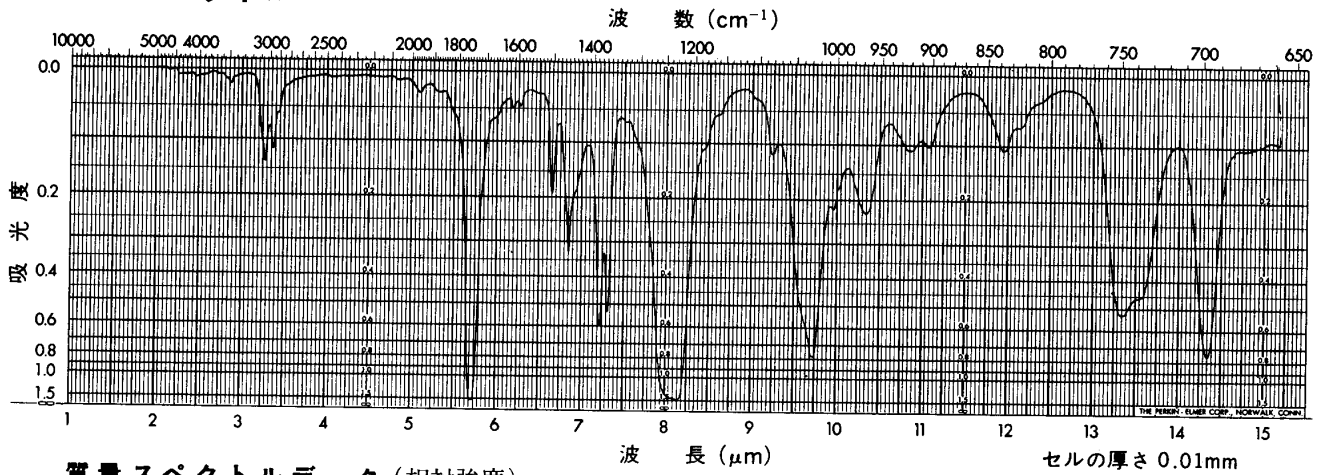
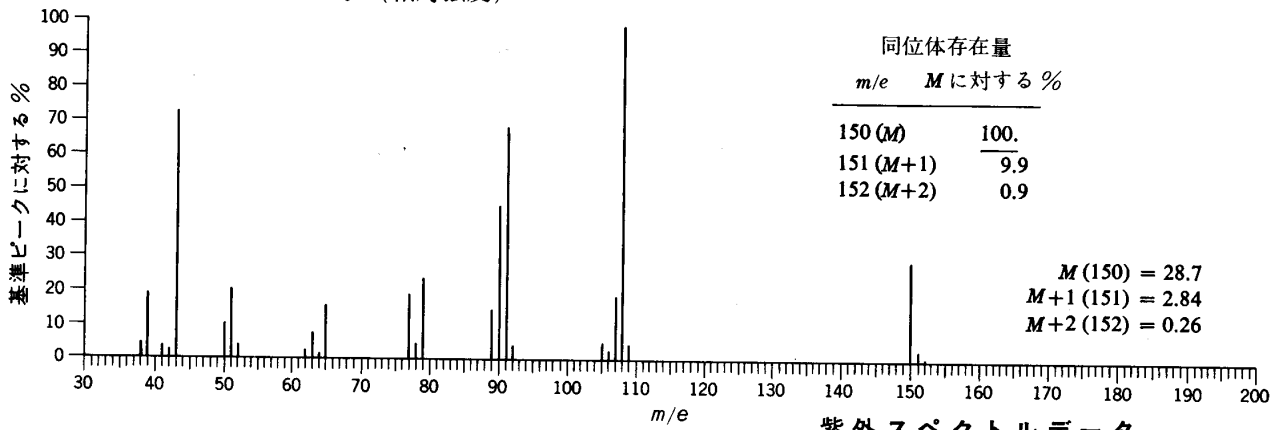


化合物 7・1
赤外スペクトル



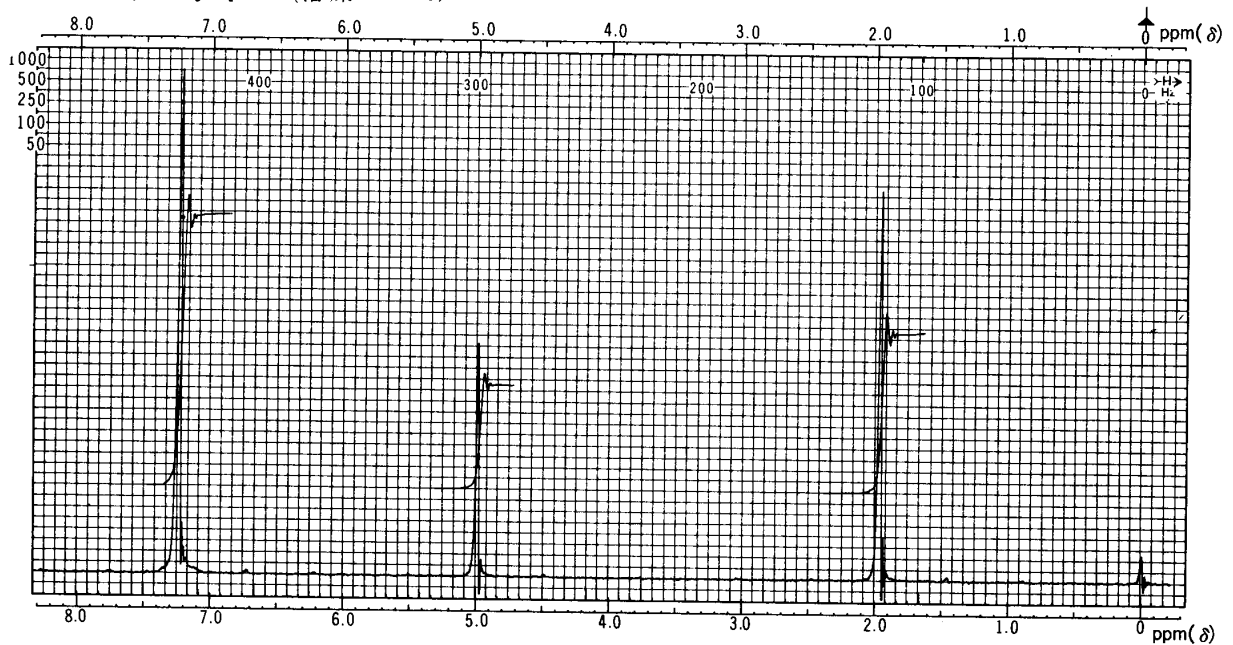
質量スペクトルデータ (相対強度)



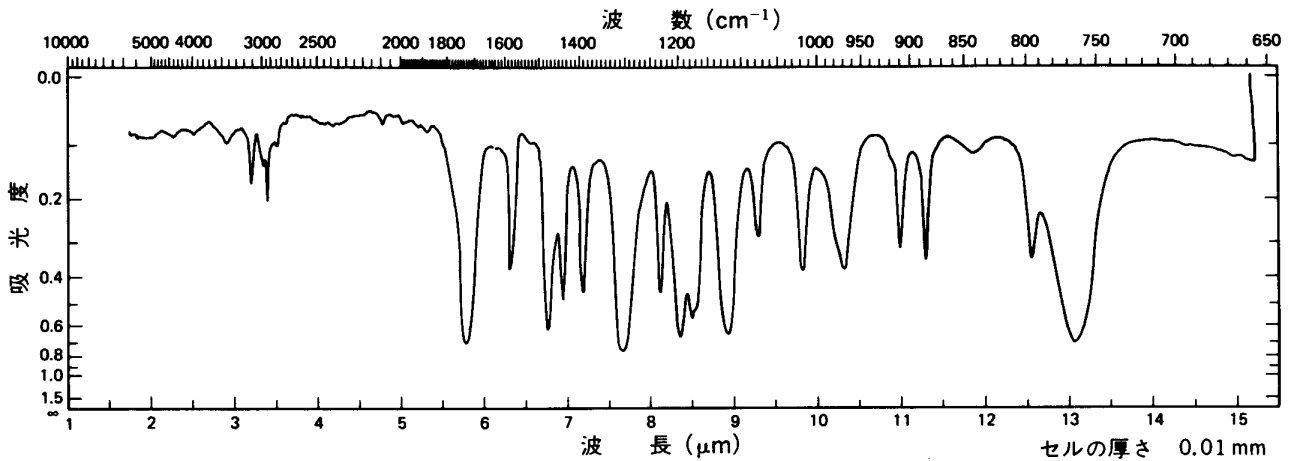
紫外スペクトルデータ

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

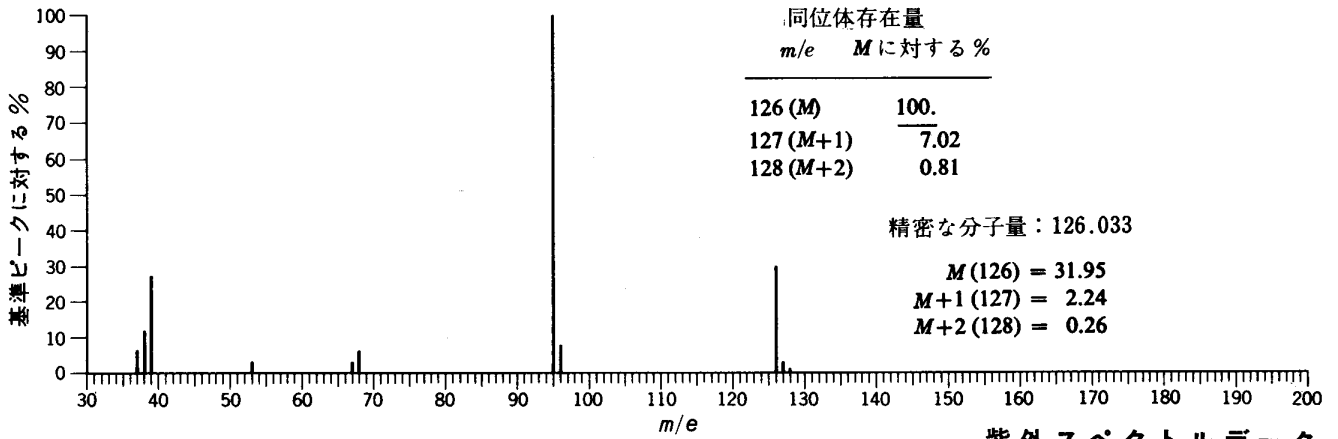
¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)



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)

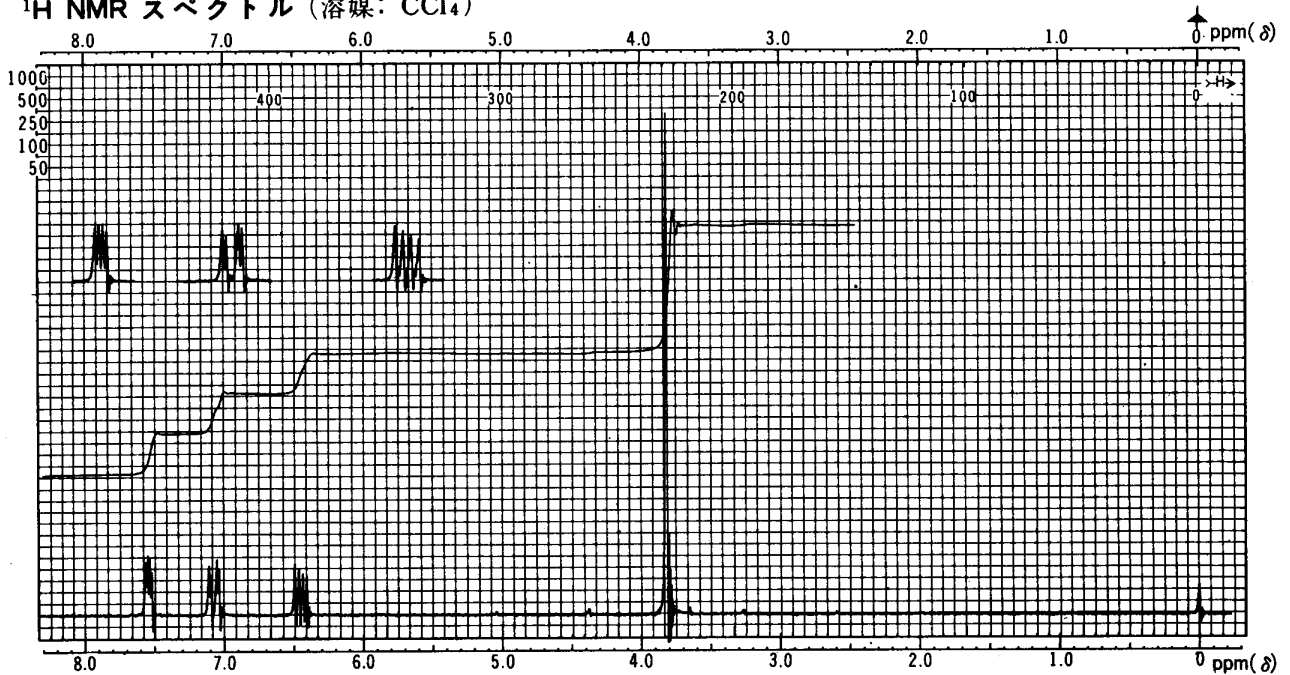


紫外スペクトルデータ

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

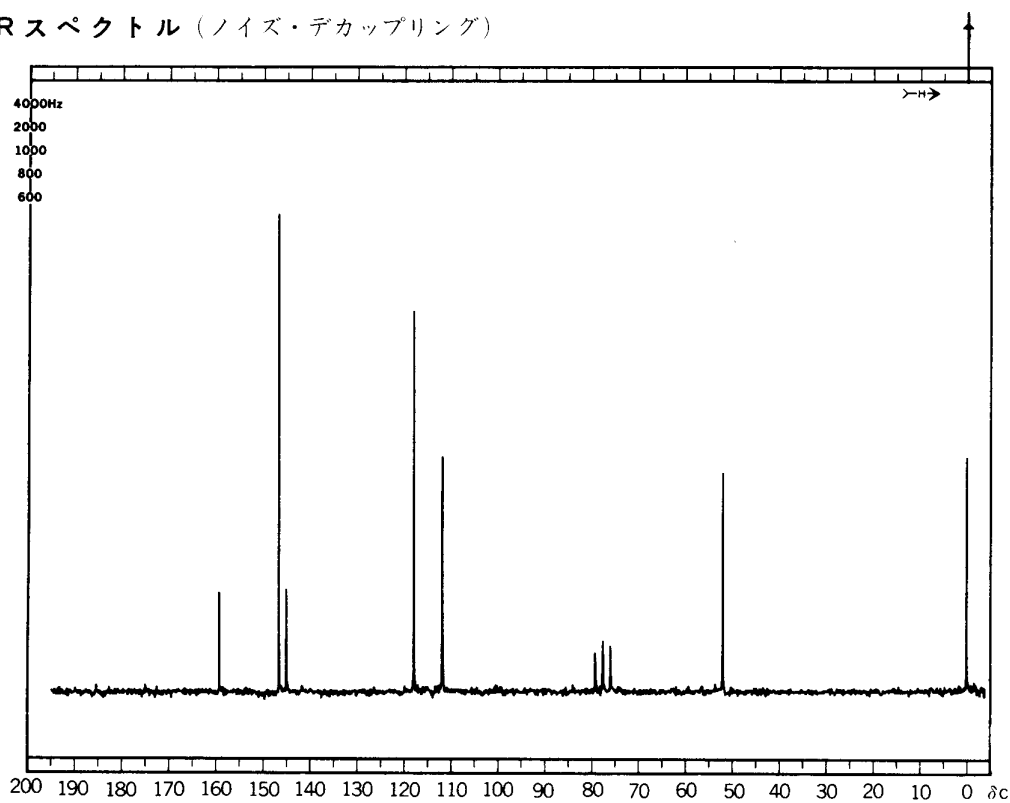
(s) = 肩

¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)

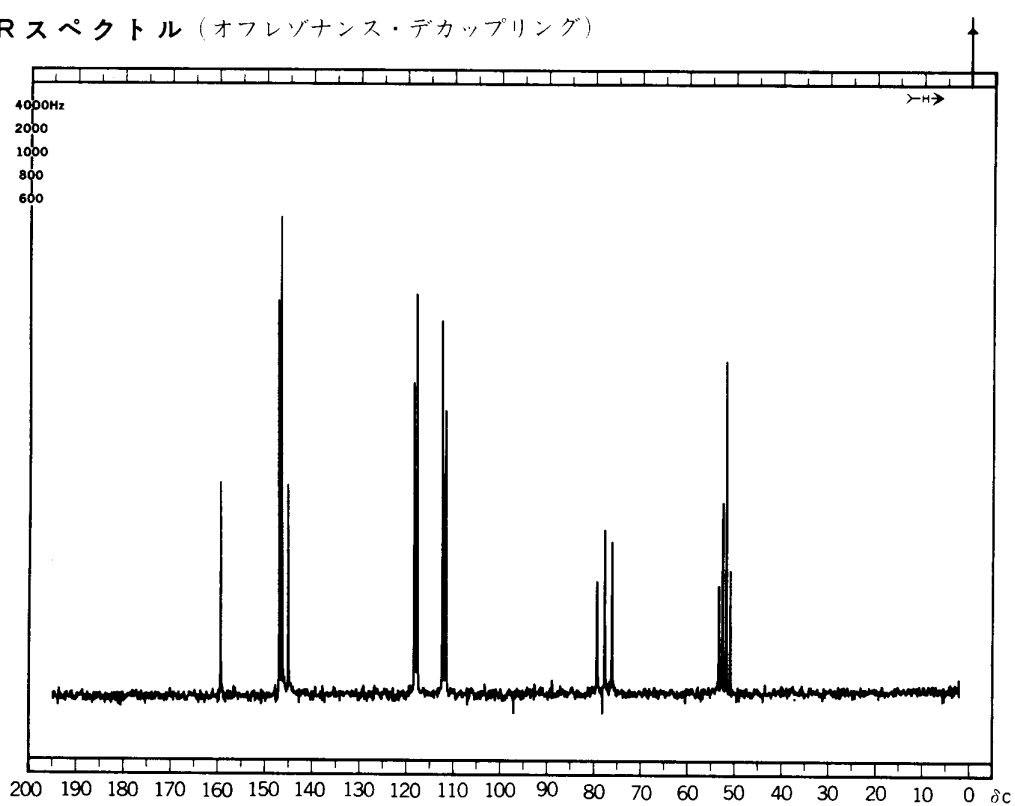


化合物 7・2 (つづき)

^{13}C NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)

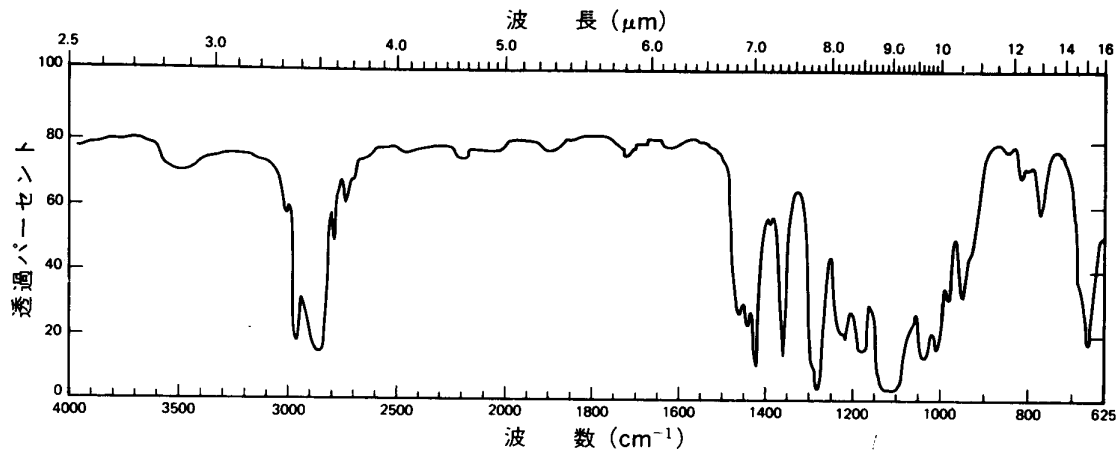


^{13}C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

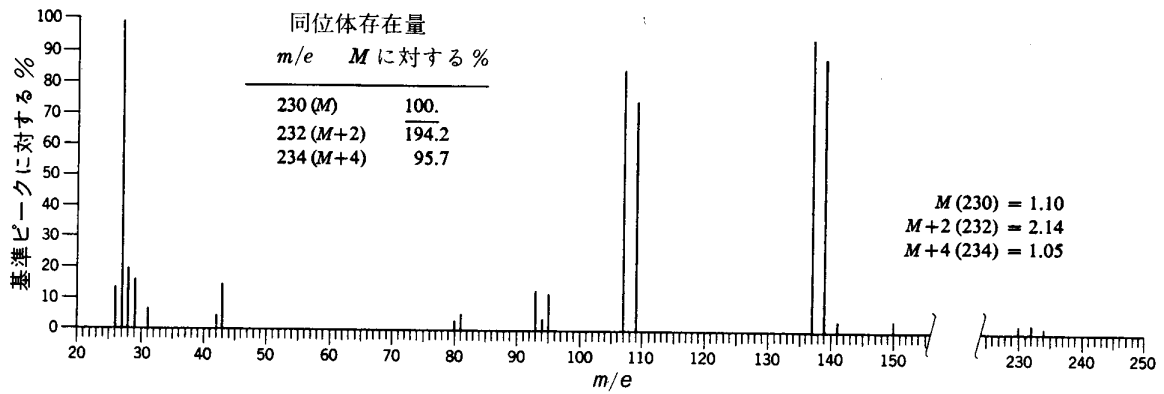


化合物 7・3

赤外スペクトル



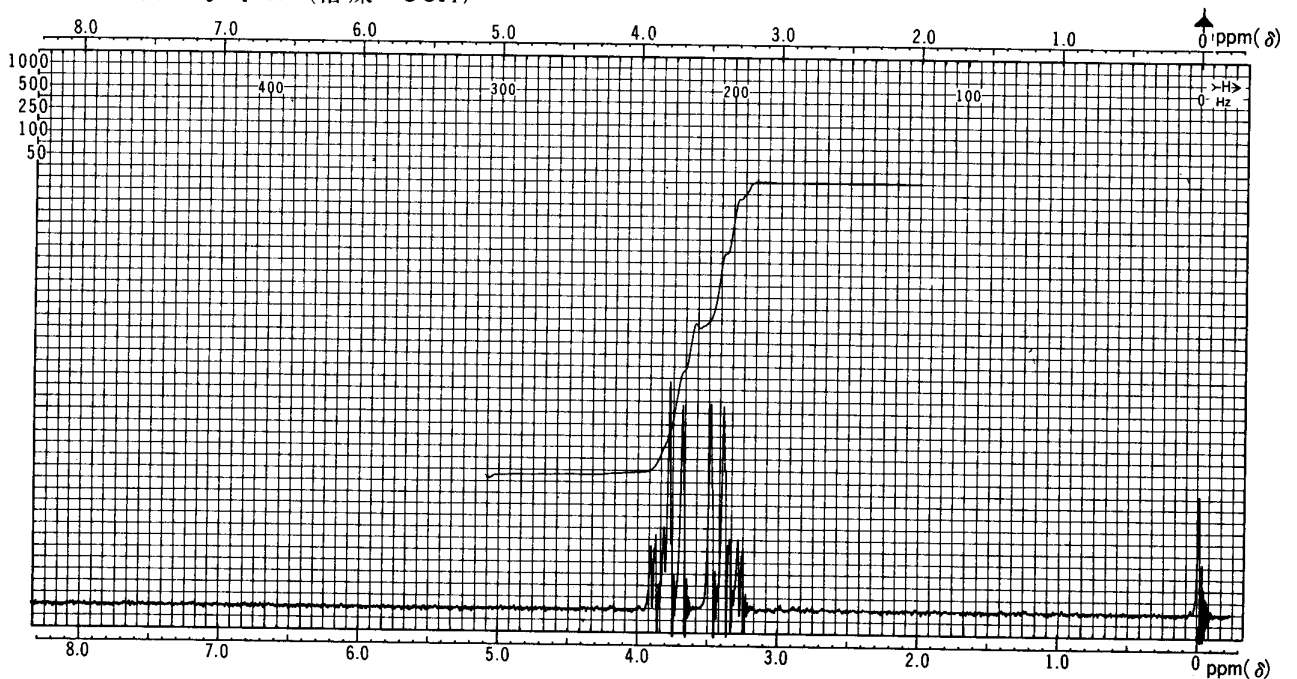
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

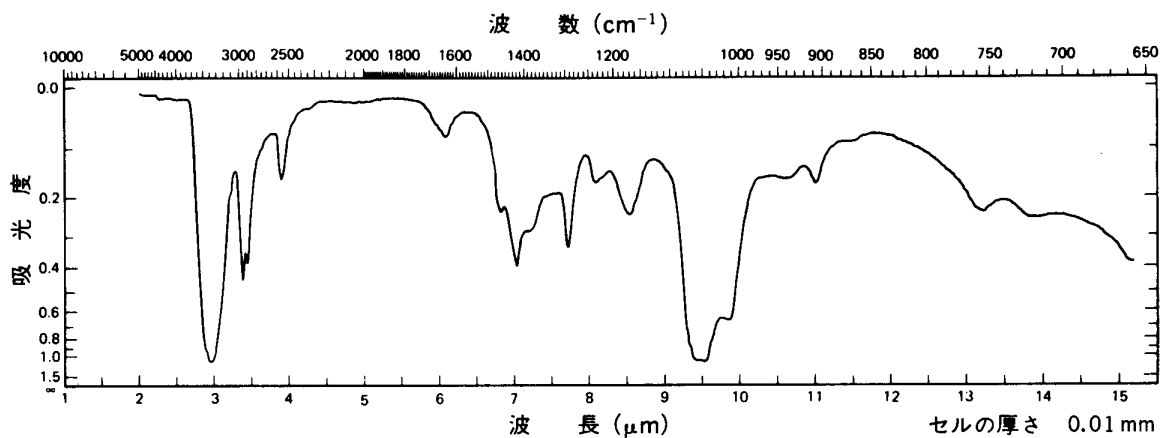
λ_{max}^{EtOH}	ϵ_{max}
305 (変曲点)	1.5

¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)

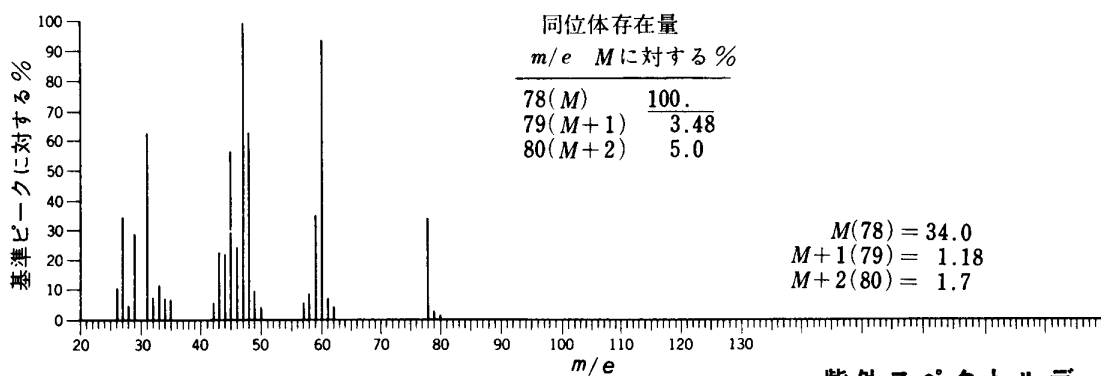


化合物 7・4

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

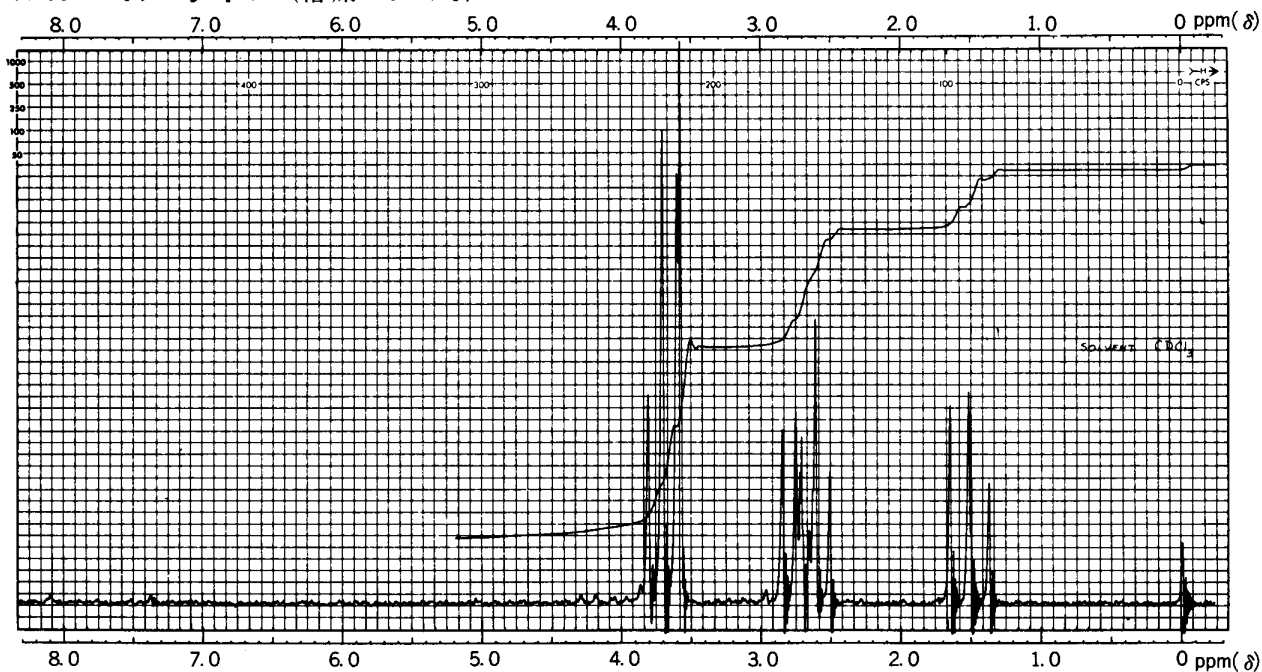


紫外スペクトルデータ

λ_{infl}^{EtOH}	ϵ_{infl}
232	136

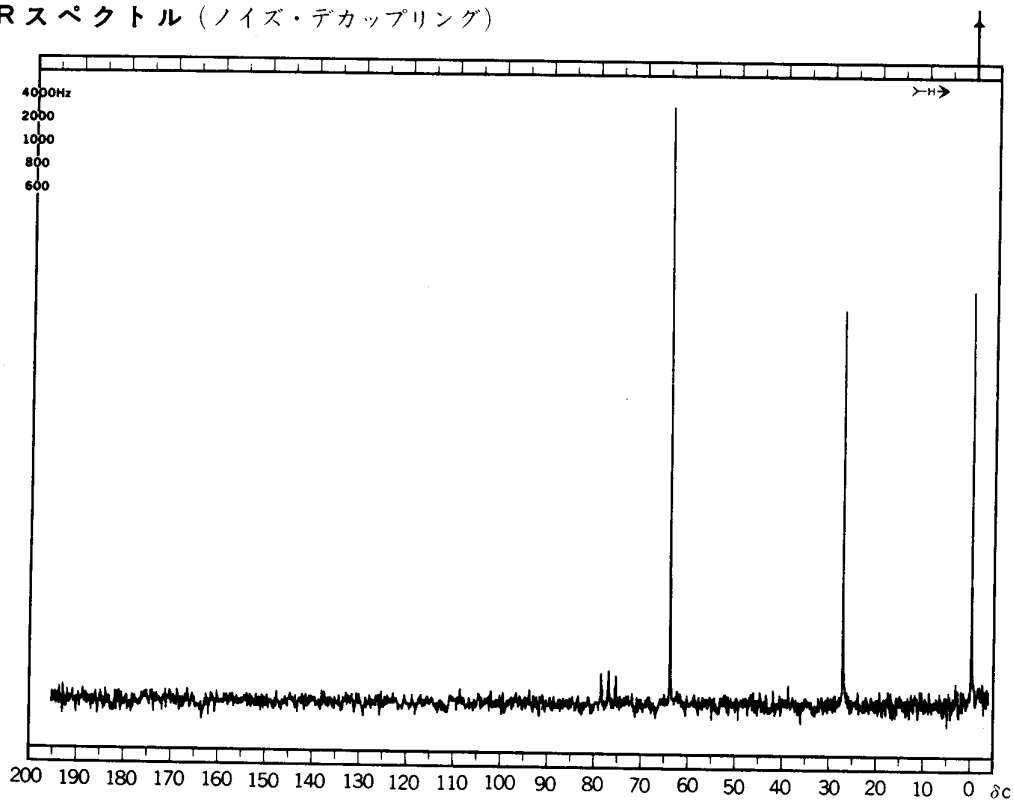
$infl$ = 変曲点

1H NMR スペクトル (溶媒: $CDCl_3$)

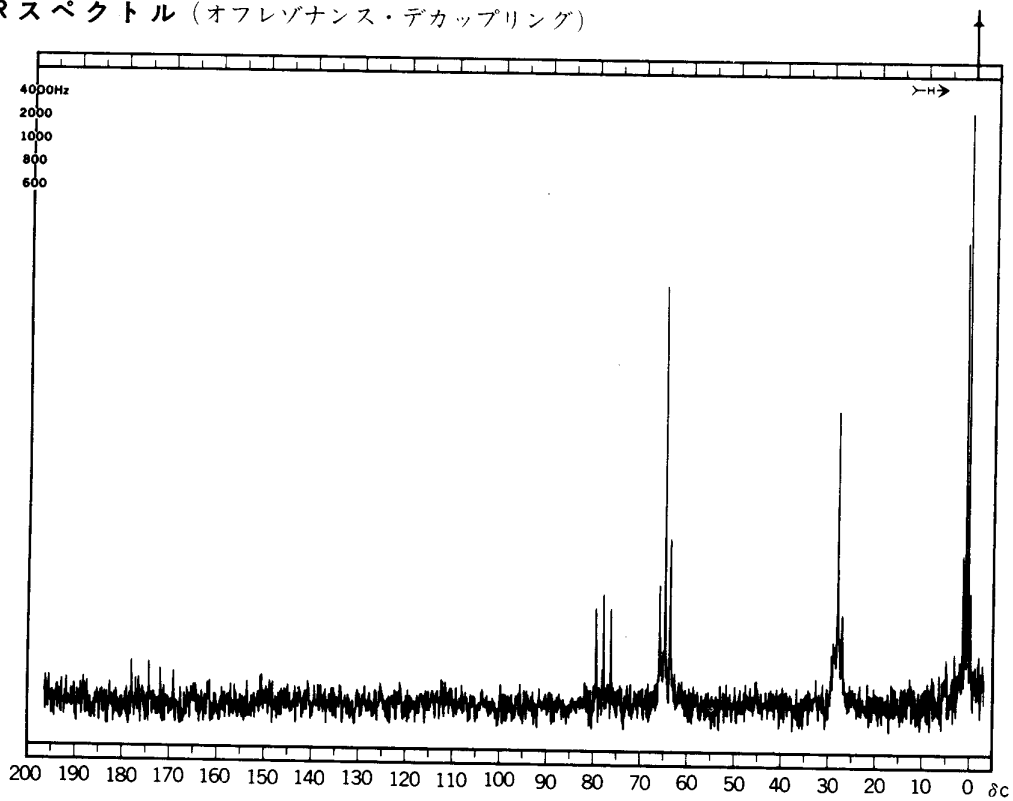


化合物 7・4 (つづき)

^{13}C NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)

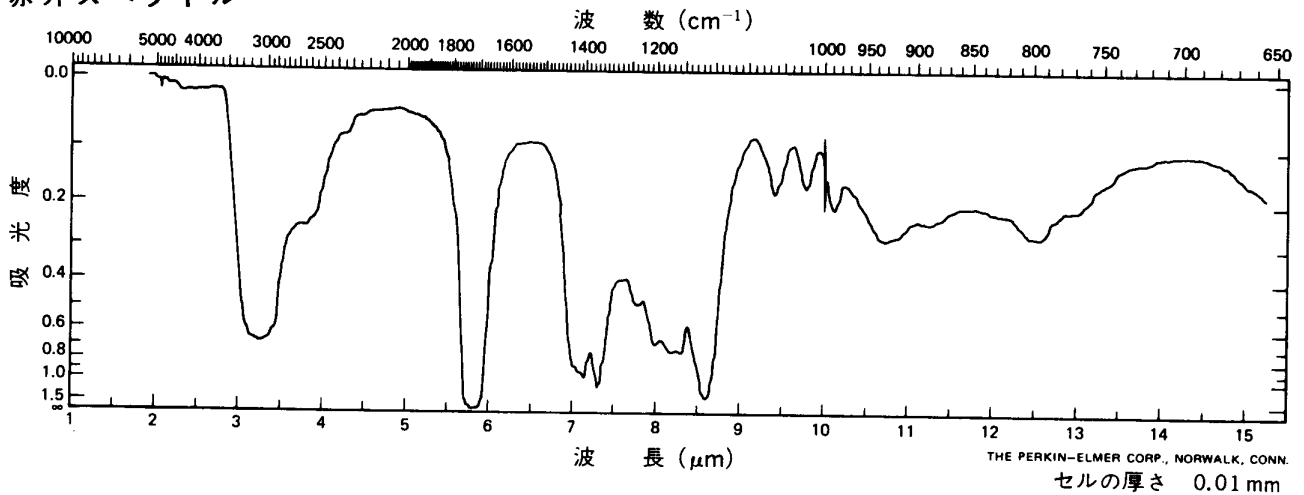


^{13}C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

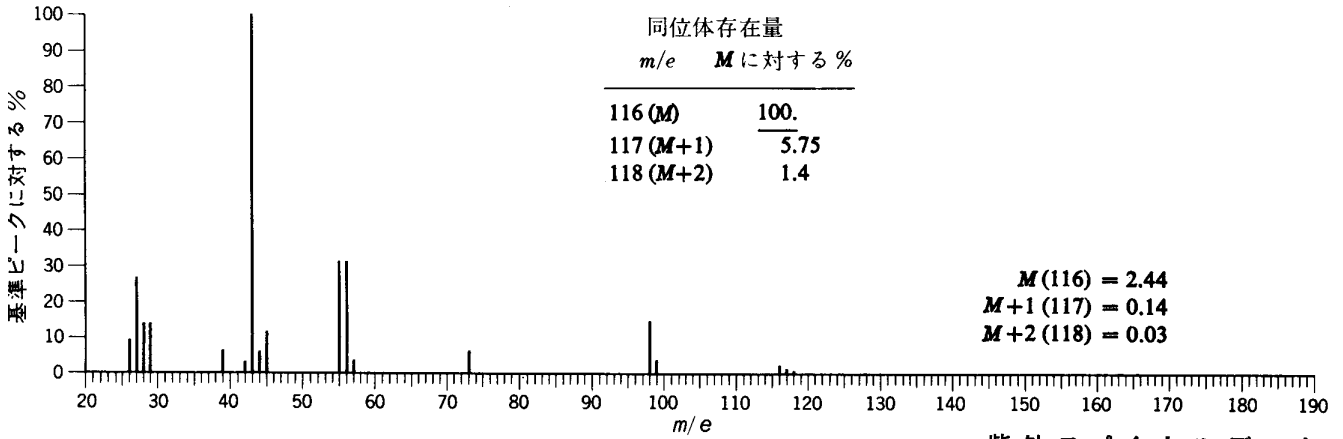


化合物 7・6

赤外スペクトル



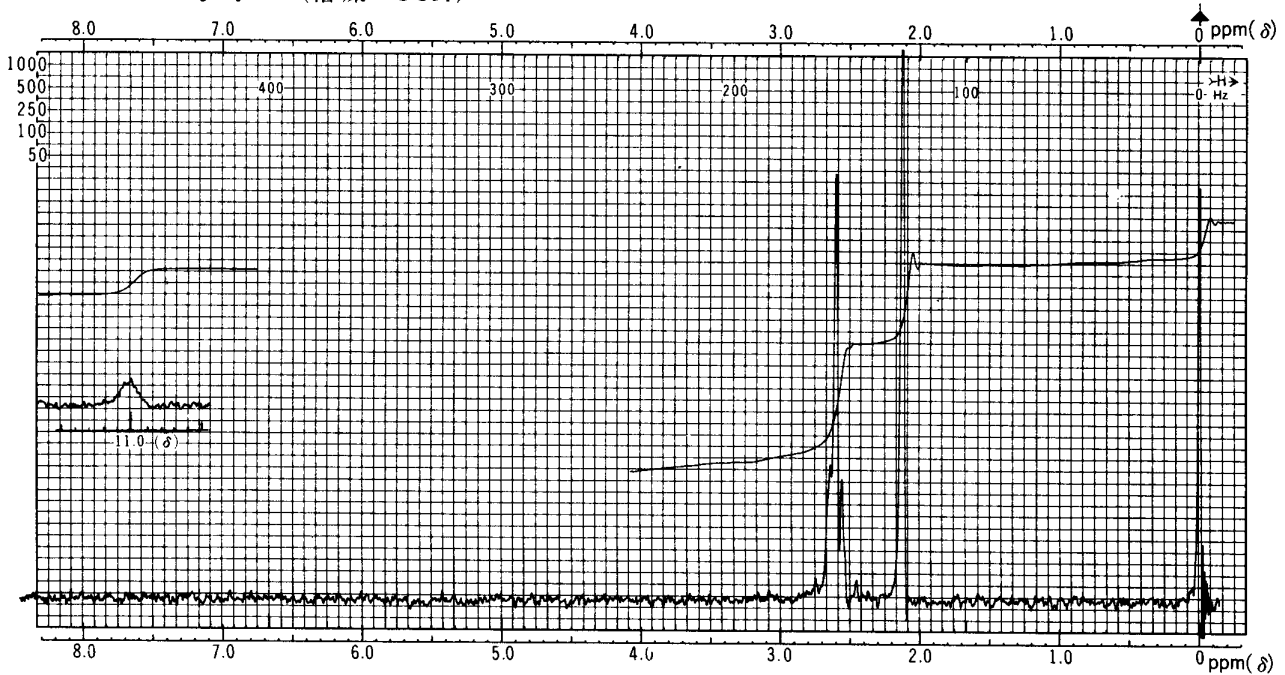
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

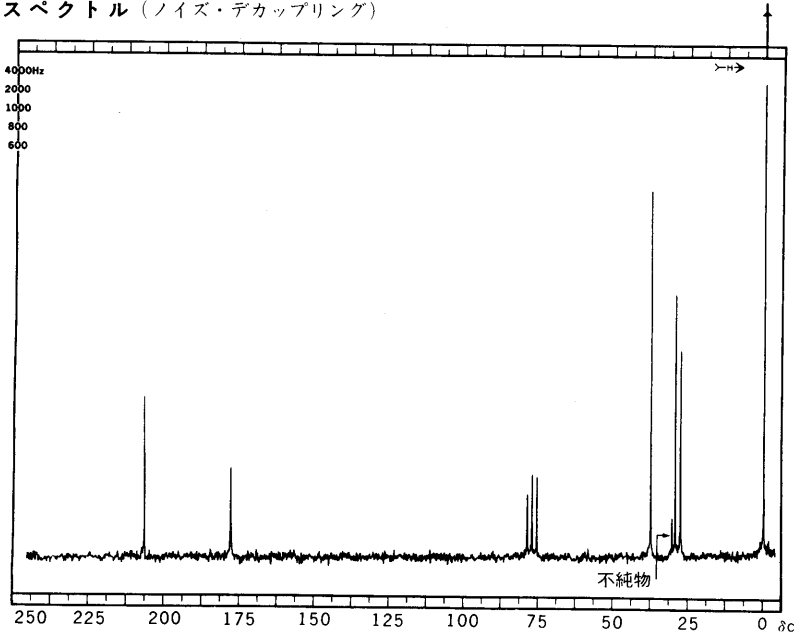
λ_{\max}^{OH}	$\log \epsilon_{\max}$
262	1.5

¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)

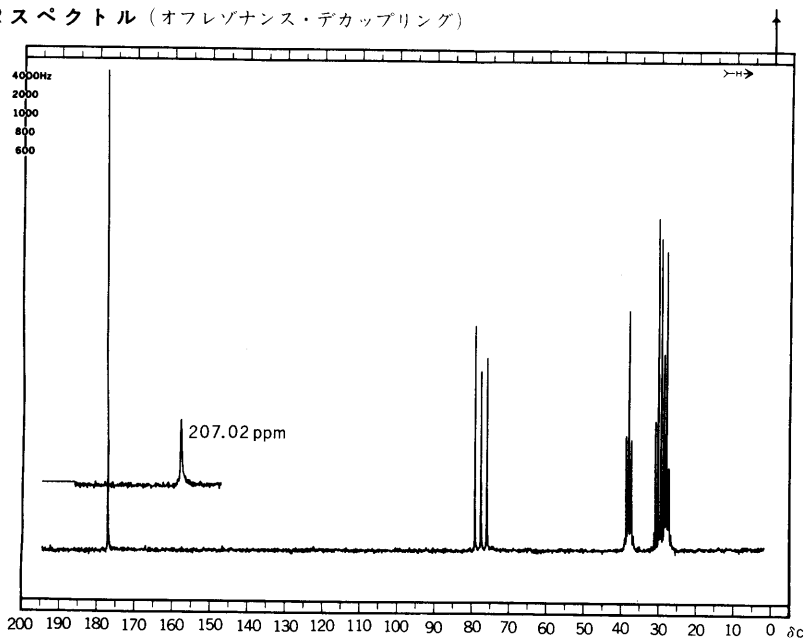


化合物 7・6 (つづき)

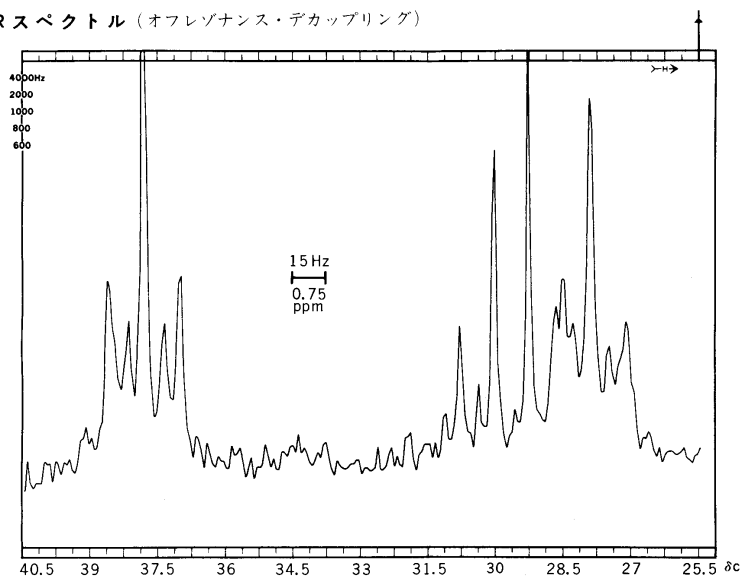
^{13}C NMR スペクトル (ノイズ・デカップリング)



^{13}C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

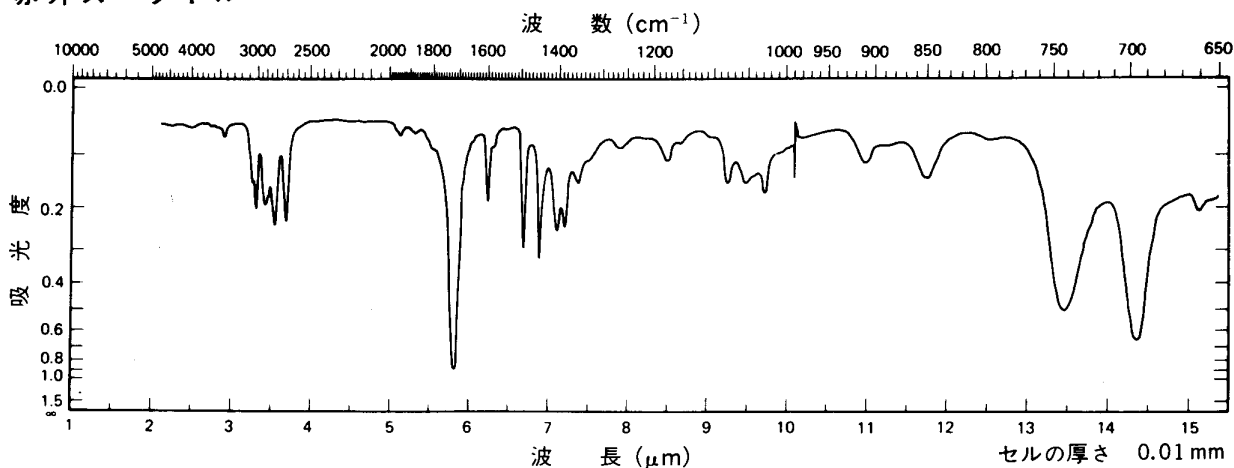


^{13}C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)

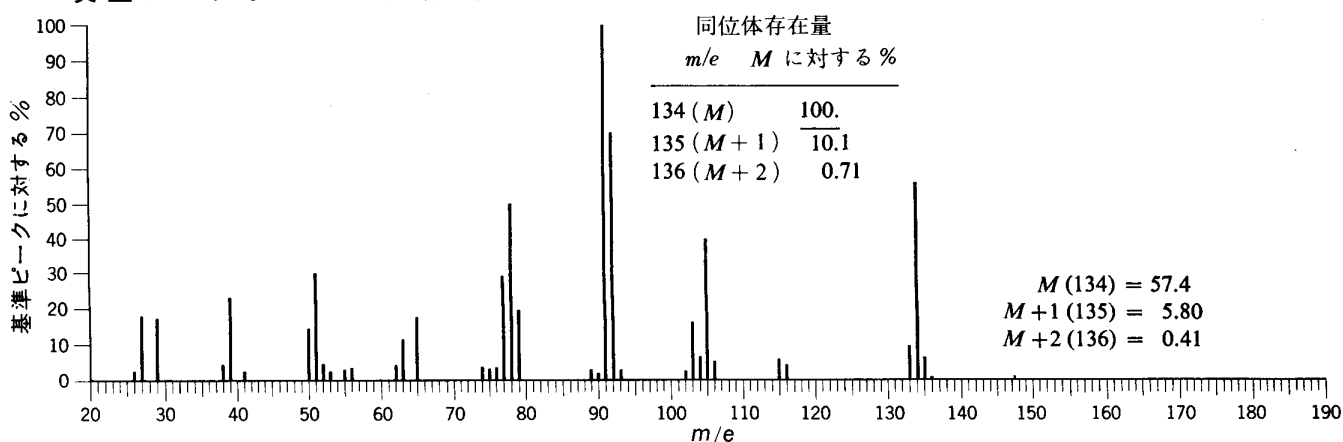


化合物 8・1 (Beilstein Ref.7,304)

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

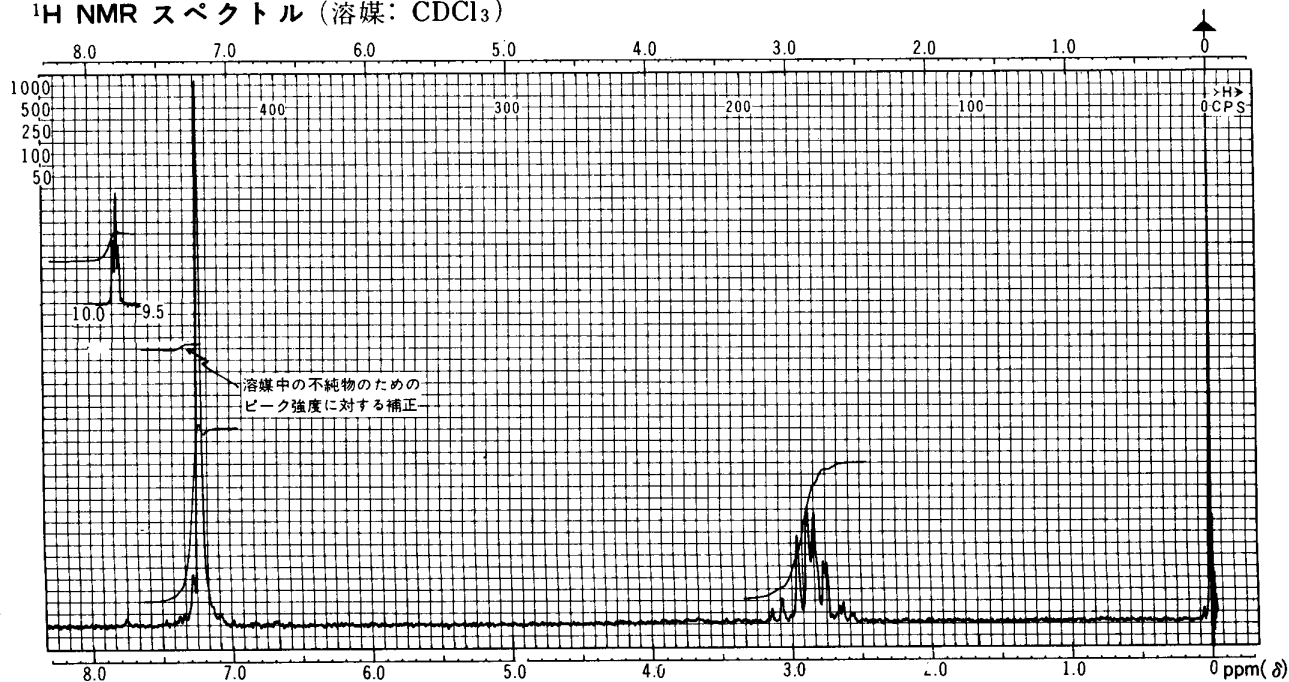


紫外スペクトルデータ

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

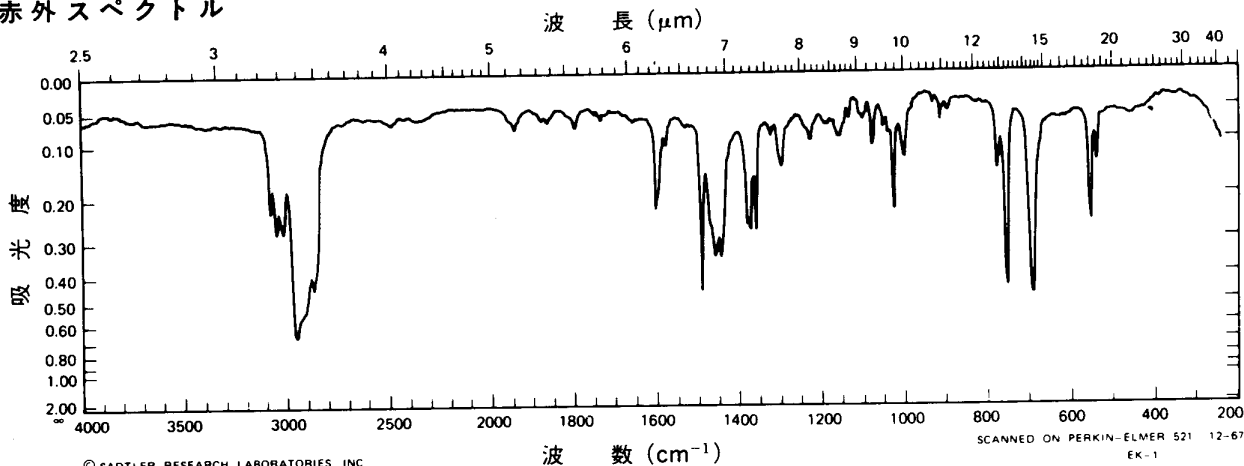
n.s.g. = 溶媒記載なし

¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃)



化合物 8・2 (Beilstein Ref.5,436)

赤外スペクトル



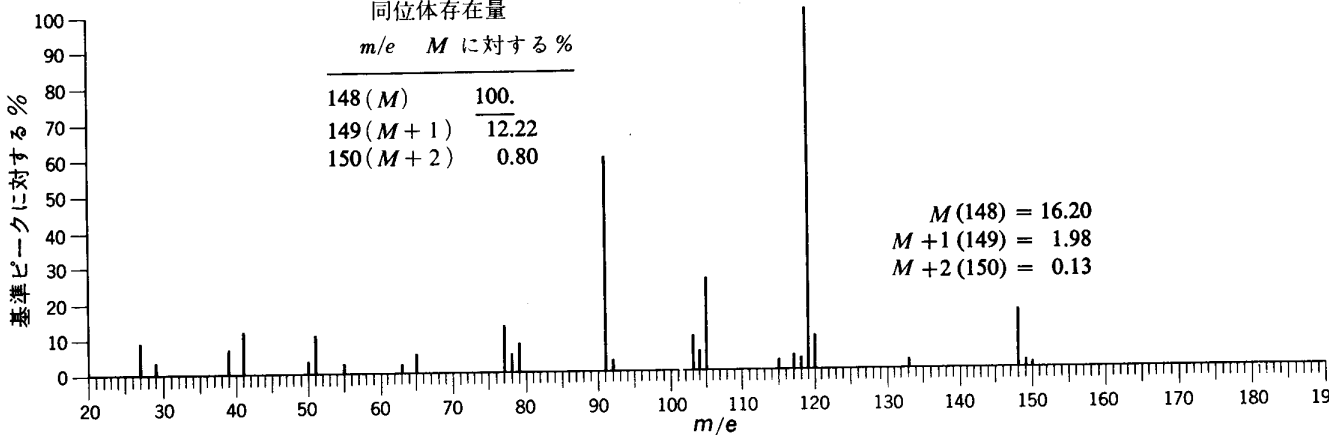
© Sadtler Research Laboratories, Inc.
Philadelphia, PA. 19104 U.S.A.

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



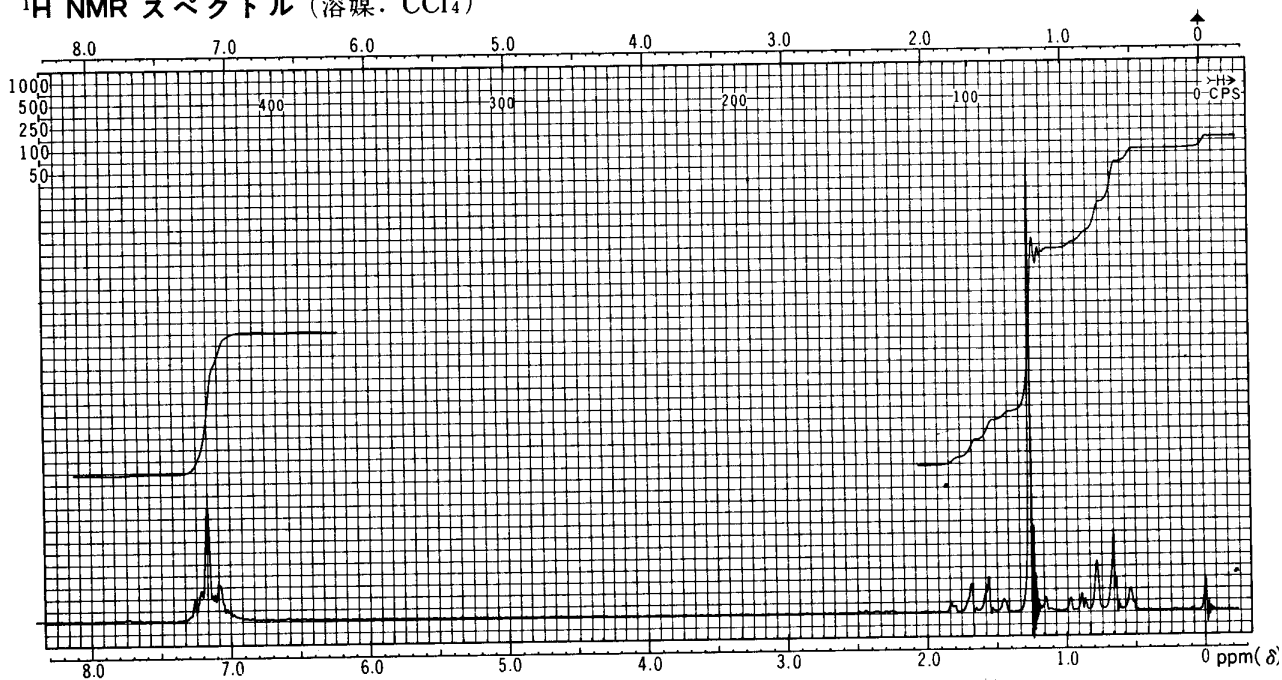
$M(148) = 16.20$
 $M+1(149) = 1.98$
 $M+2(150) = 0.13$

紫外スペクトルデータ

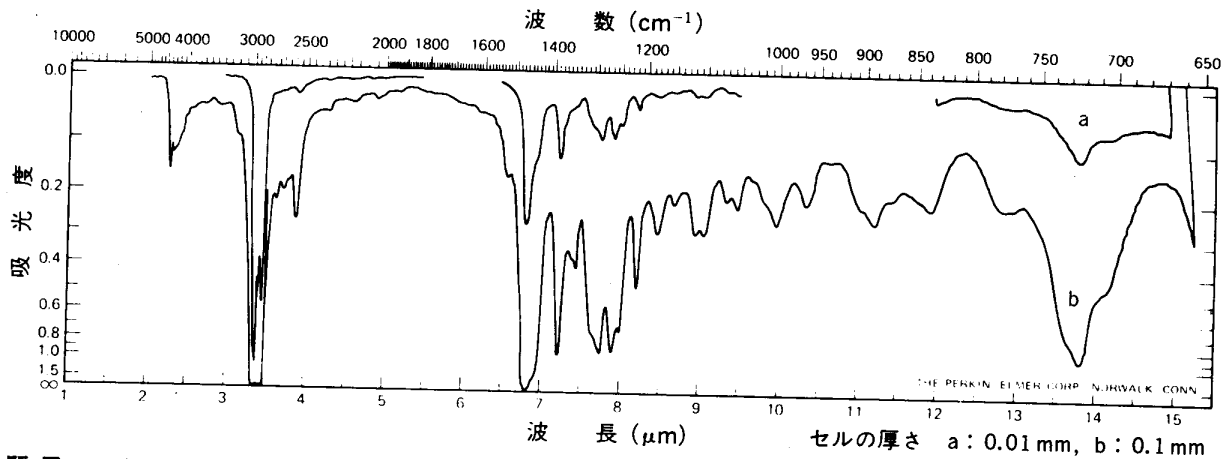
λ_{max}	$\log \epsilon_{\text{max}}$	242 (s)	258	2.25
247.5 (s)	2.09	261	2.20	
252.5	2.19	264	2.18	
217 (s)	3.60			
236 (s)	1.57			

(s) = 肩

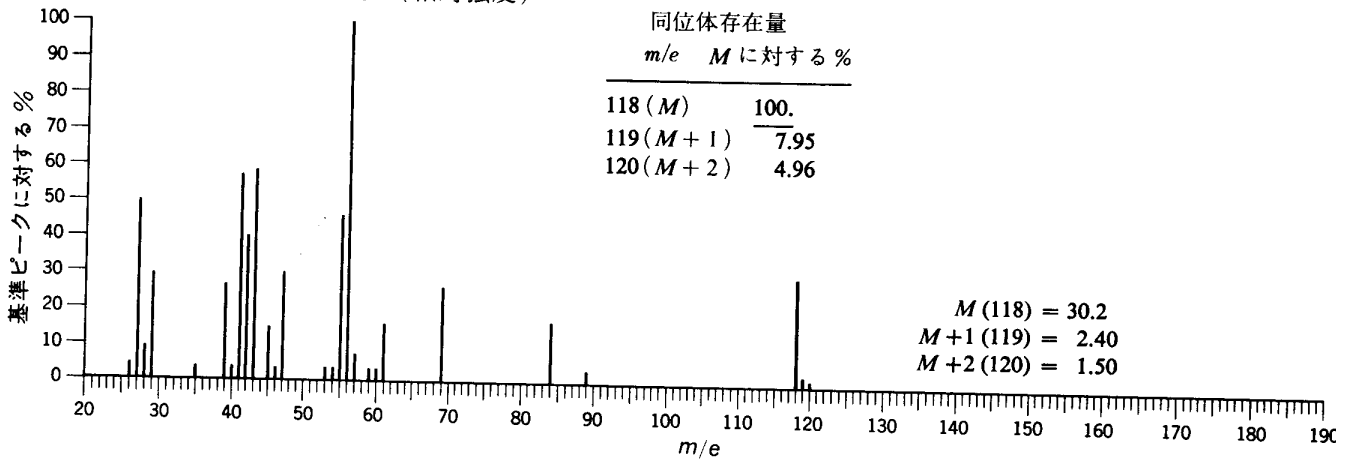
$^1\text{H NMR}$ スペクトル (溶媒: CCl_4)



化合物 8・3 (Beilstein Ref.1,408)
赤外スペクトル



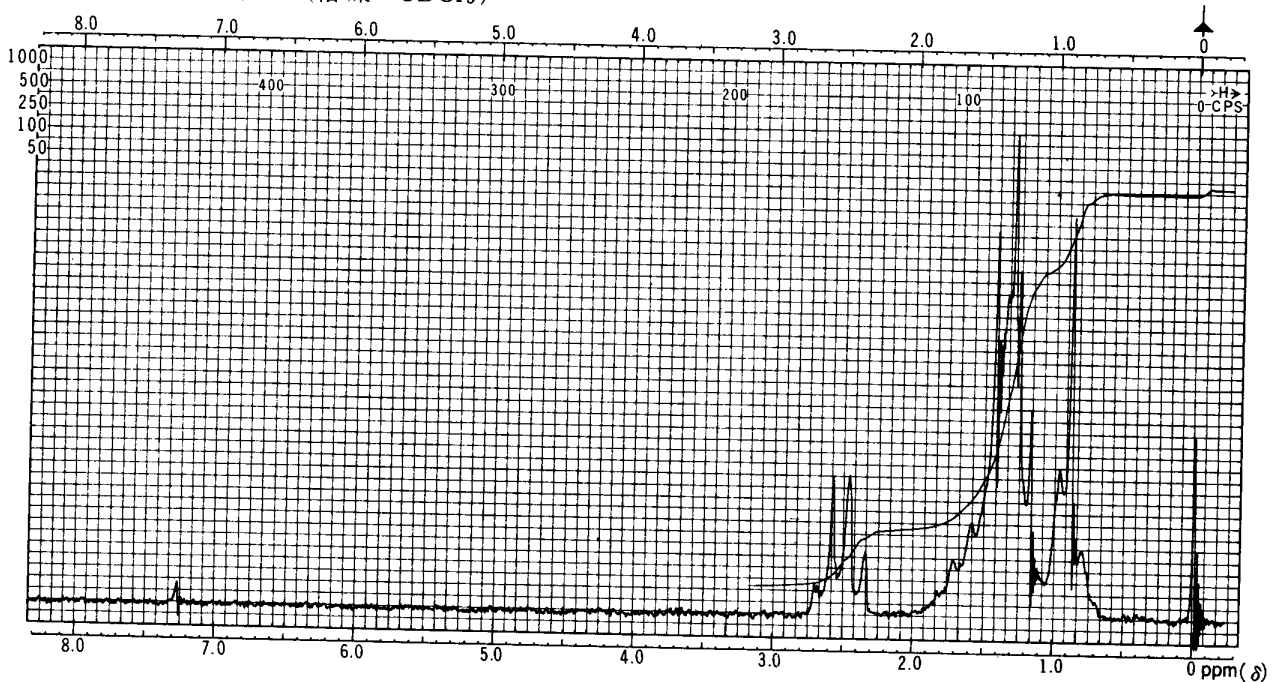
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

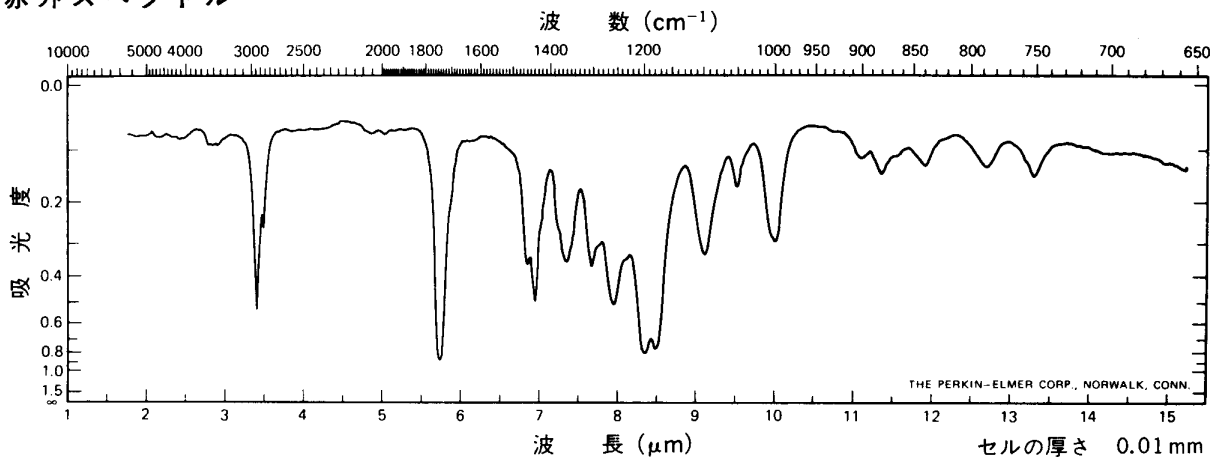
$\lambda_{\max}^{C_6H_5}$	ϵ_{\max}	
225 (s)	163	(s) = 肩

¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃)

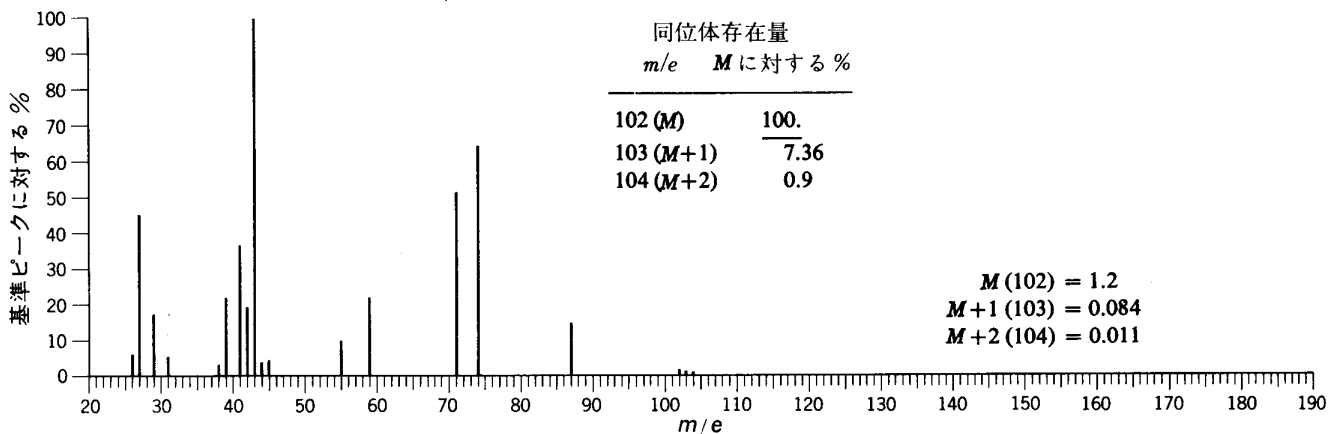


化合物 8・5

赤外スペクトル

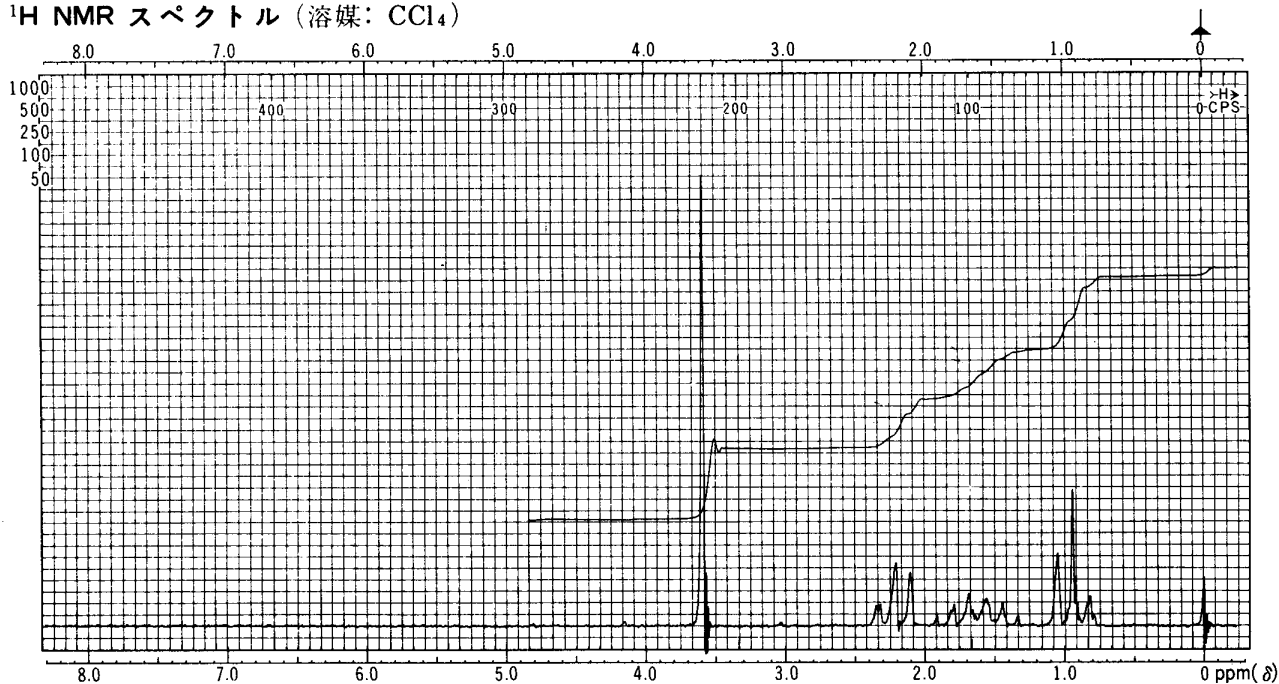


質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ
210 nm以上で透明

¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)

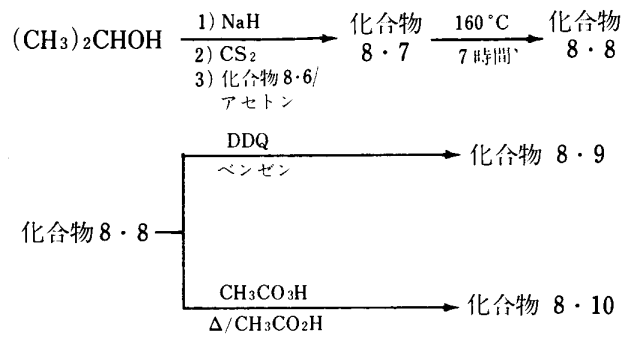


化合物の処理過程が示された問題
(化合物 8・6～8・10)

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

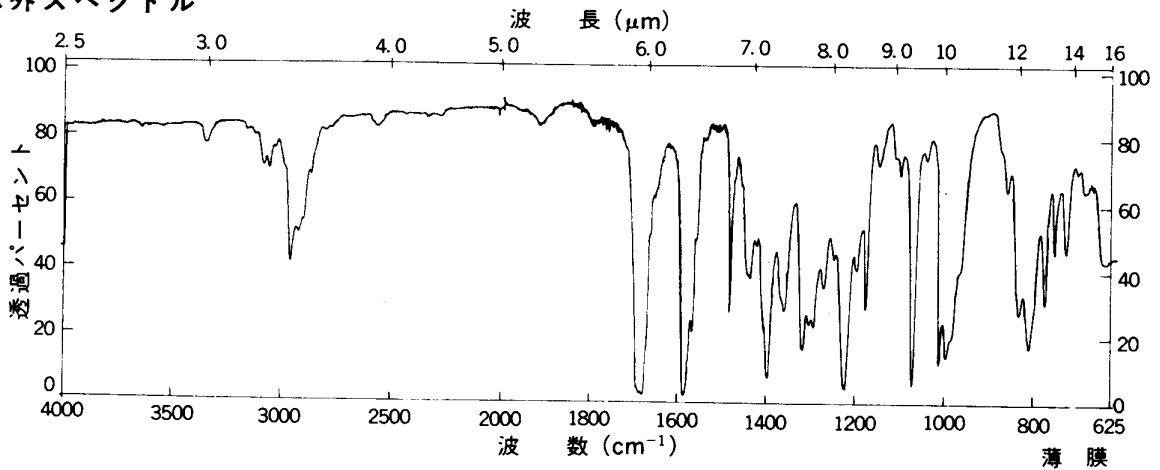
えられたスペクトルから化合物 8・9 および 8・10 を同定せよ。

反応過程の概要



化合物 8・6

赤外スペクトル

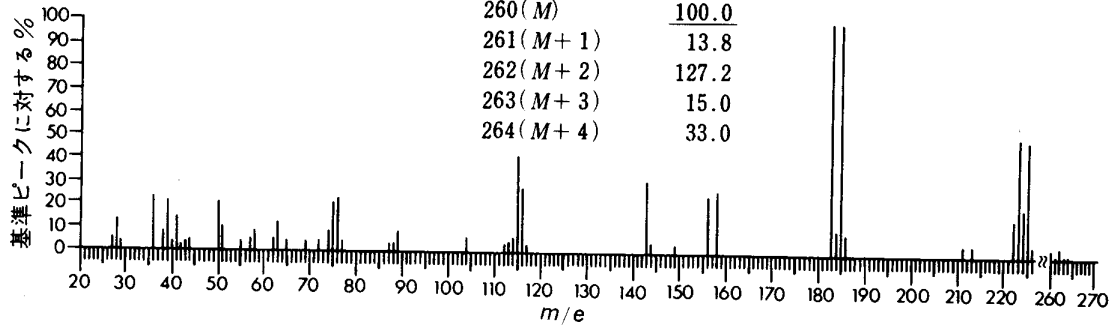


質量スペクトルデータ (相対強度)

同位体存在量

m/e M に対する%

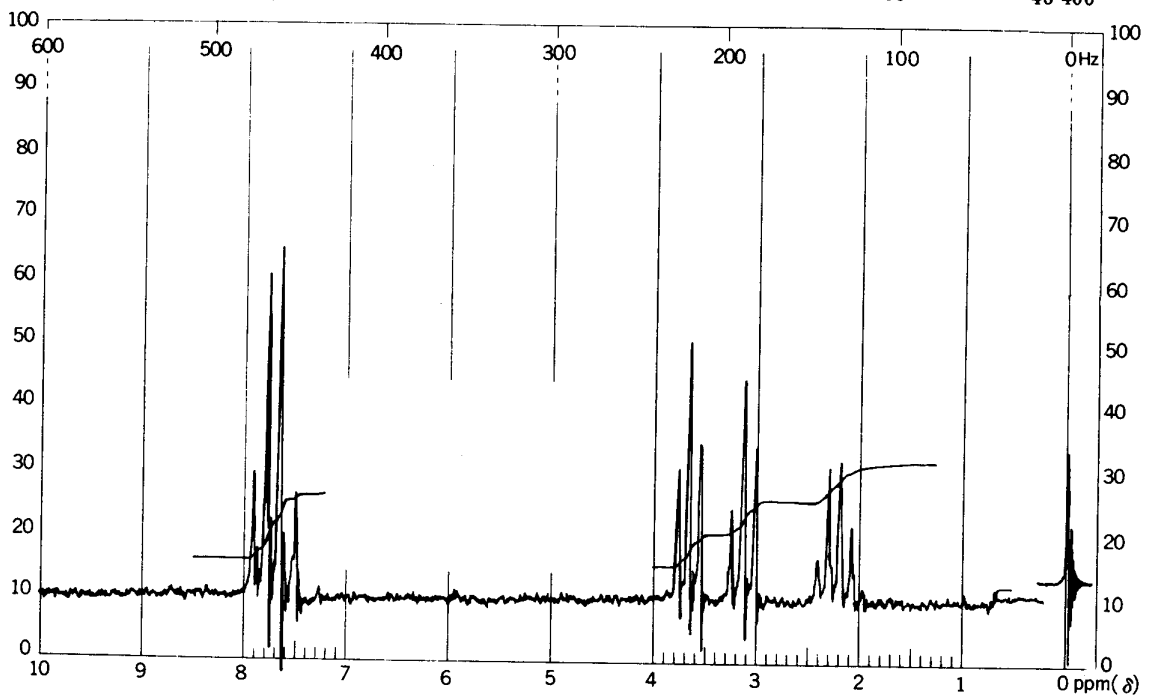
260 (M)	100.0
261 ($M+1$)	13.8
262 ($M+2$)	127.2
263 ($M+3$)	15.0
264 ($M+4$)	33.0



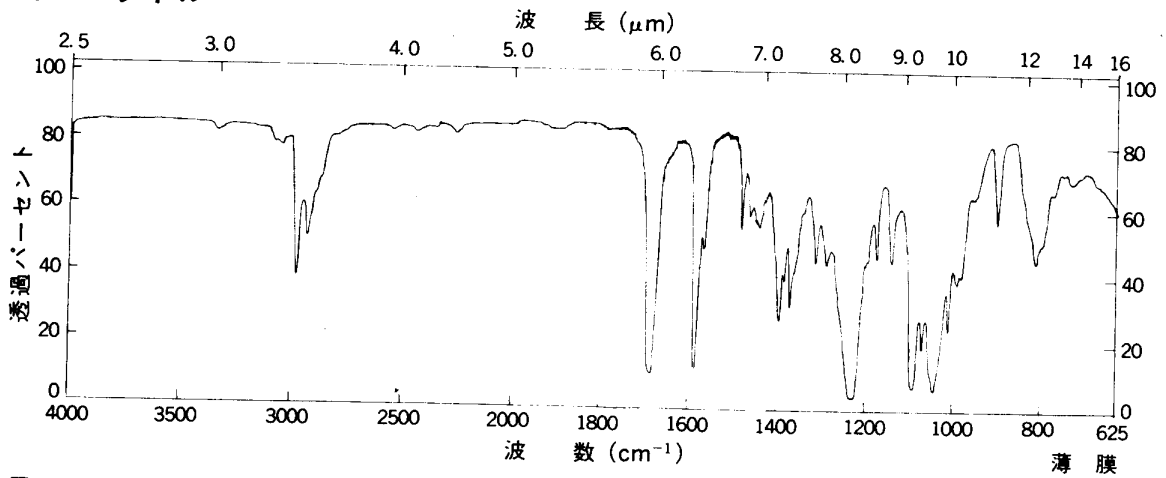
紫外スペクトルデータ

λ_{max}	ϵ_{max}
253	46 400

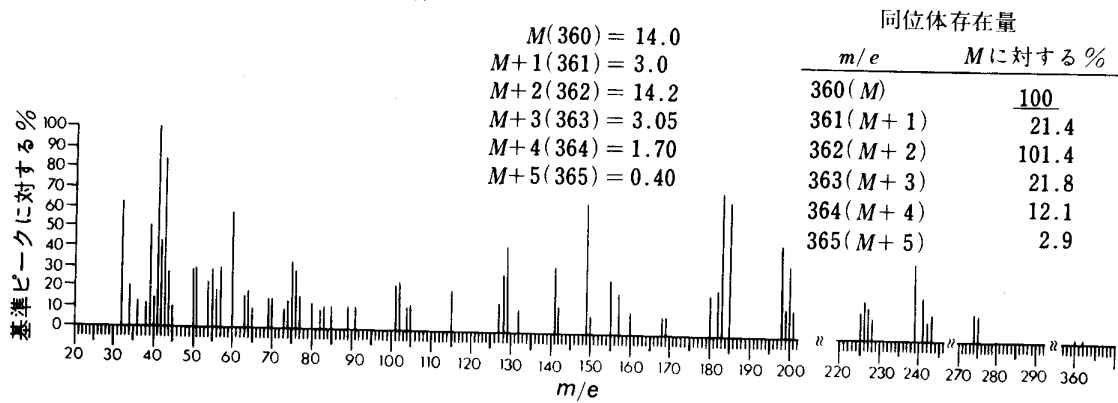
1H NMR スペクトル (溶媒: $CDCl_3$)



化合物 8・7
赤外スペクトル



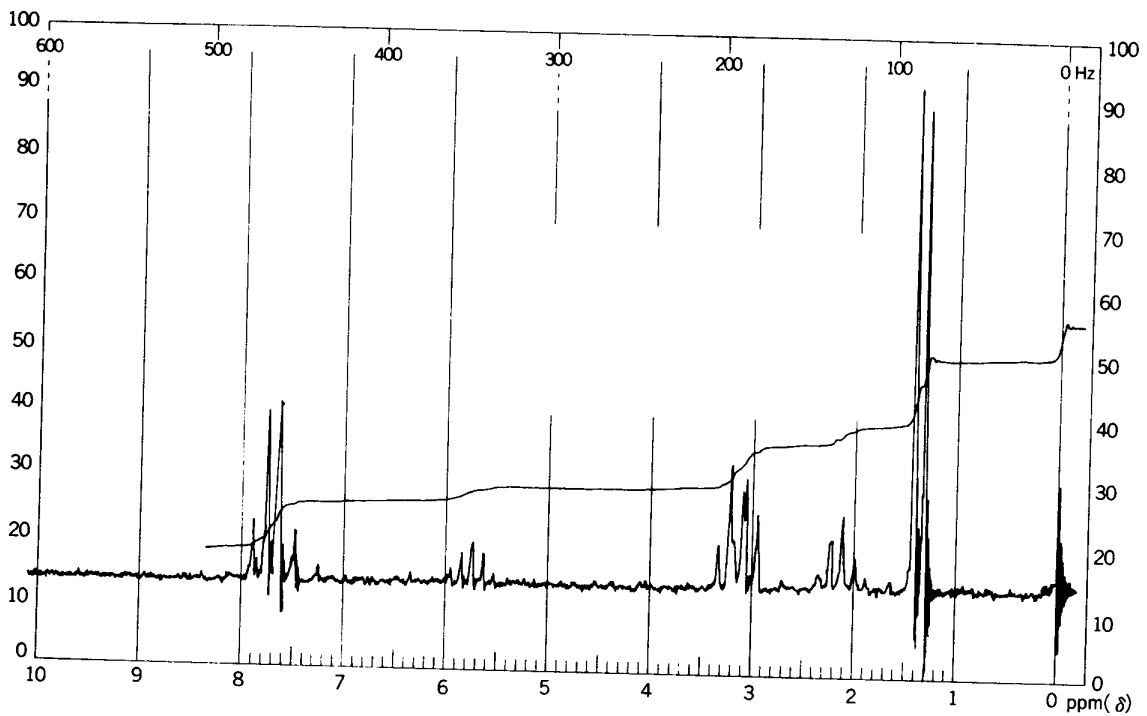
質量スペクトルデータ (相対強度)



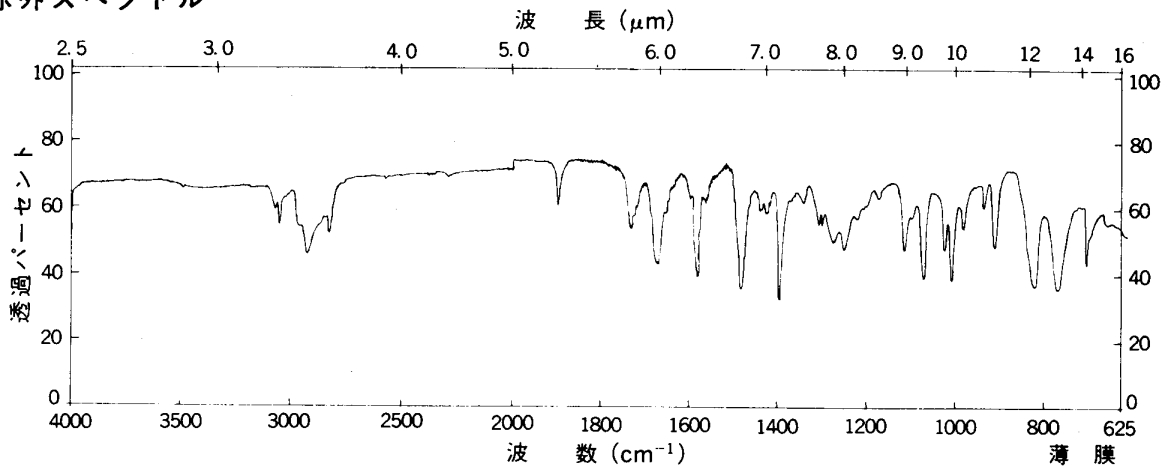
紫外スペクトルデータ

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

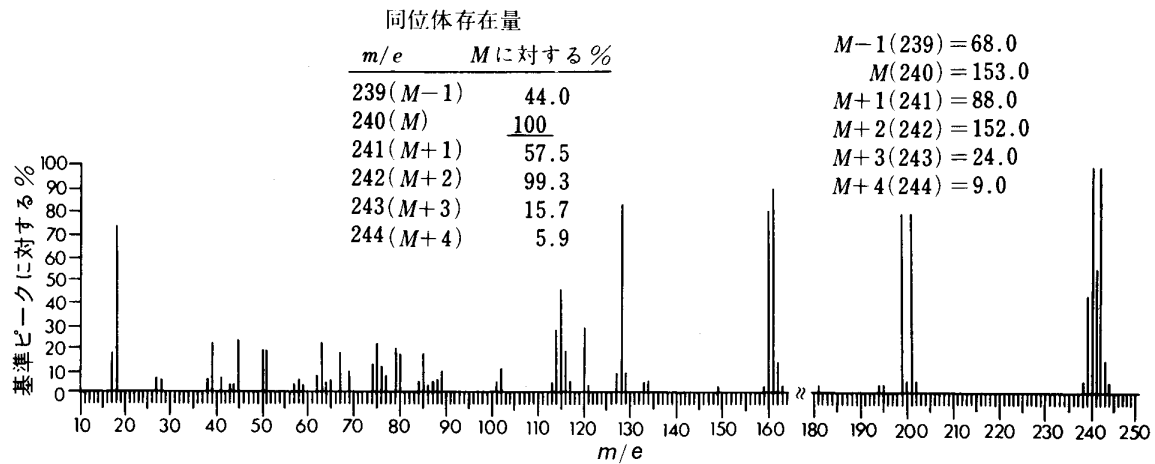
¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃)



化合物 8・8
赤外スペクトル



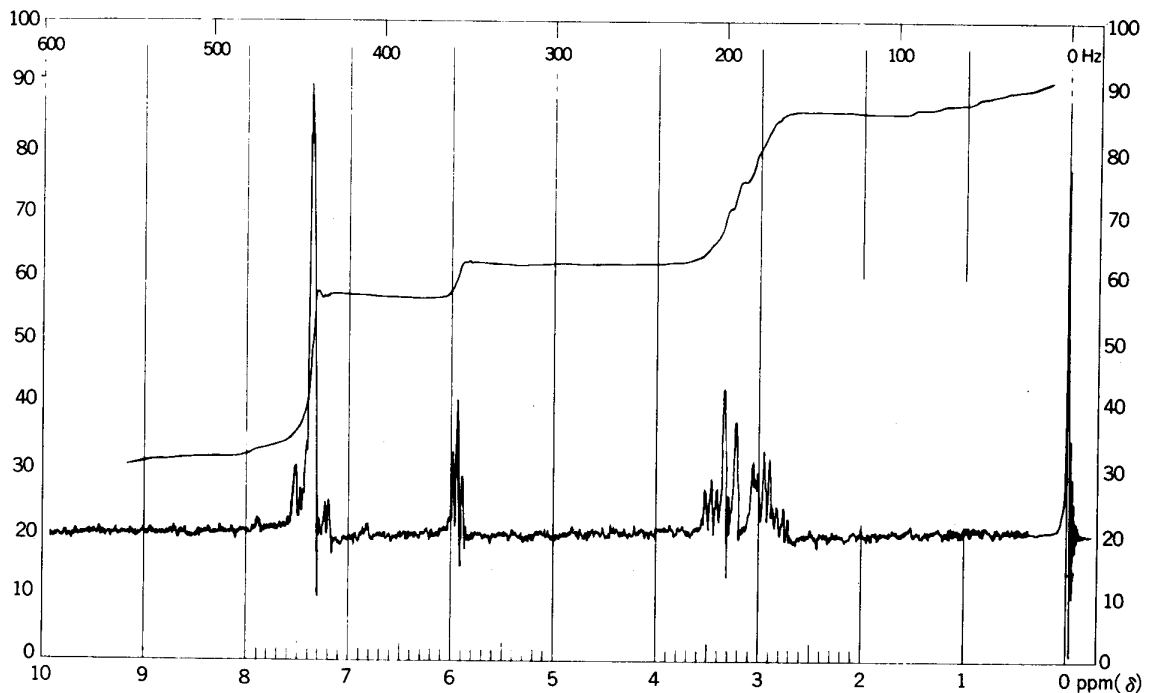
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

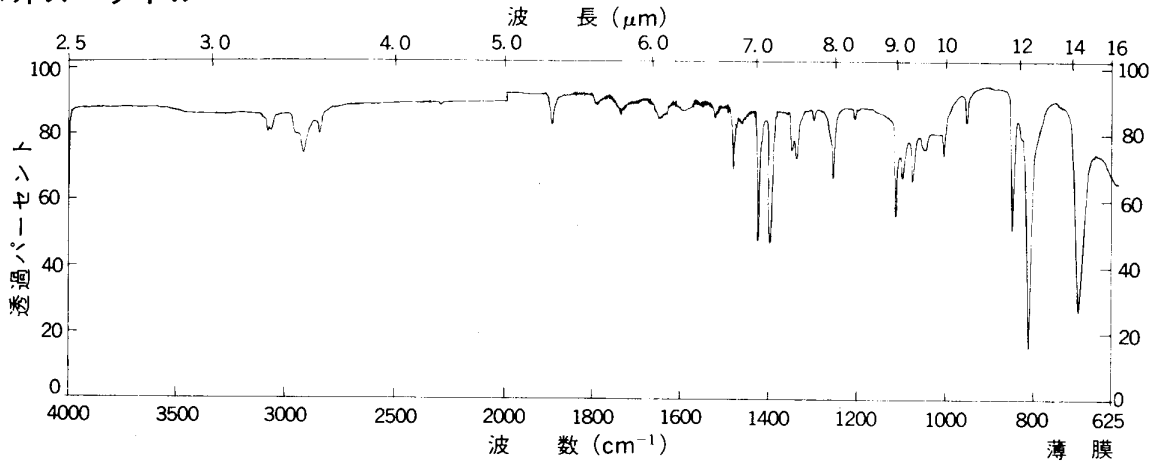
$\lambda_{\max}^{\text{CH}_3\text{OH}}$	ϵ_{\max}
237	18600
301	5540

^1H NMR スペクトル (溶媒: CDCl_3)

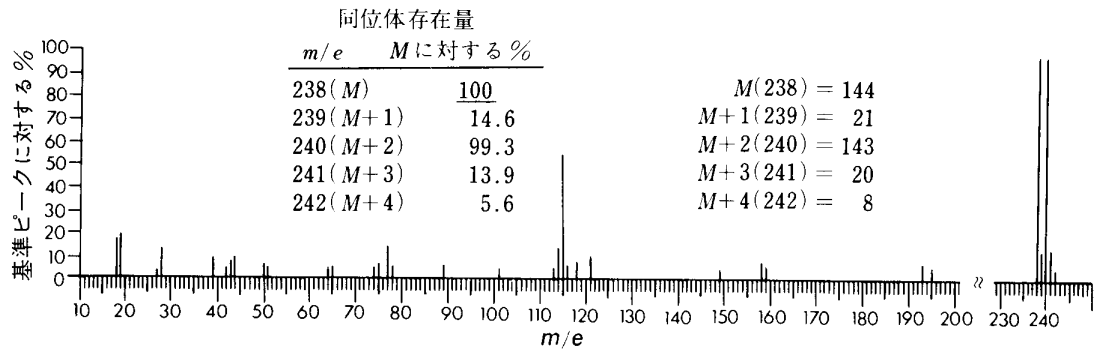


化合物 8・9 (Beilstein Ref.11, (17), 64)

赤外スペクトル



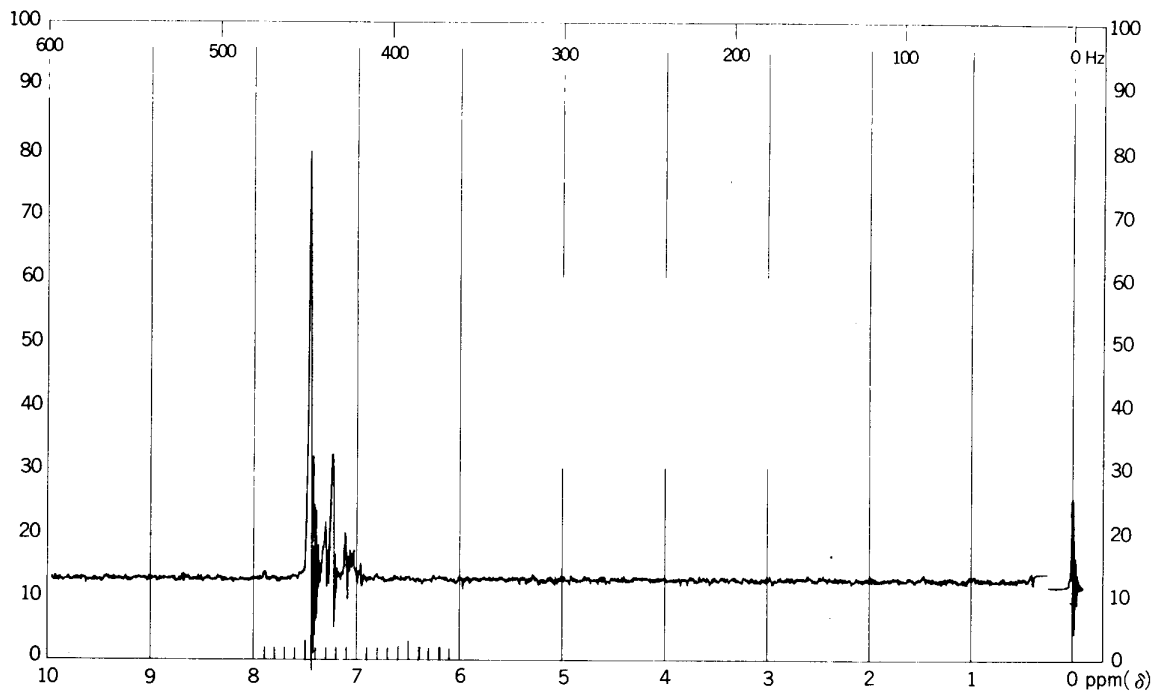
質量スペクトルデータ (相対強度)



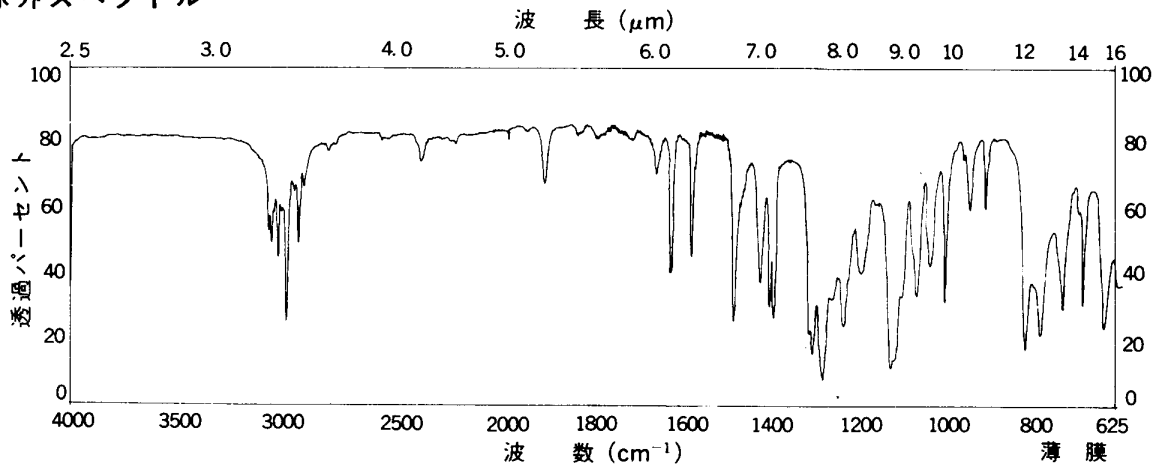
紫外スペクトルデータ

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

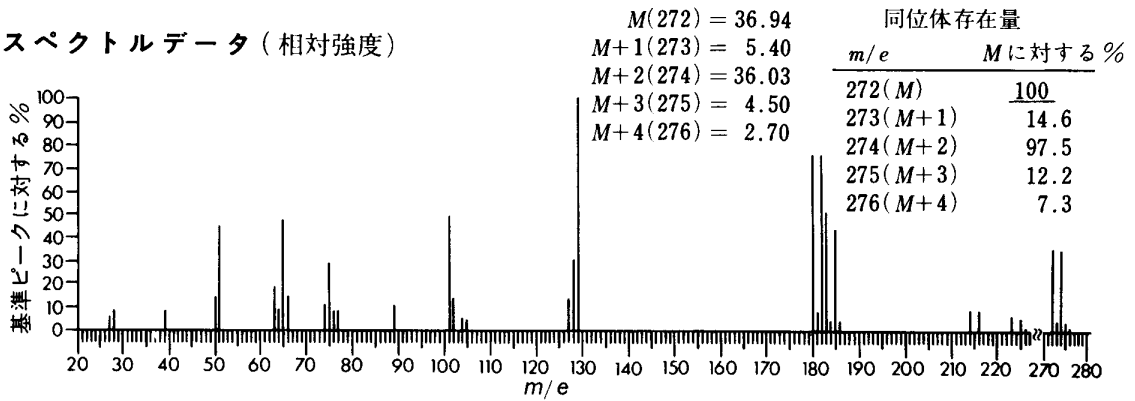
¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃)



化合物 8・10
赤外スペクトル



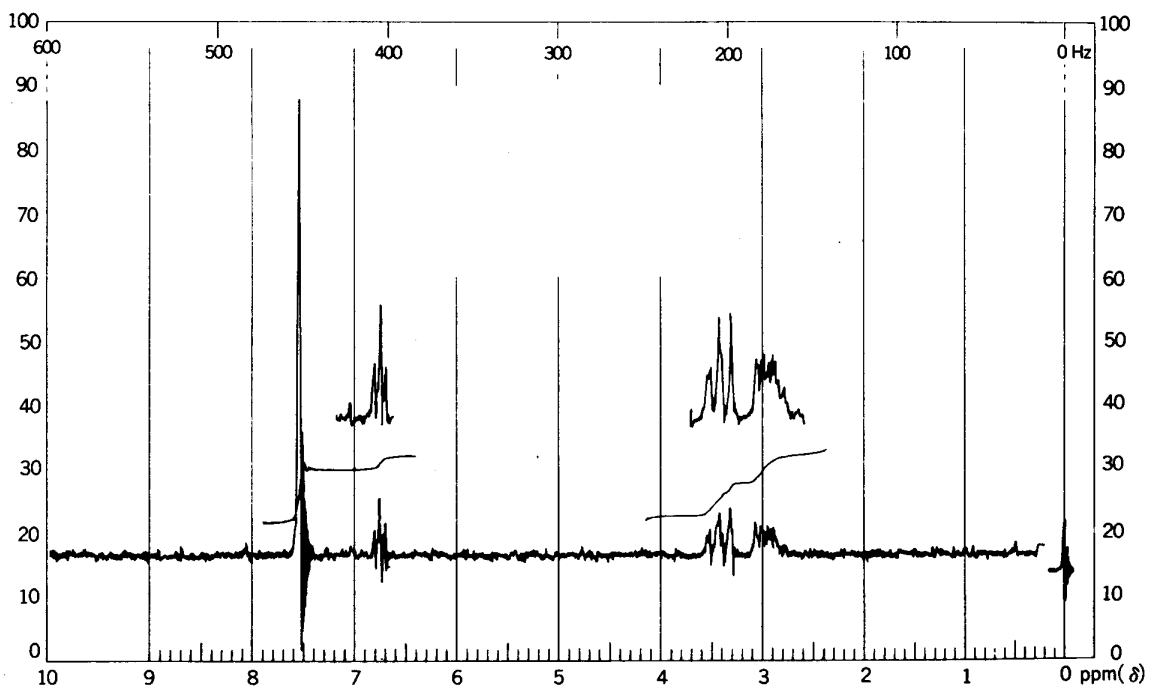
質量スペクトルデータ (相対強度)



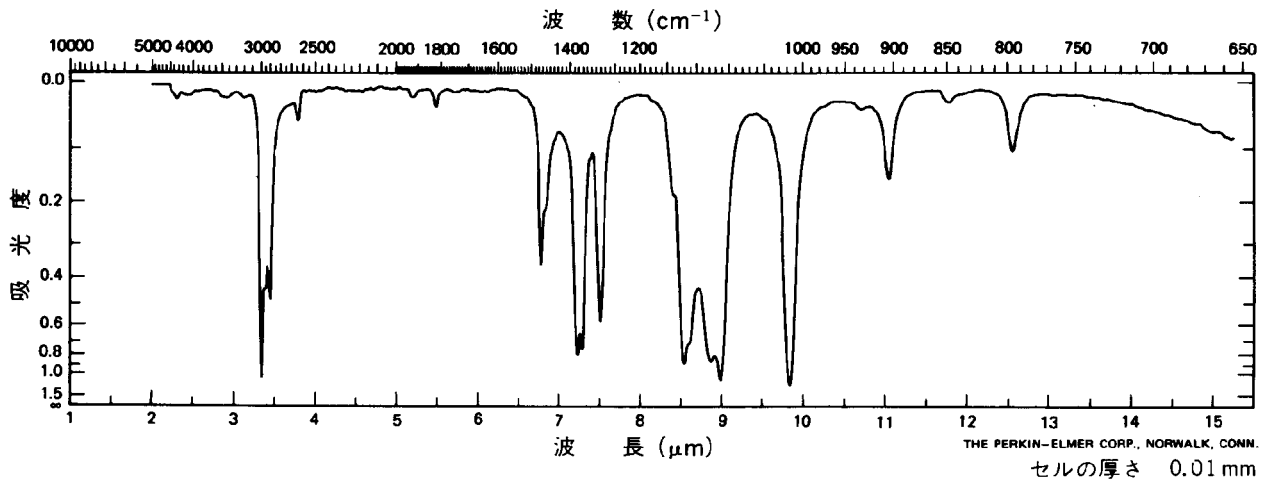
紫外スペクトルデータ

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

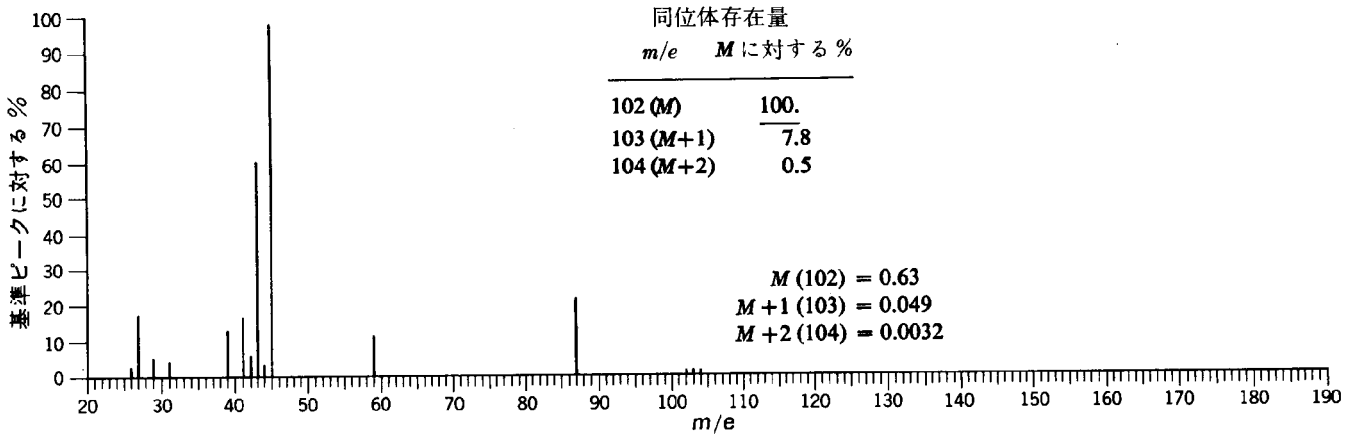
^1H NMR スペクトル (溶媒: CDCl_3)



化合物 8・12
赤外スペクトル

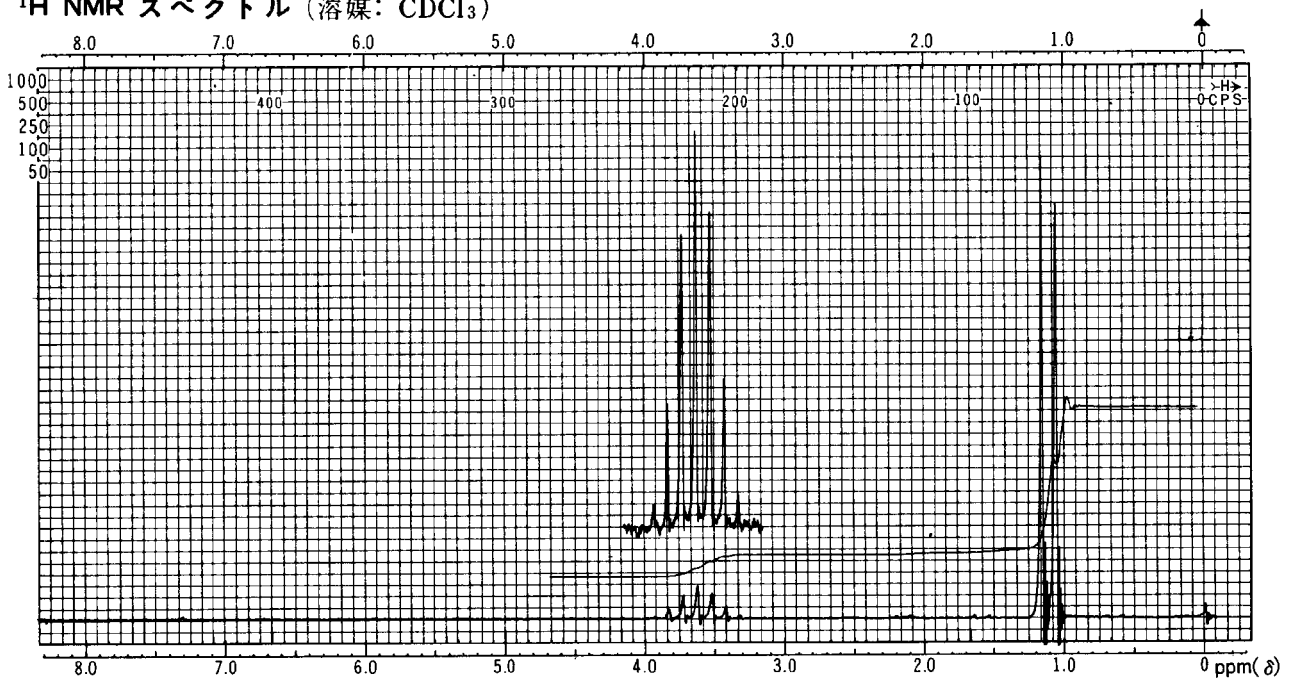


質量スペクトルデータ (相対強度)

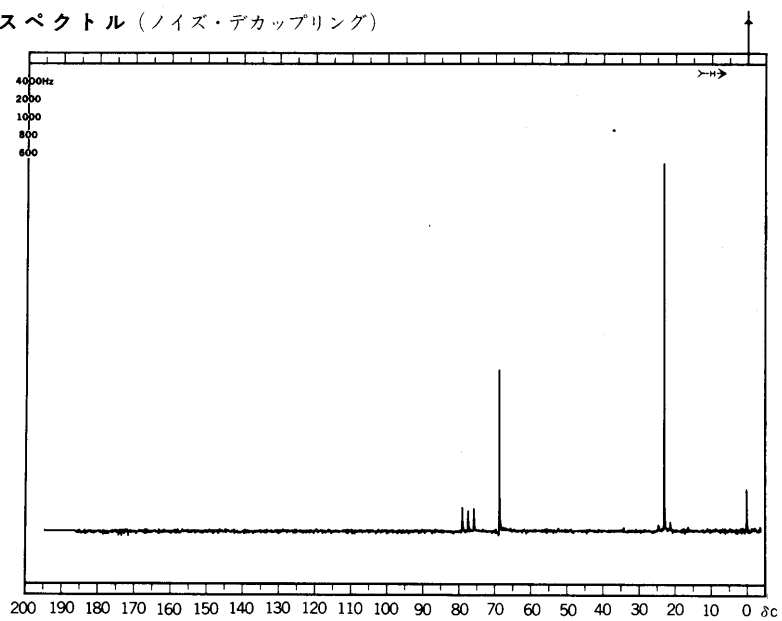
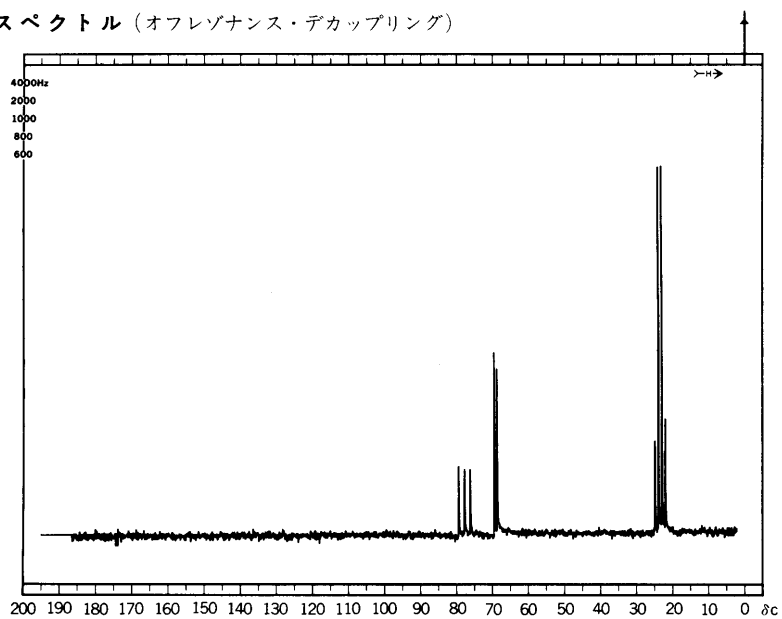


紫外スペクトルデータ
200 nm 以上で透明

¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃)

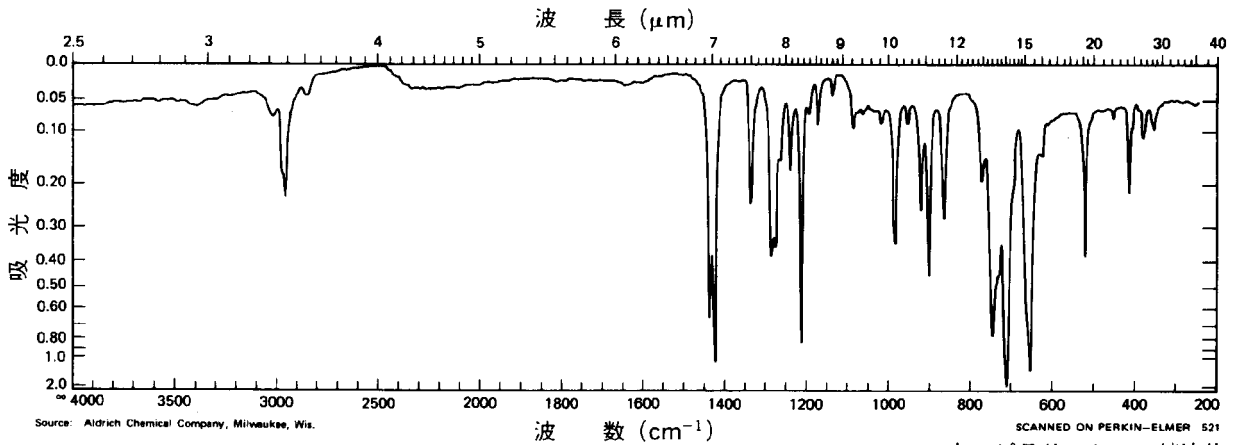


化合物 8・12 (つづき)

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

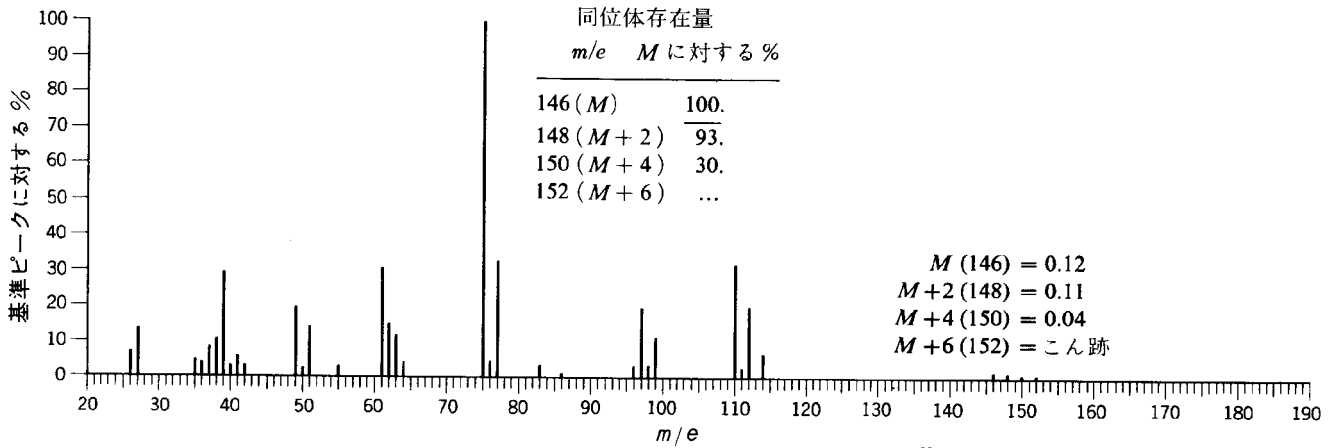
化合物 8・13 (Beilstein Ref.1,106)

赤外スペクトル



キャピラリーセル：純液体

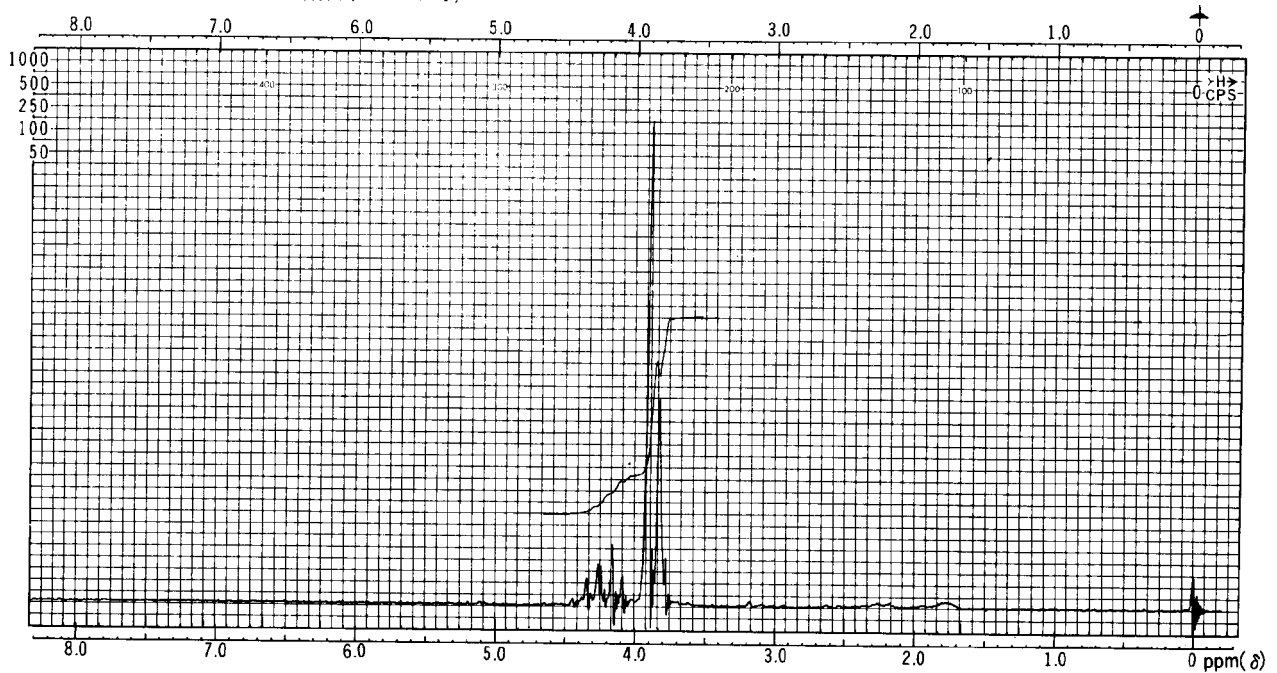
質量スペクトルデータ (相対強度)



紫外スペクトルデータ

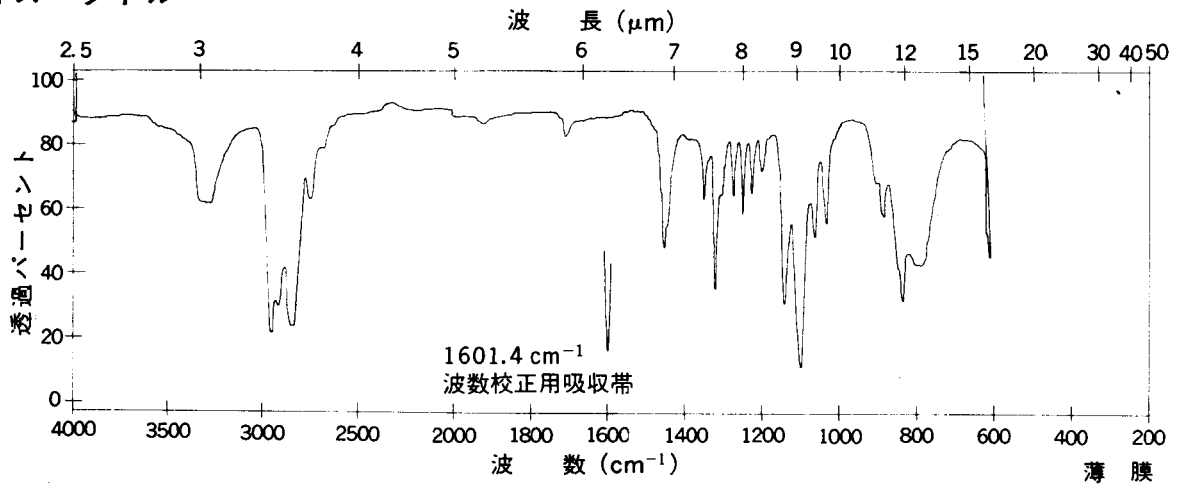
$\lambda_{\text{max}}^{\text{EtOH}}$	ϵ_{max}
242	14.5

¹H NMR スペクトル (溶媒: CCl₄)

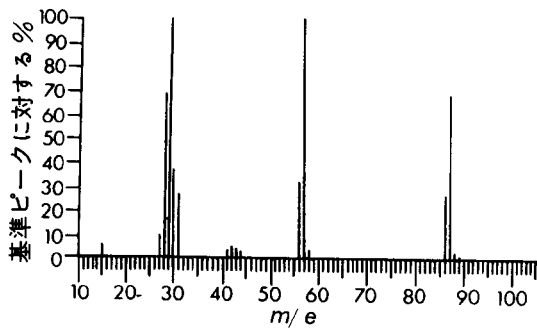


化合物 8・22 (Beilstein Ref.27, 5)

赤外スペクトル



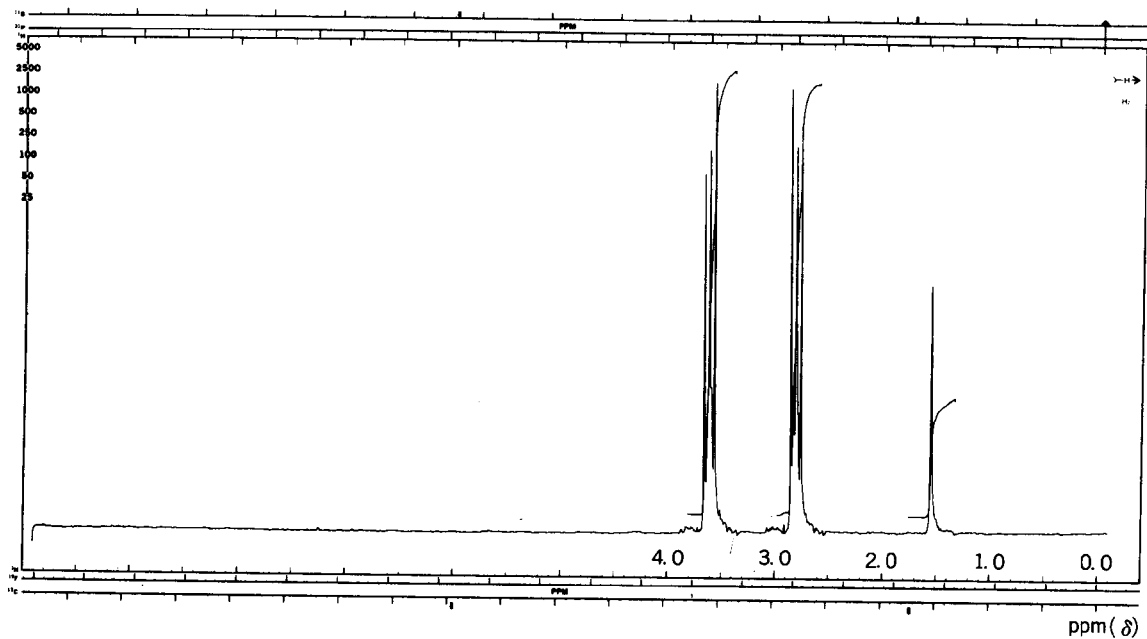
質量スペクトルデータ (相対強度)



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

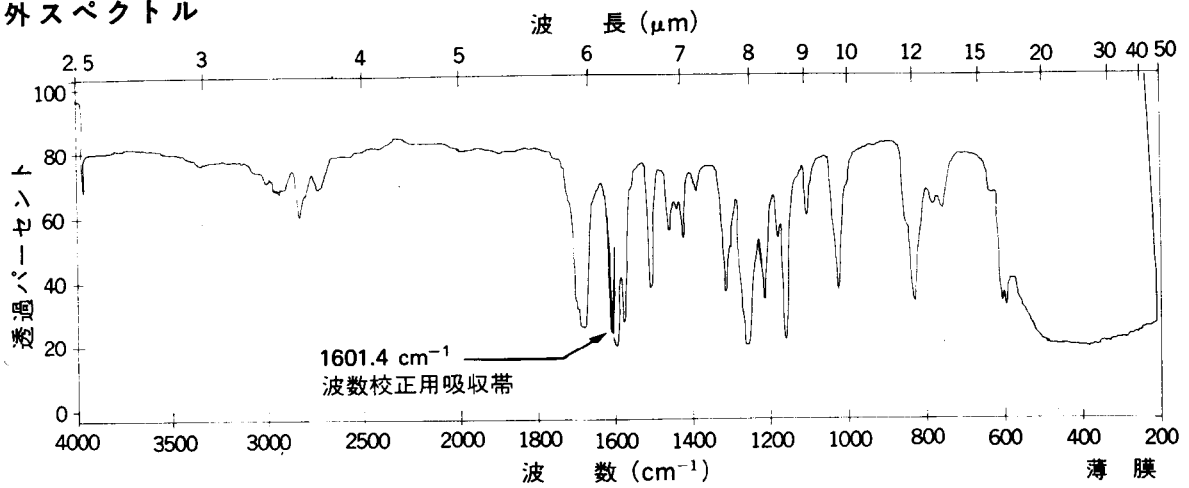
紫外スペクトルデータ
200 nm 以上で透明

¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃, 100 MHz)

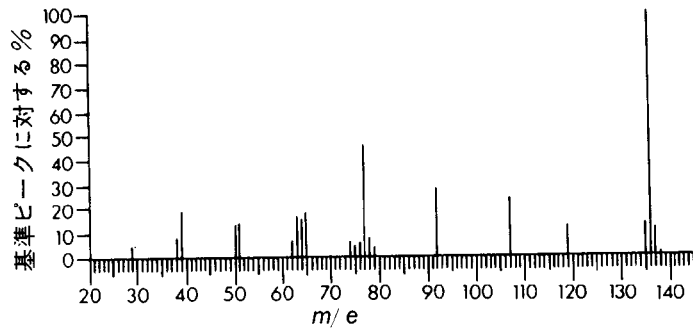


化合物 8・20 (Beilstein Ref.8, 67)

赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)



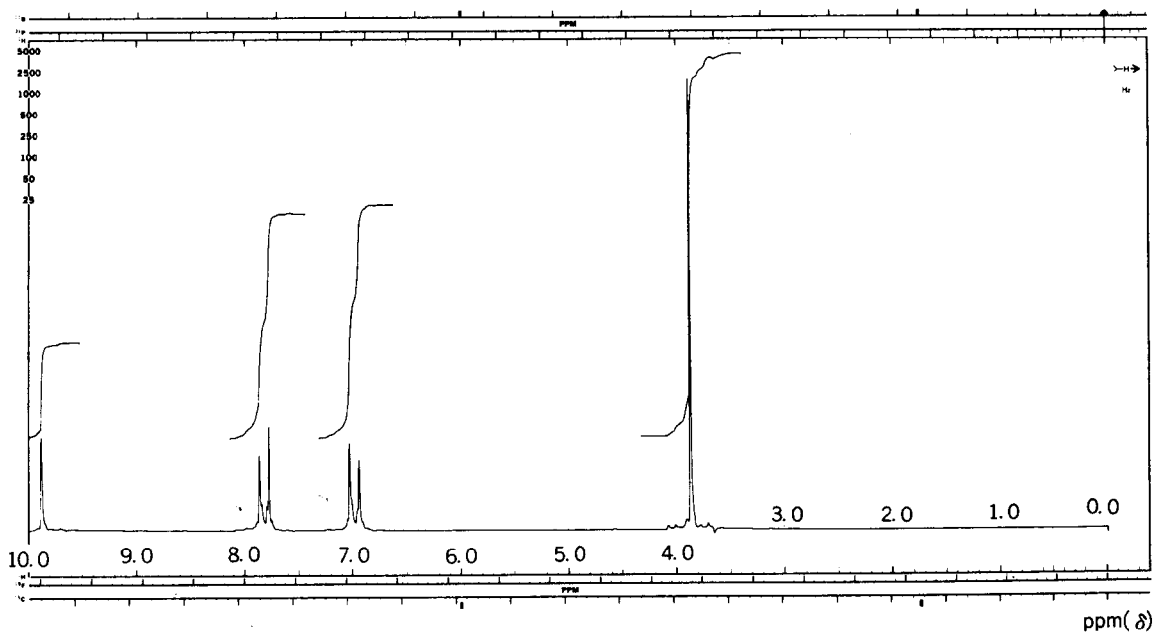
同位体存在量

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

紫外スペクトルデータ

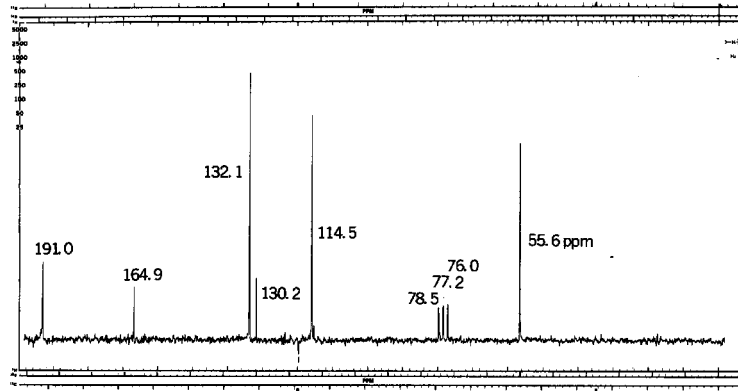
$\lambda_{\max}^{\text{Cyclohexane}}$	ϵ_{\max}
215	21 500
221	20 000
266	25 500
288	8 500
312	90
324	83
360	25

^1H NMR スペクトル (溶媒: CDCl_3 , 100 MHz)

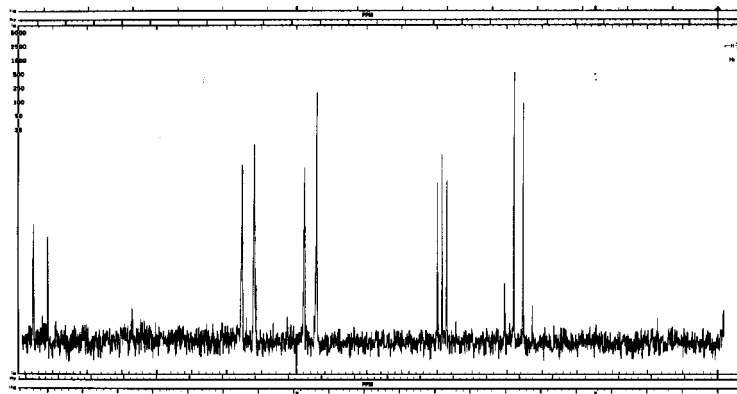


化合物 8・20 (つづき)

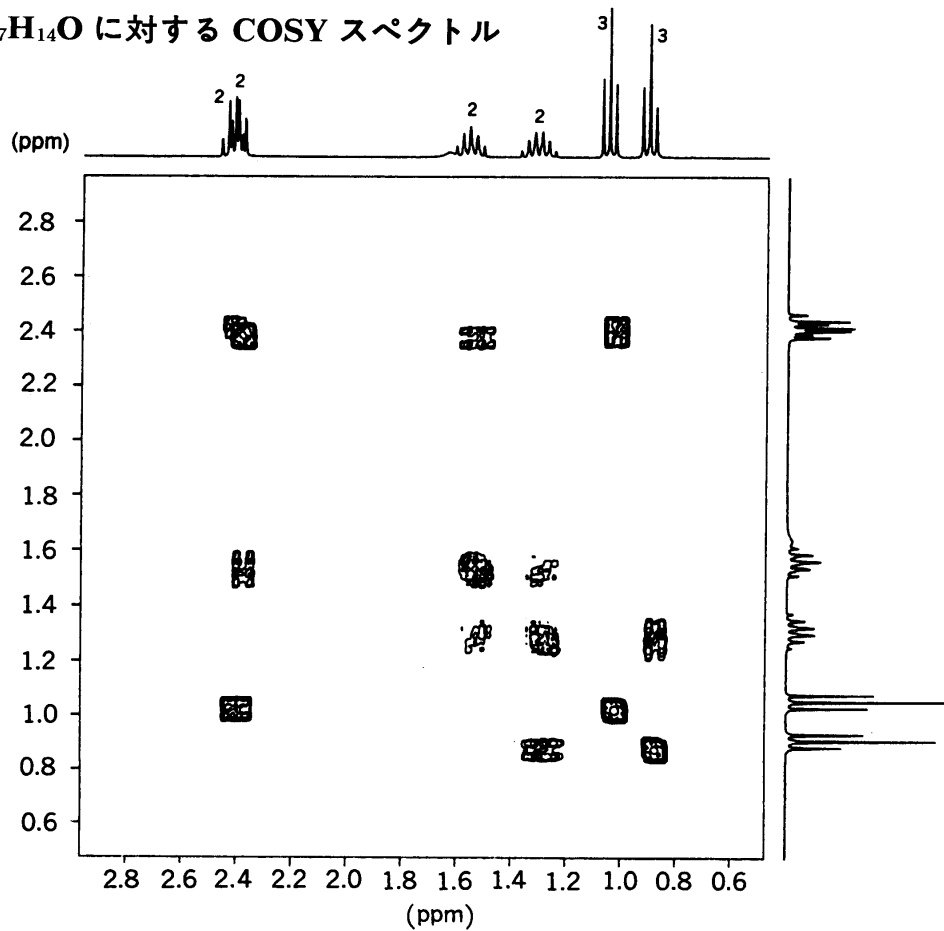
^{13}C NMR スペクトル (デカップリング)



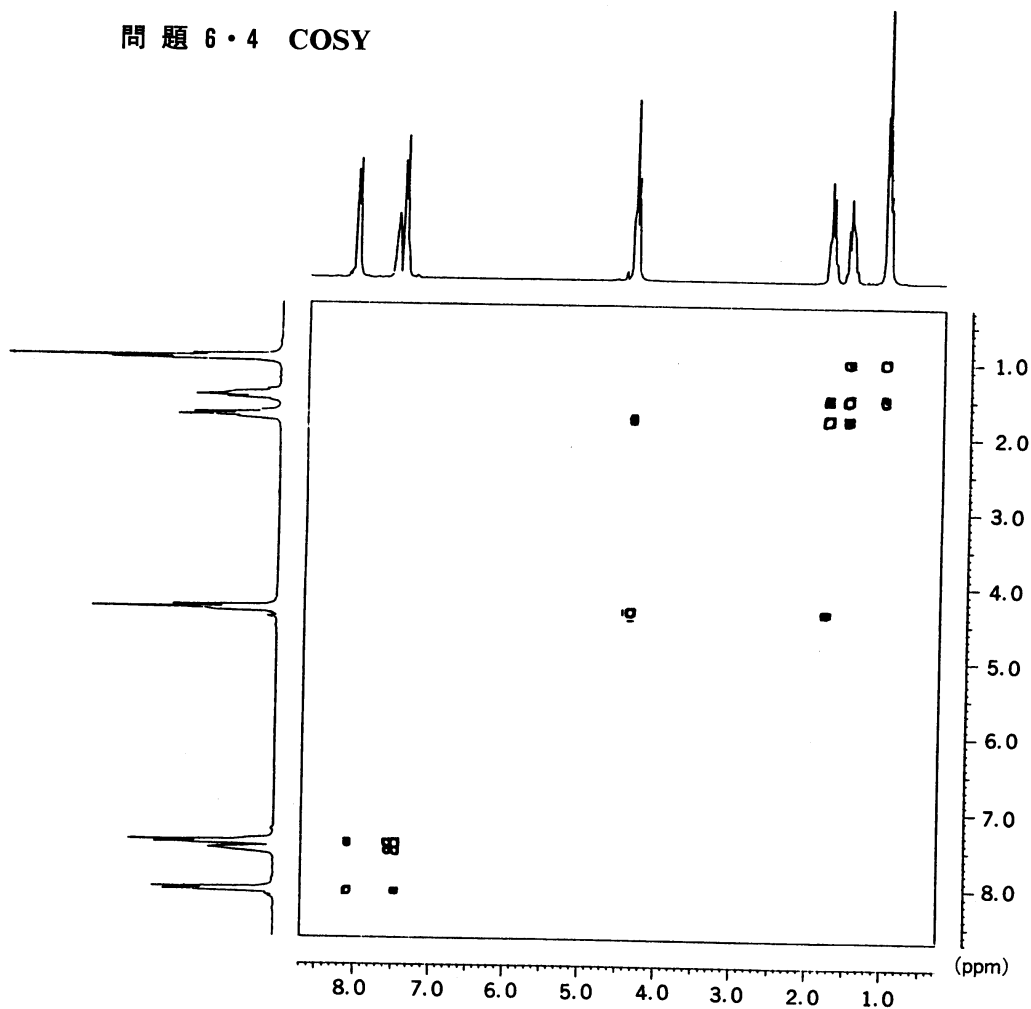
^{13}C NMR スペクトル (オフレゾナンス・デカップリング)



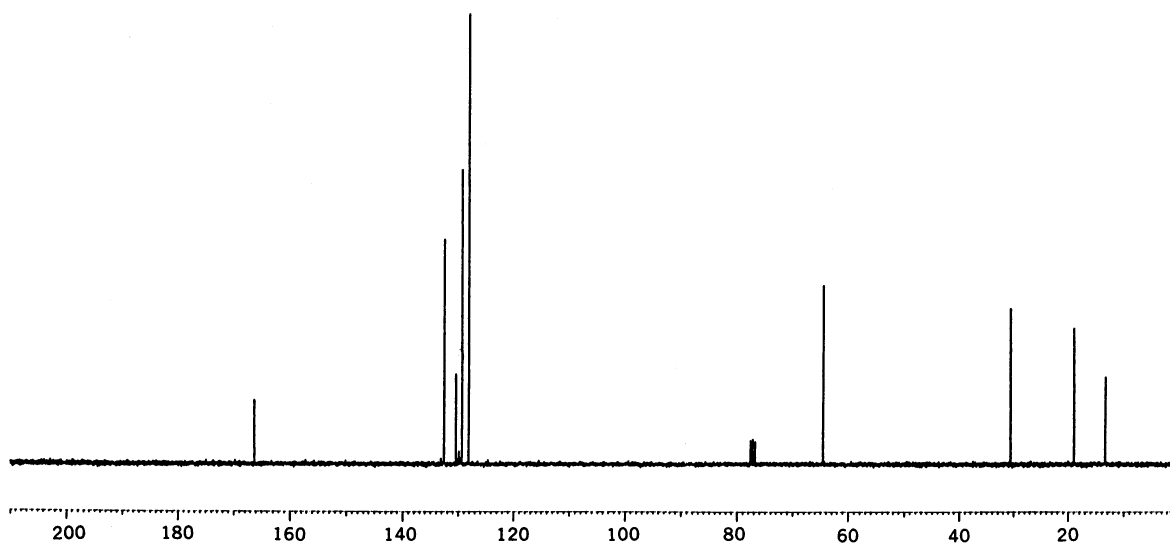
問題 6・3 $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$ に対する COSY スペクトル



問題 6・4 COSY

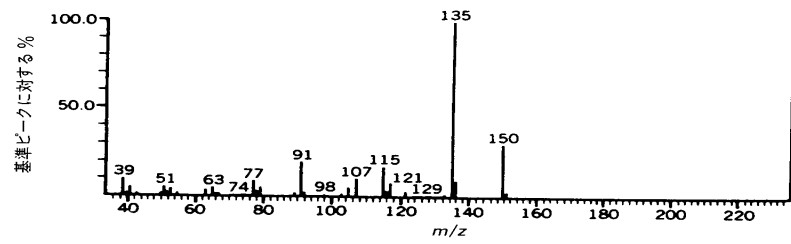


問題 6・4 一次元のプロトンデカップルした ¹³C スペクトル

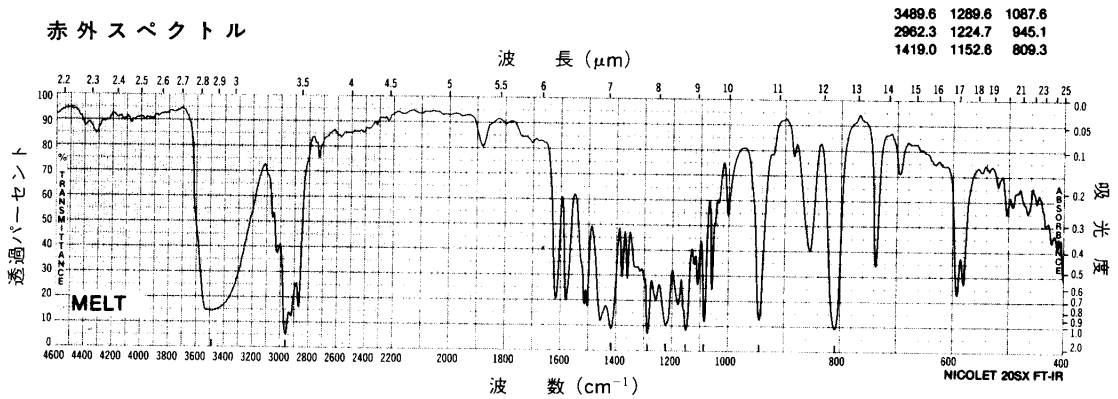


化合物 8. 2

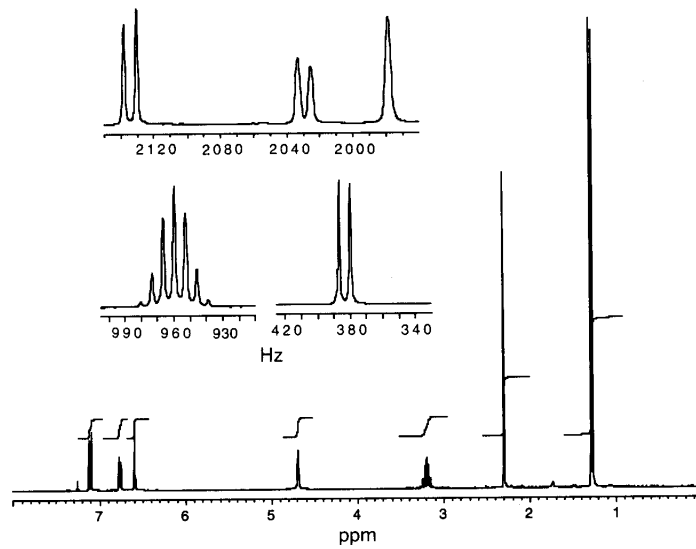
質量スペクトルデータ (相対強度)



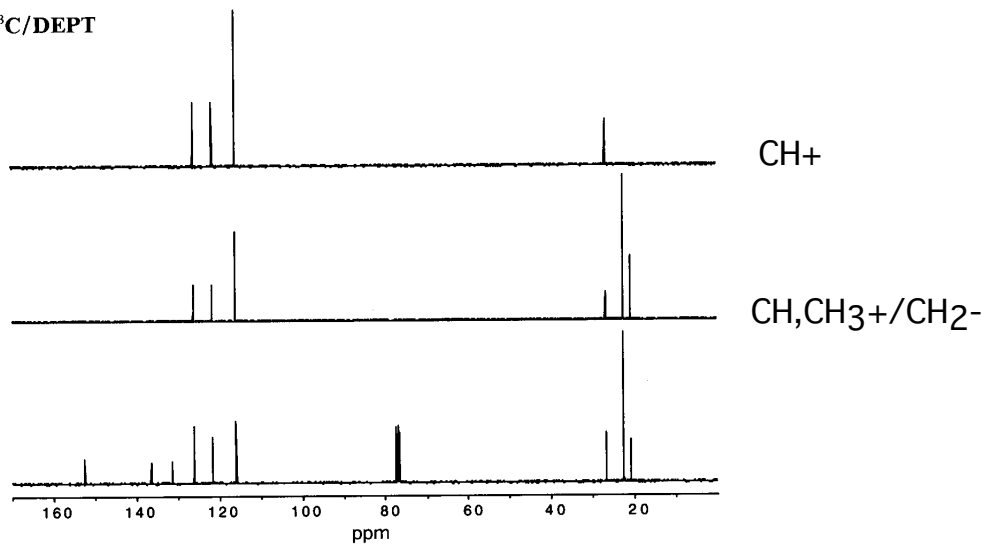
赤外スペクトル

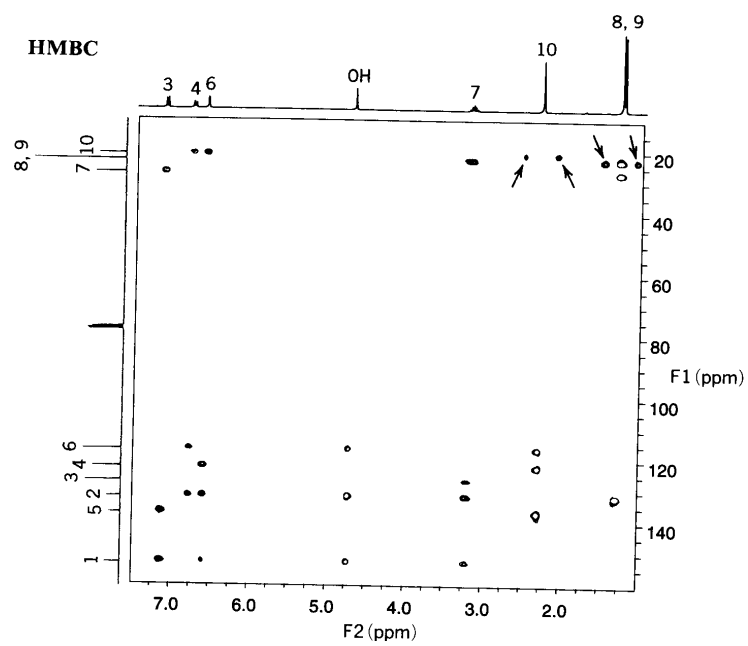
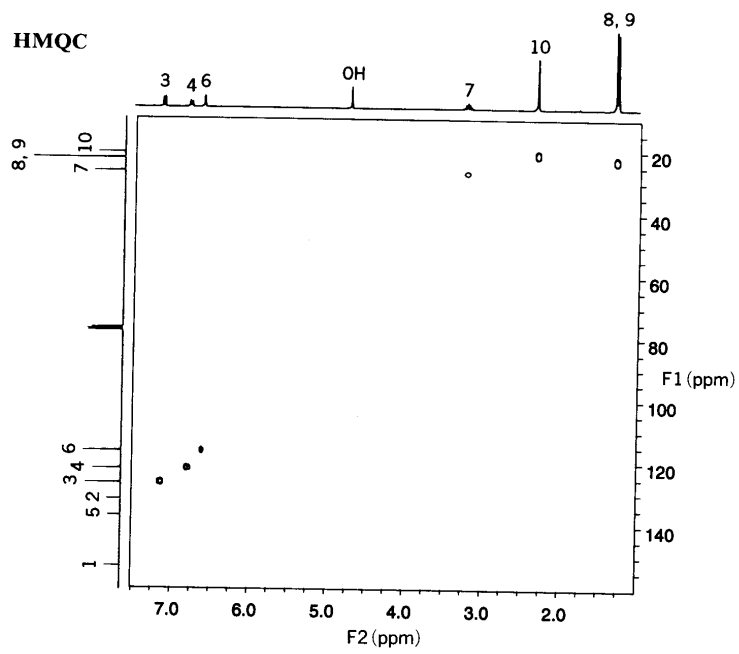
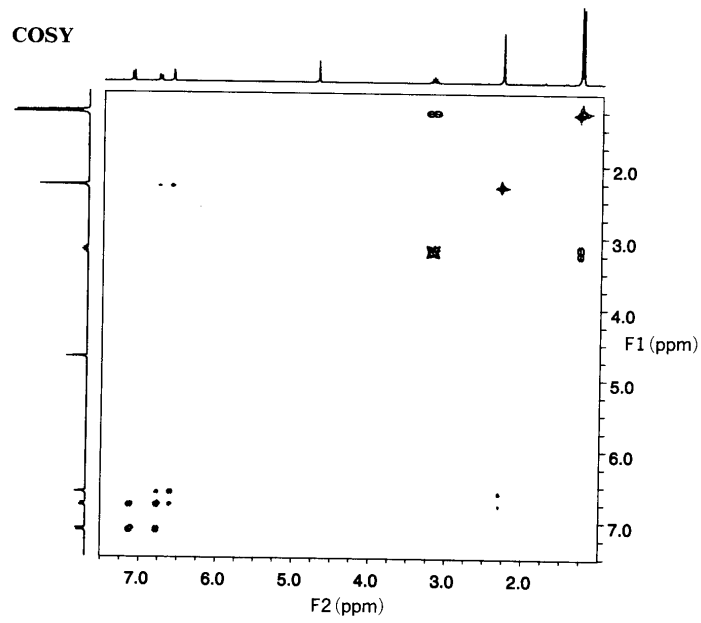


¹H NMR スペクトル

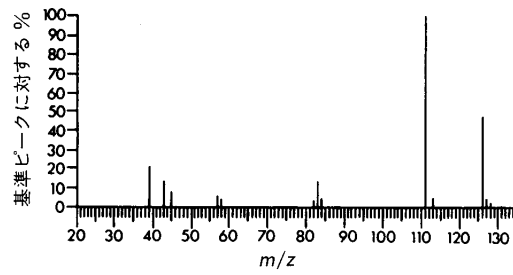


¹³C/DEPT





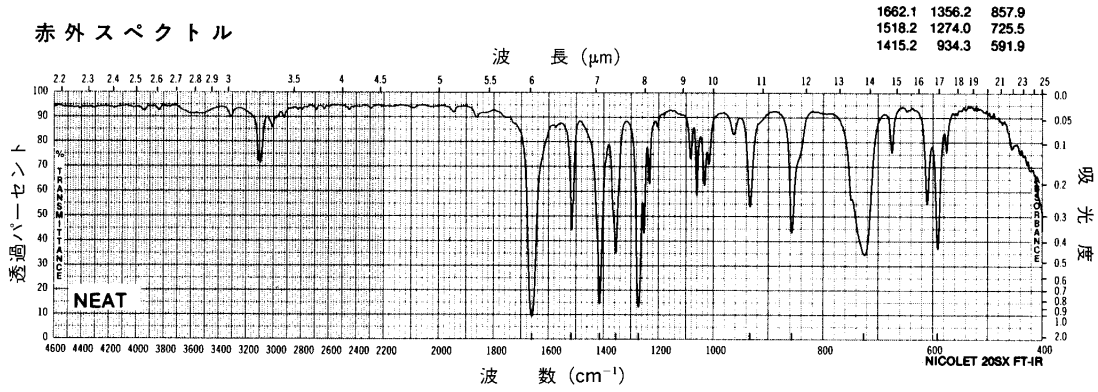
化合物 9・13 質量スペクトルデータ (相対強度)



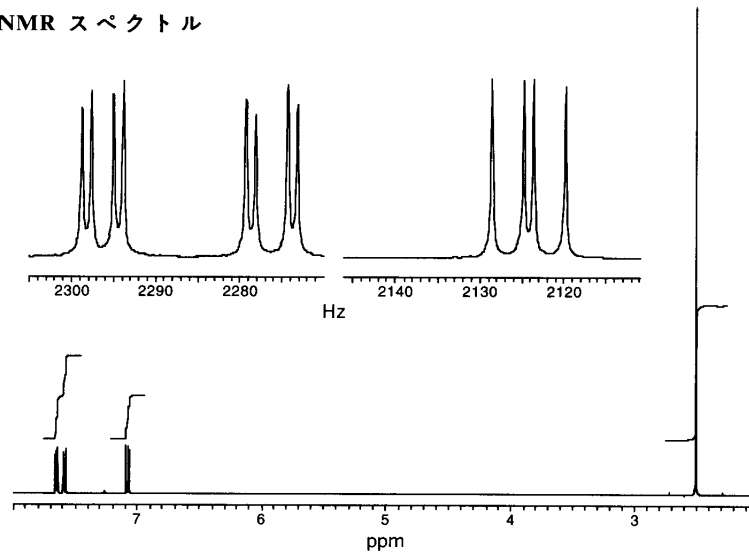
同位体存在量

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

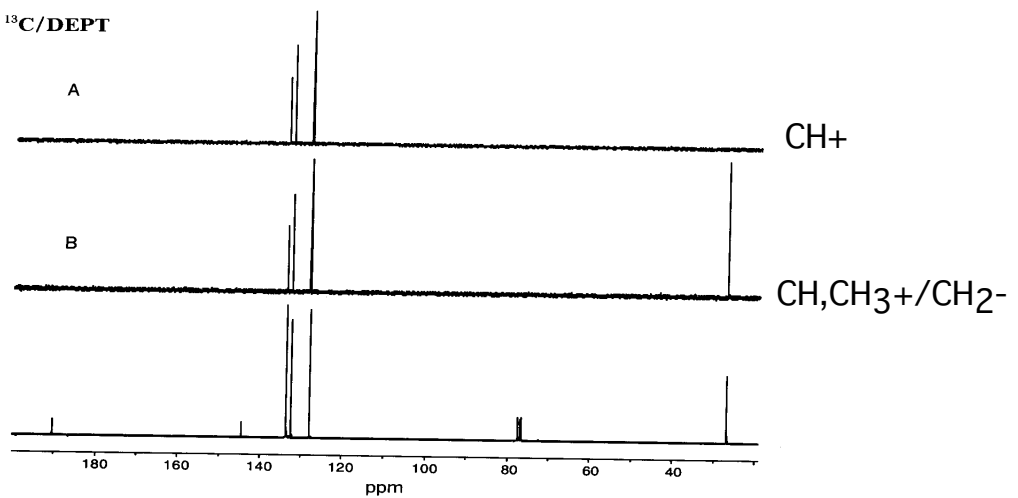
赤外スペクトル



¹H NMR スペクトル

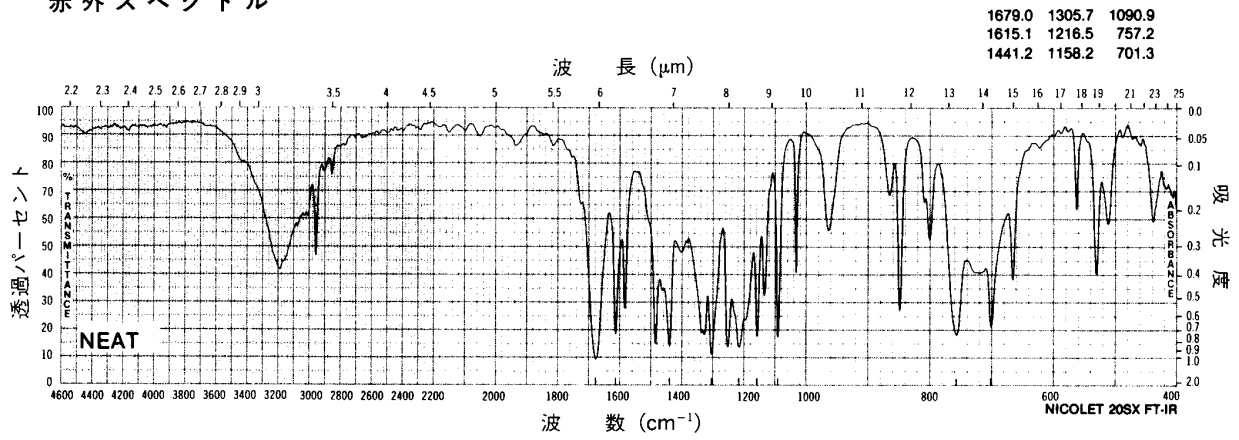


¹³C/DEPT

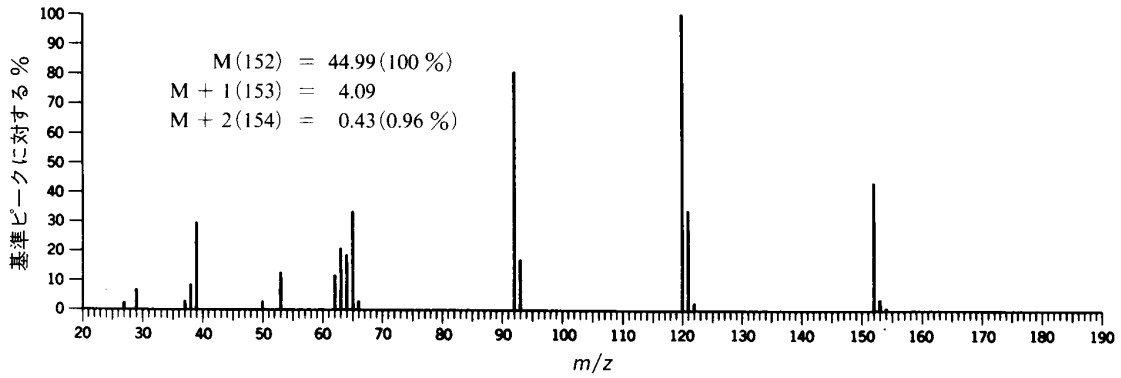


化合物 9・21

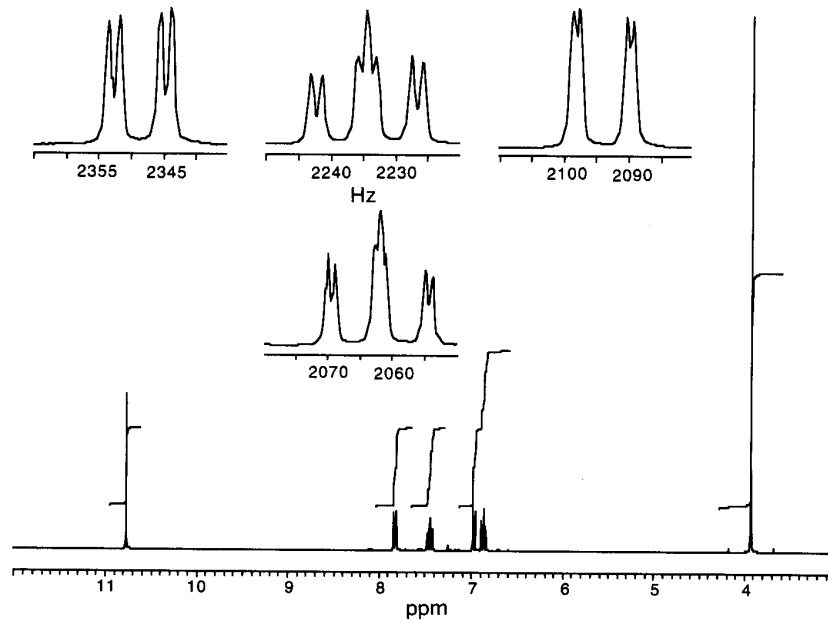
赤外スペクトル



質量スペクトルデータ (相対強度)

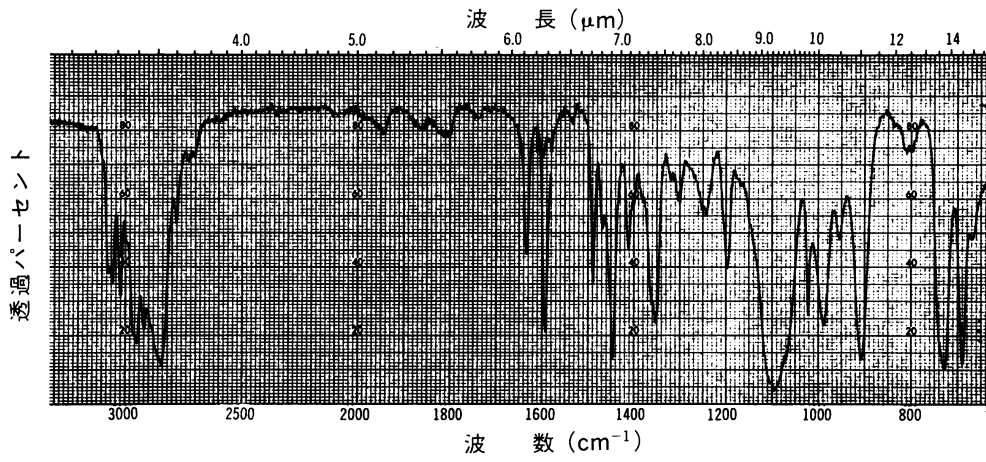


¹H NMR スペクトル

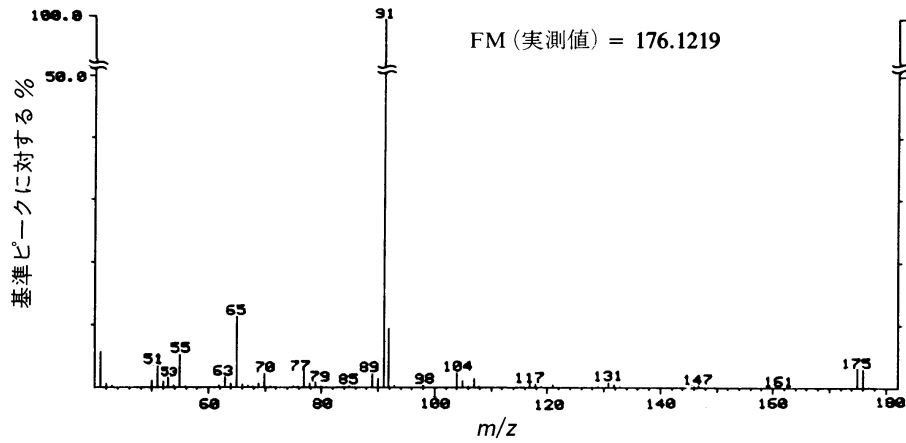


化合物 9・34

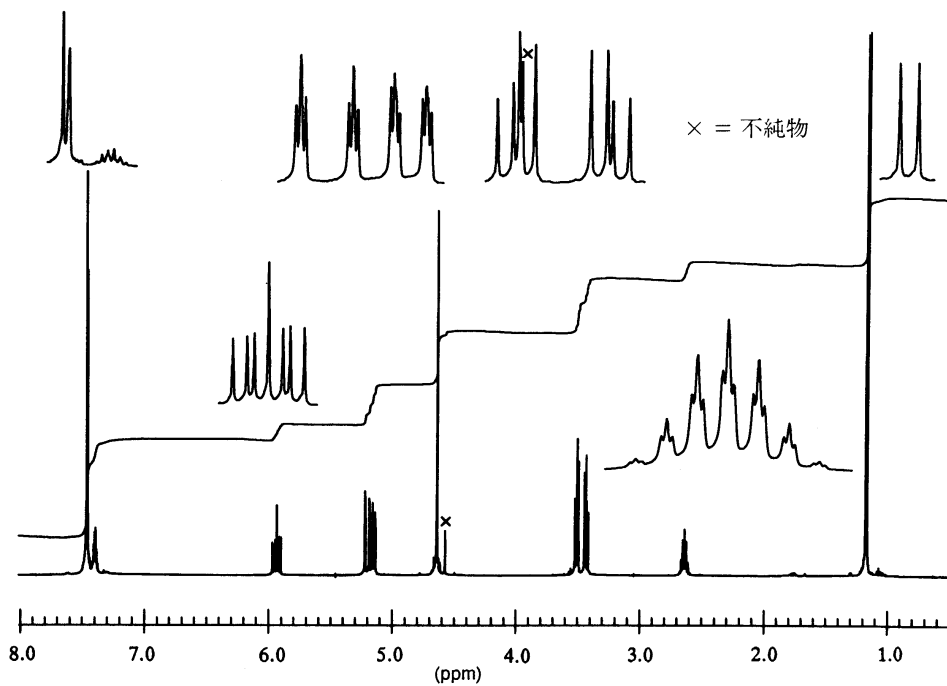
赤外スペクトル



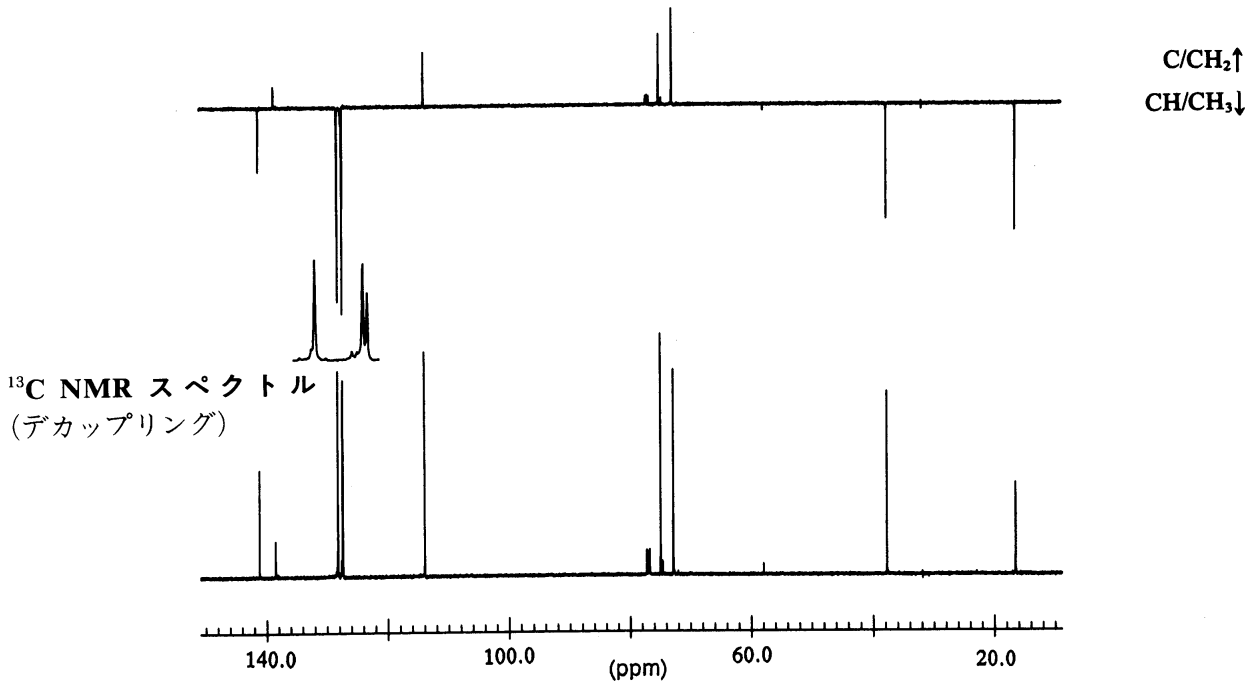
質量スペクトルデータ (相対強度)



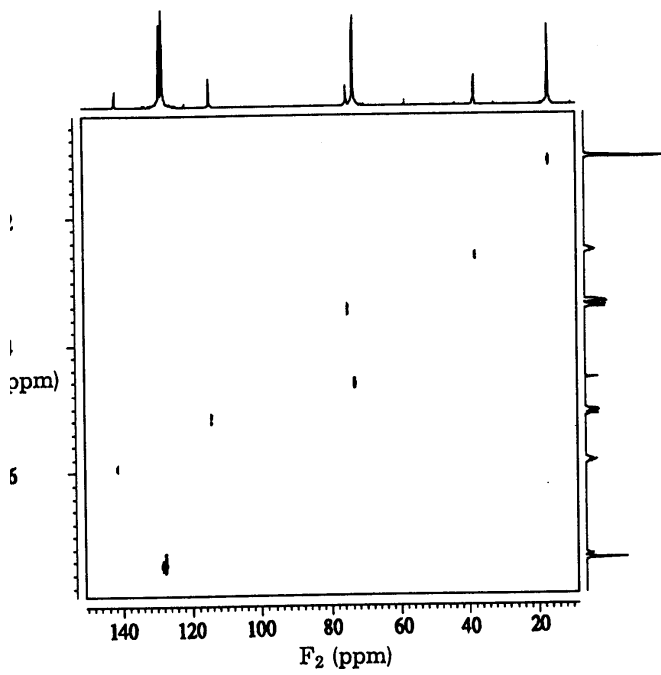
¹H NMR スペクトル (溶媒: CDCl₃, 500 MHz)



¹³C APT



H C COSY (HETCOR)



H H COSY

