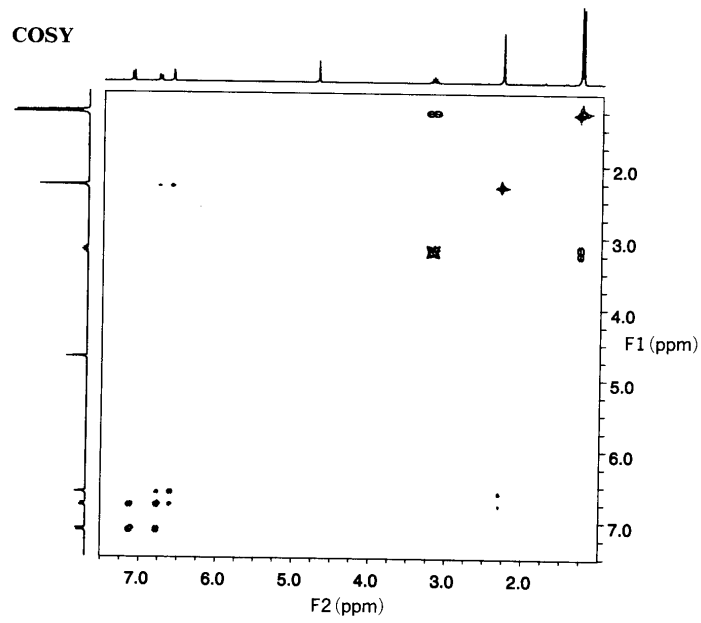


<sup>1</sup>H NMR スペクトル

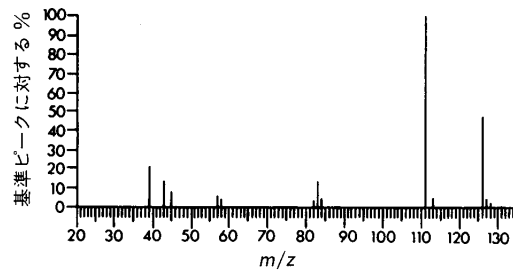


<sup>13</sup>C/DEPT





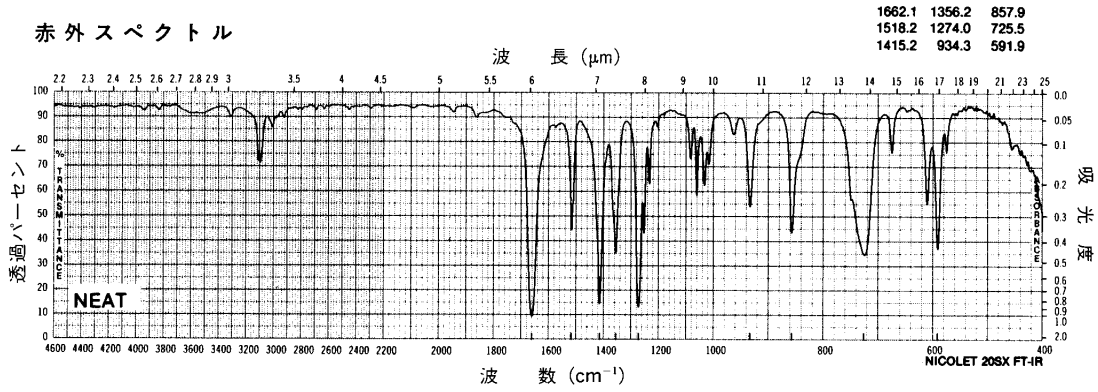
化合物 9・13 質量スペクトルデータ (相対強度)



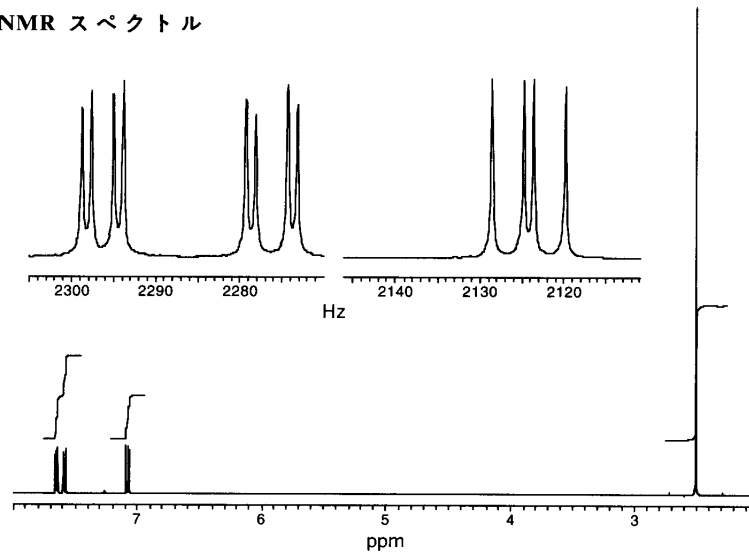
同位体存在量

m/z	M に対する %
126 (M)	100.00
128 (M+2)	4.89

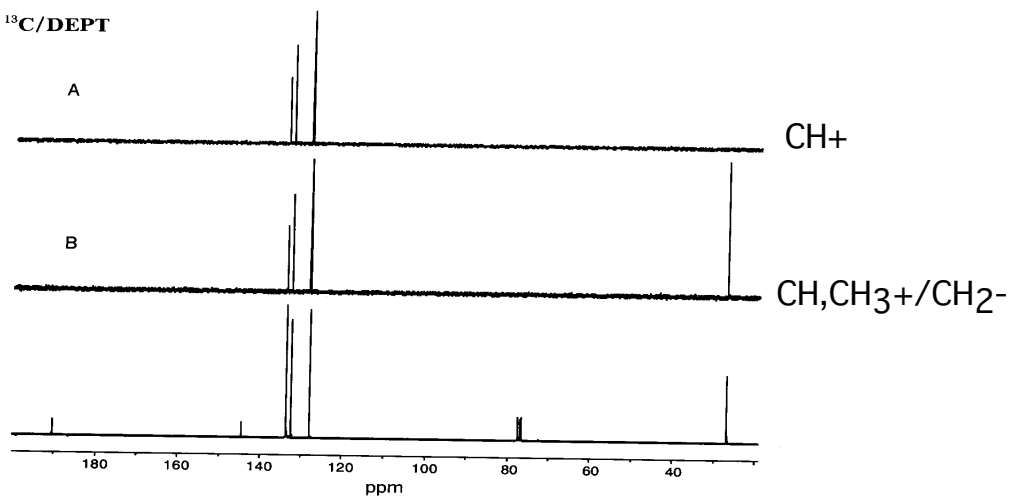
赤外スペクトル



<sup>1</sup>H NMR スペクトル

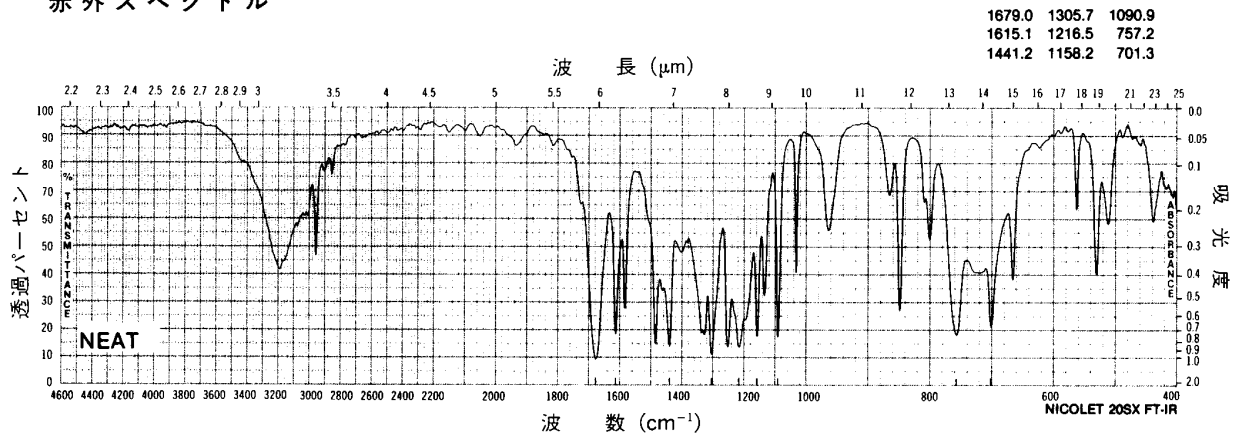


<sup>13</sup>C/DEPT

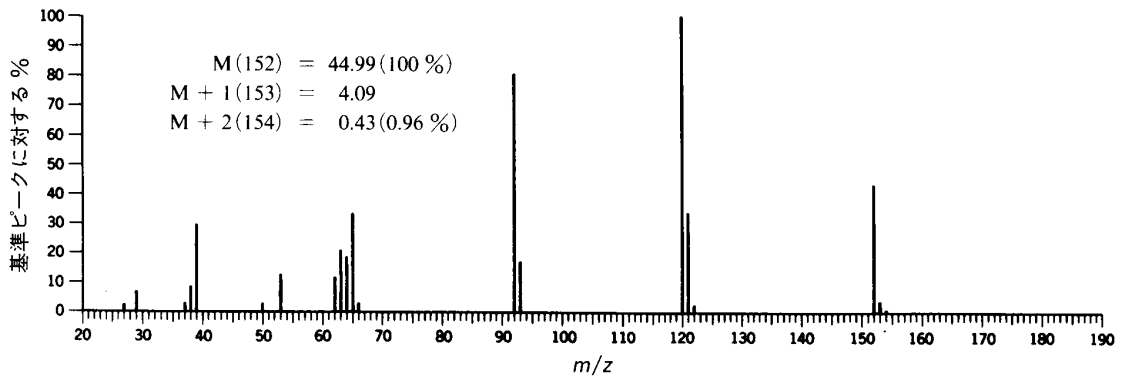


# 化合物 9・21

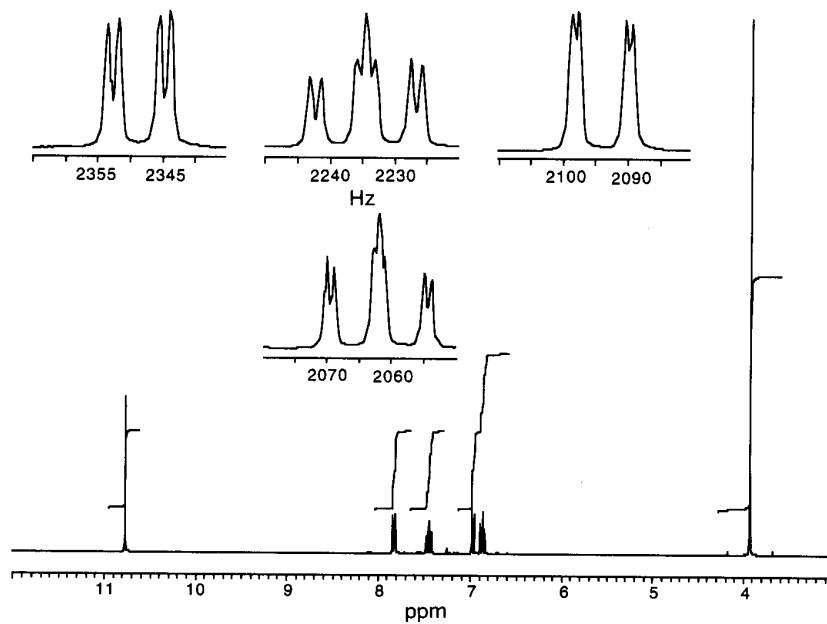
## 赤外スペクトル



## 質量スペクトルデータ (相対強度)

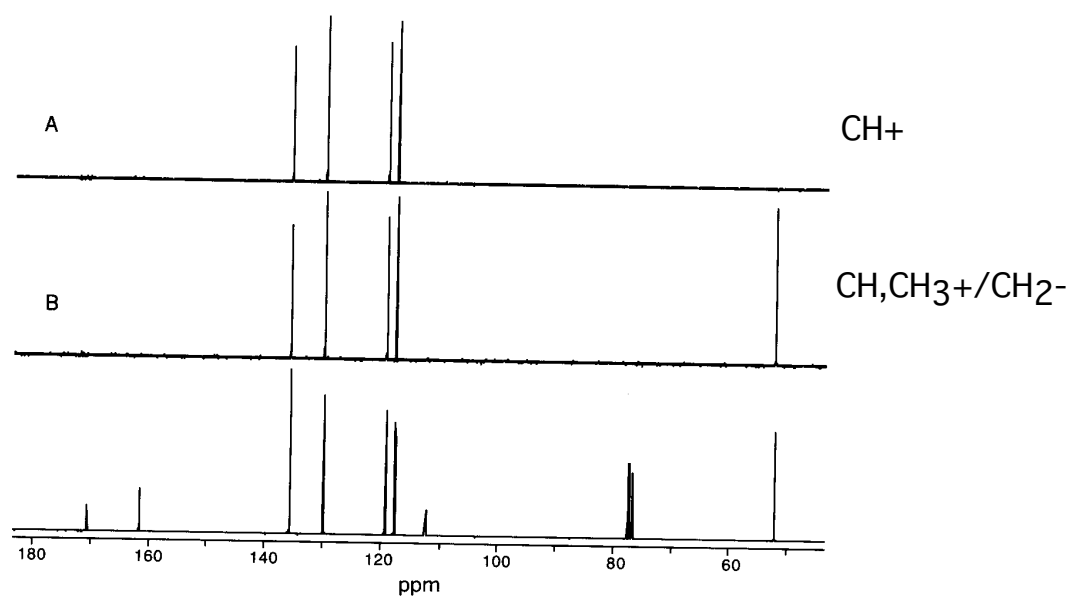


## <sup>1</sup>H NMR スペクトル

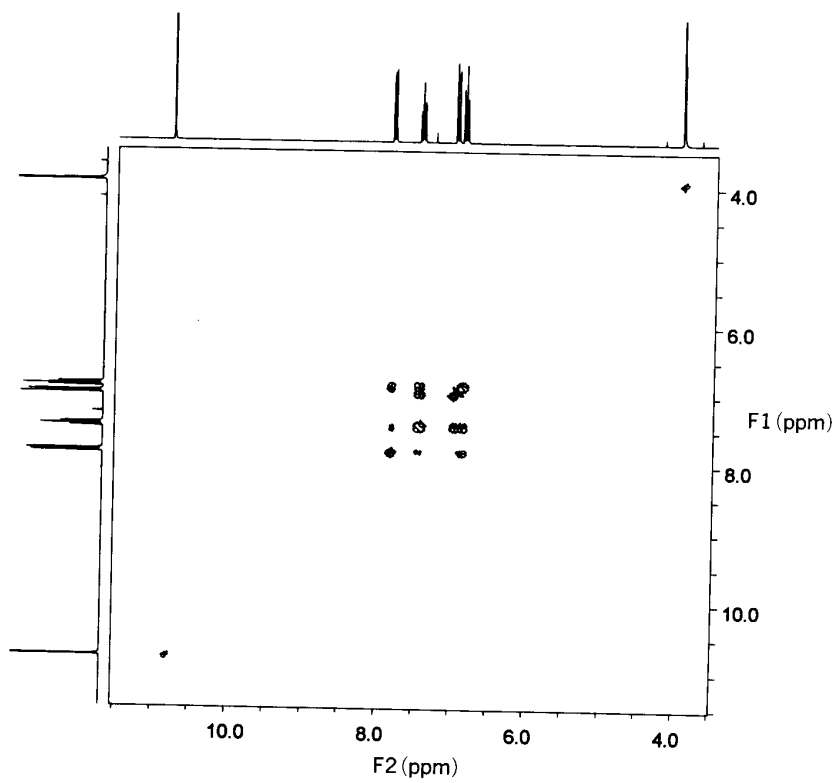


化合物 9・21 (つづき)

<sup>13</sup>C/DEPT

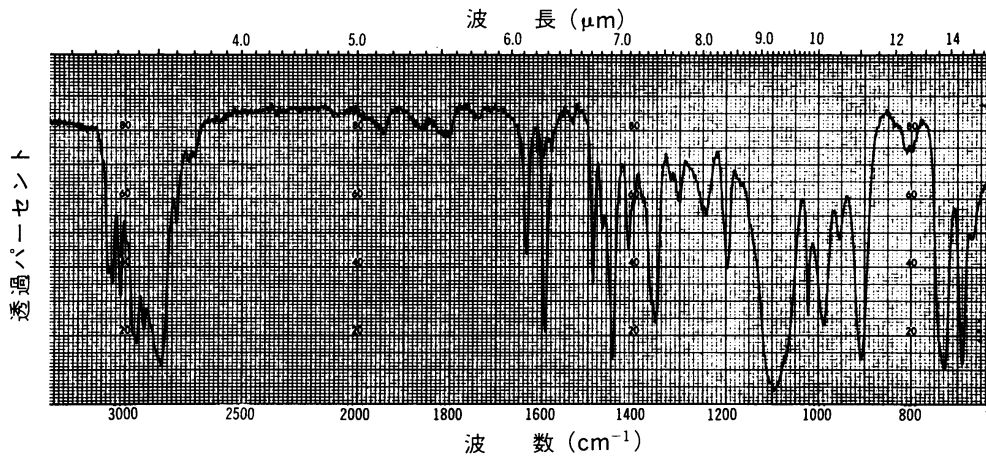


COSY

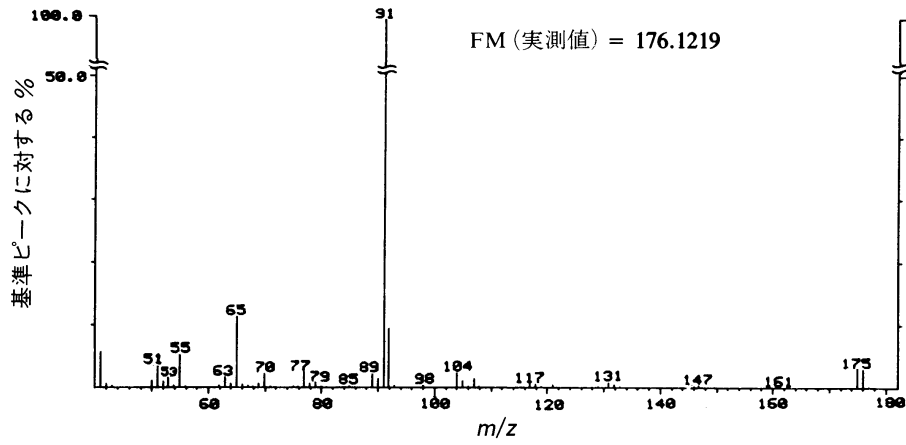


# 化合物 9・34

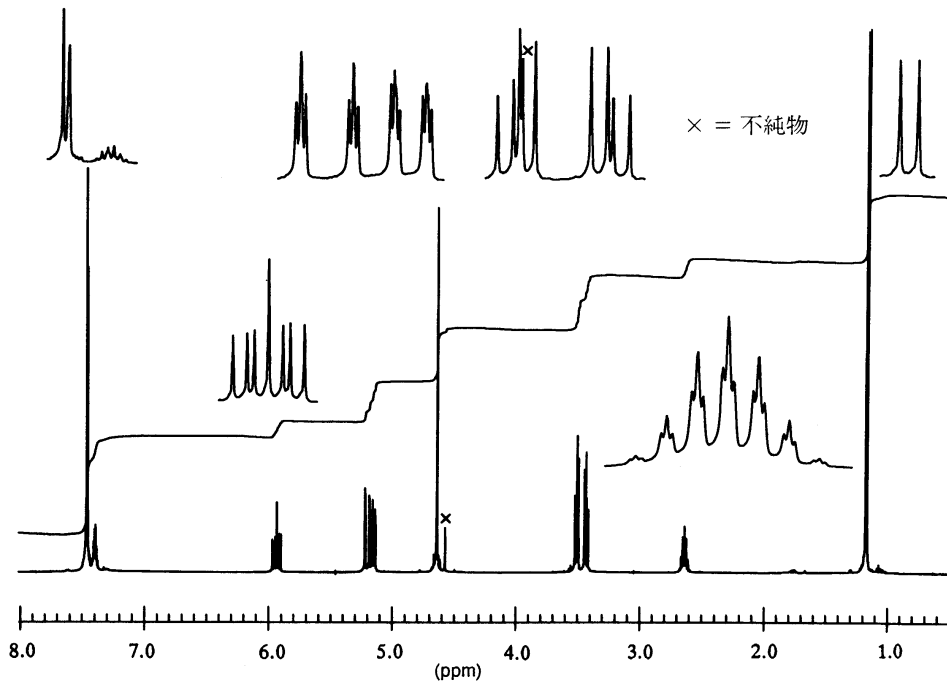
## 赤外スペクトル



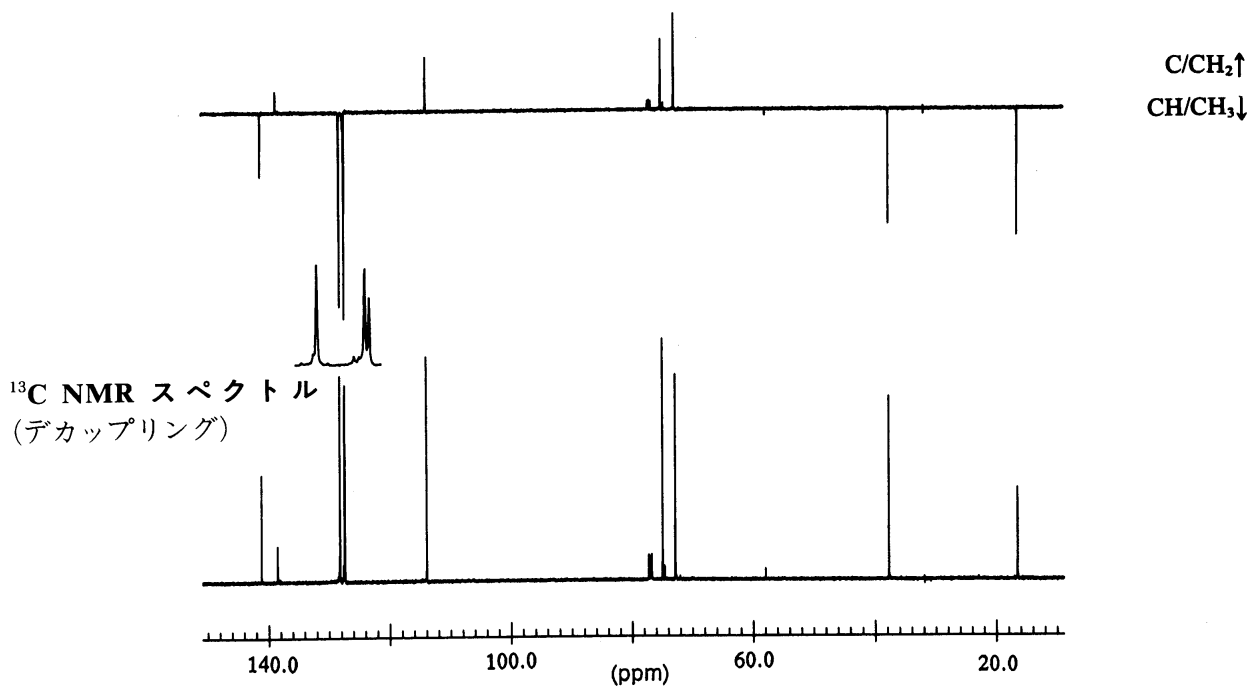
## 質量スペクトルデータ (相対強度)



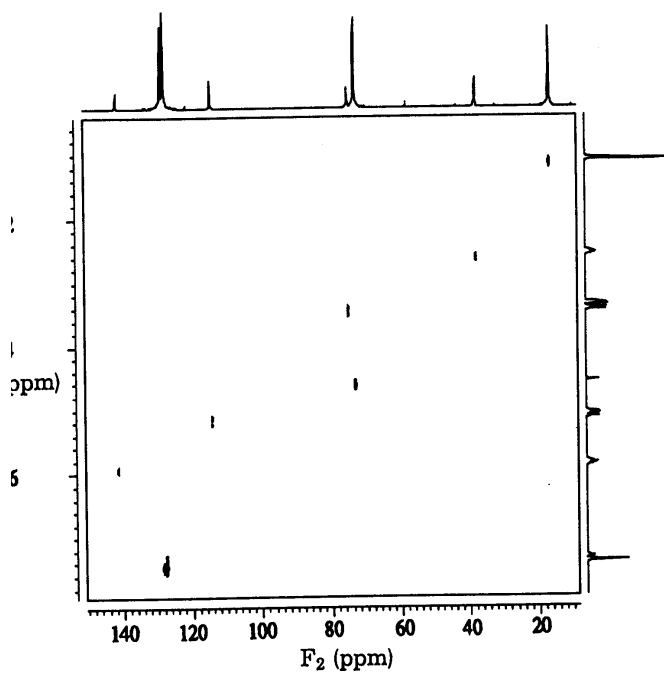
## <sup>1</sup>H NMR スペクトル (溶媒: CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz)



<sup>13</sup>C APT



H C COSY (HETCOR)



H H COSY

