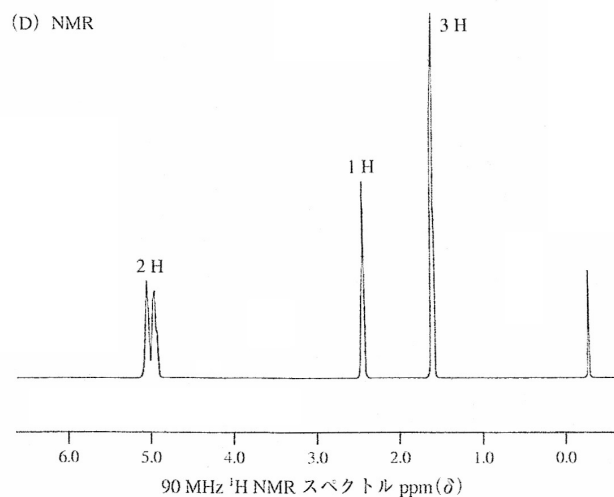
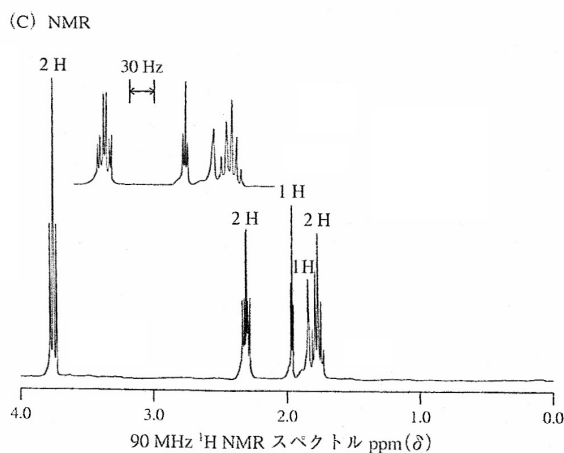


NMR 解析 (その2)

- 1 ある未知化合物の ^1H NMRを示す(下図)。この化合物を Lindlar 触媒の存在下で H_2 と反応させ、その生成物をオゾン分解した後、酸の水溶液中で Zn と処理すると、1当量の $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})-\text{C}(=\text{O})\text{H}$ と2当量の H_2CO を与える。元の化合物の構造を示せ。



- 2 つぎのスペクトルから構造を推定せよ。



- 3 分子式 $\text{C}_8\text{H}_{12}\text{O}$ をもつ二つのカルボニル化合物のスペクトルデータを以下に示した。それぞれの構造を考えよ。文字 **m** は、その部分のスペクトルが解釈困難な多重線として現れたことを意味する。

- (a) ^1H NMR : $\delta = 1.60(\text{m}, 4\text{H}), 2.15(\text{s}, 3\text{H}), 2.19(\text{m}, 4\text{H}), 6.78(\text{t}, 1\text{H})\text{ppm}$. ^{13}C NMR : $\delta = 21.8, 22.2, 23.2, 25.0, 26.2, 139.8, 140.7, 198.6\text{ppm}$.
- (b) ^1H NMR : $\delta = 0.94(\text{t}, 3\text{H}), 1.48(\text{sextet}, 2\text{H}), 2.21(\text{q}, 2\text{H}), 5.8\sim 7.1(\text{m}, 4\text{H}), 9.56(\text{d}, 1\text{H})\text{ppm}$. ^{13}C NMR : $\delta = 13.6, 21.9, 35.2, 129.0, 135.2, 146.7, 152.5, 193.2\text{ppm}$

^{13}C NMR は無視してよい。

4 化合物(a)~(d)の構造を考えよ。

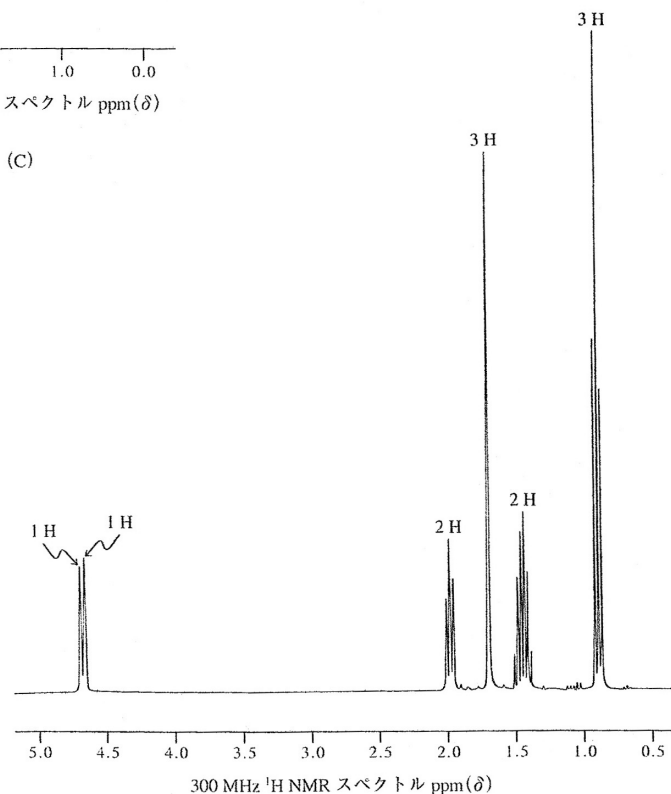
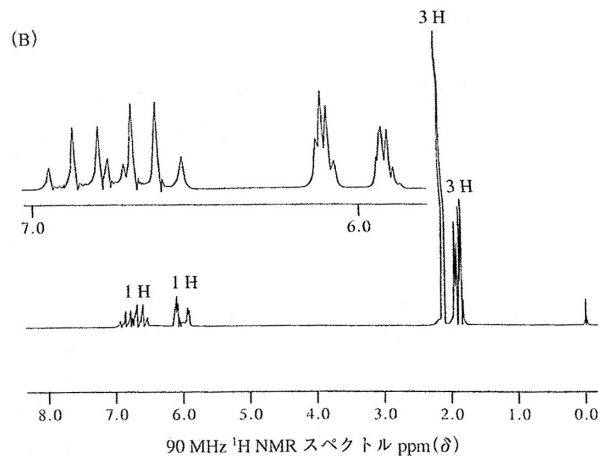
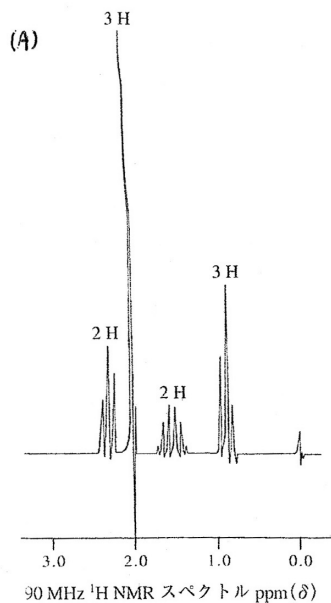
(a) $C_5H_{10}O$, NMR スペクトル (A) , UV $\lambda_{\max}(\epsilon) = 280(18) \text{ nm}$

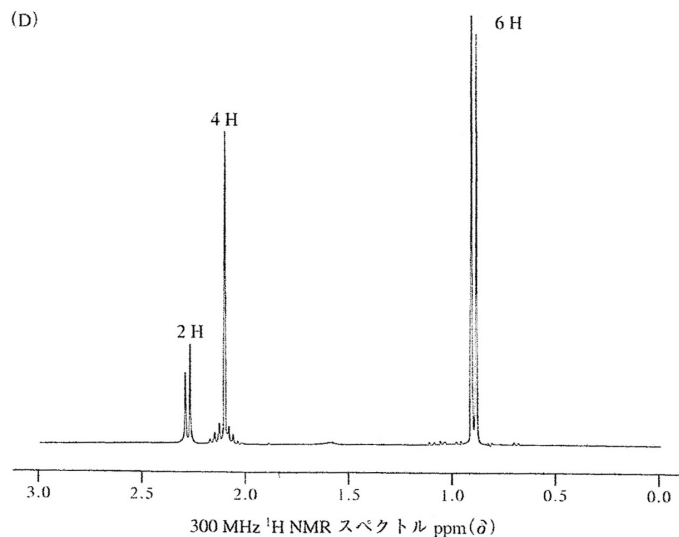
(b) C_5H_8O , NMR スペクトル (B) , UV $\lambda_{\max}(\epsilon) = 220(13, 200), 310(40) \text{ nm}$

(c) C_6H_{12} , NMR スペクトル (C) , UV $\lambda_{\max}(\epsilon) = 189(8, 000) \text{ nm}$

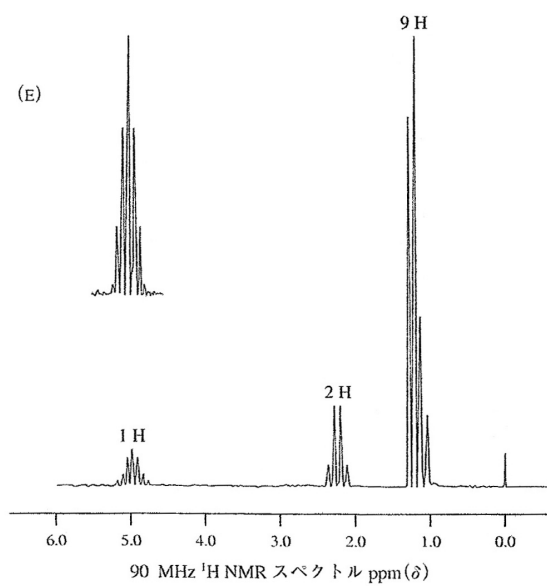
(d) $C_6H_{12}O$, NMR スペクトル (D) , UV $\lambda_{\max}(\epsilon) = 282(25) \text{ nm}$

UV スペクトルは無視してしてよい。



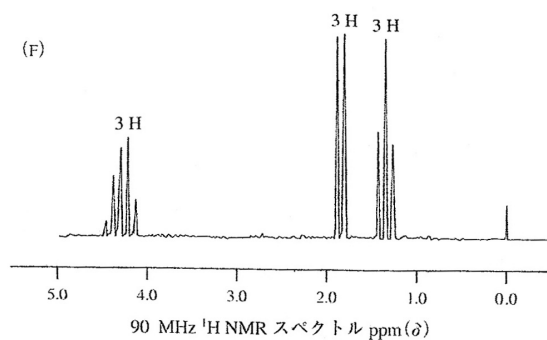


- 5 (a), (b)の構造を考えよ。
 (a) $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$, ^1H NMR: スペクトル(E)
 (b) $\text{C}_5\text{H}_9\text{O}_2\text{Br}$, ^1H NMR: スペクトル(F)



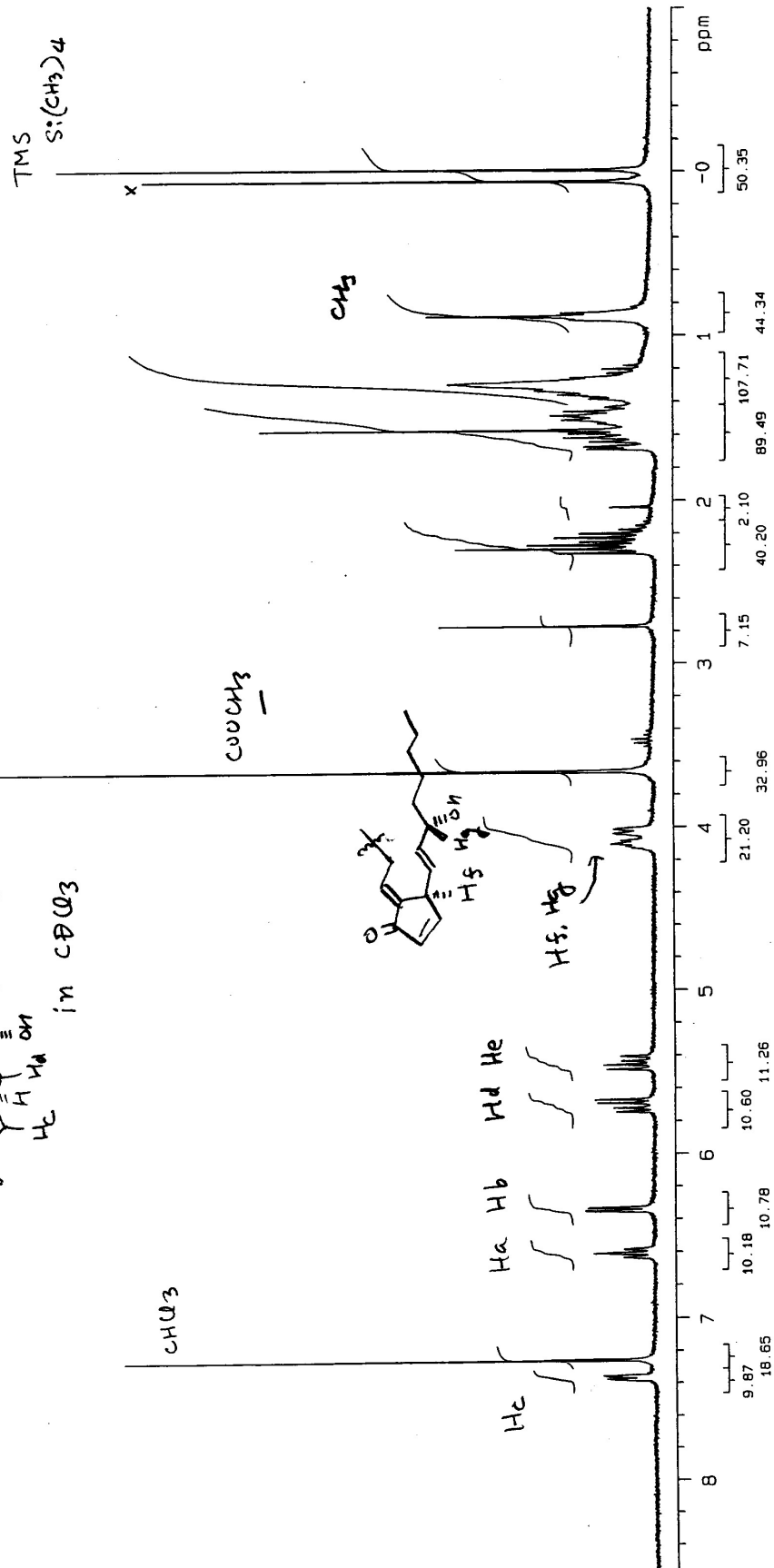
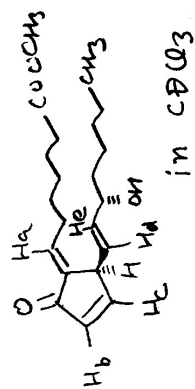
質量スペクトルは無視してよい。

未知物質 (E) の質量スペクトル	
m/z	基準ピークに対する相対強度 (%)
116	0.5
101	12
75	26
57	100
43	66
29	34



未知物質 (F) の質量スペクトル	
m/z	基準ピークに対する相対強度 (%)
182	13
180	13
109	78
107	77
101	3
29	100

Δ^7 -Prostaglandin Methyl Ester



核内レセプター・アゴニスト

Synthesis of PPAR γ Agonist

