

2007 年度応用化学実験専門「有機金属」(伊藤)試験問題

ある有機化合物 A に対して NaBH_4 を作用させると化合物 B が生成した。化合物 B に対して酸触媒存在下 $(\text{CH}_3\text{O})_3\text{CCH}_3$ を作用させると化合物 C が得られた。元素分析の結果は化合物 A の場合 C, 71.39%; H, 9.59%; O, 19.02%, B の場合 C, 69.72%; H, 11.70%; O, 18.58%, C の場合 C, 67.57%; H, 9.92%; O, 22.50% であった。化合物 A, B, C についてはそれぞれ図 1, 2, 3 のような ^1H NMR スペクトルが得られている。また化合物 C の IR を観測すると 1740cm^{-1} に大きなピークをしめした。次に問いに答えよ。

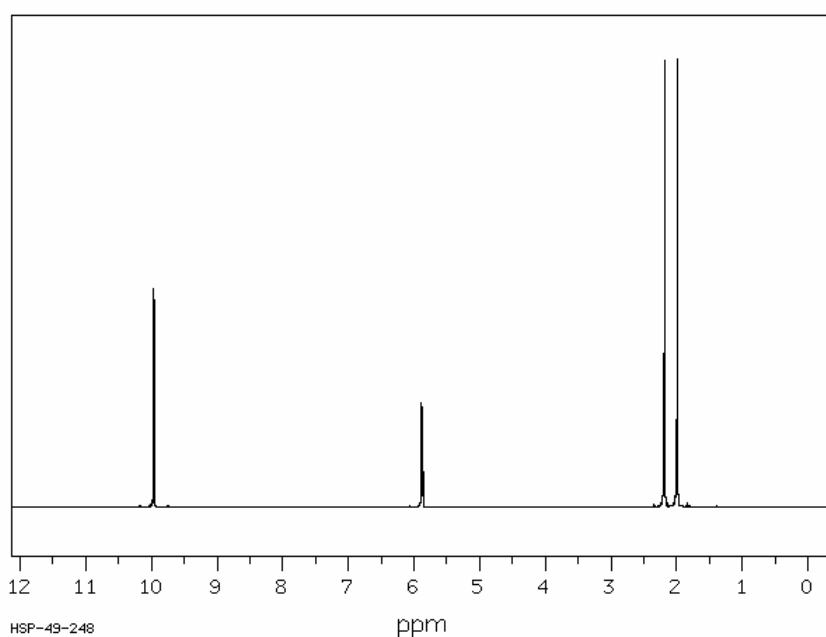
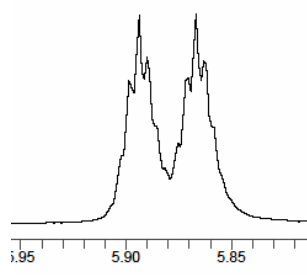


図 1(化合物 A) 積分値(左から) 1:1:3:3

ピークデータ

3985.75Hz	9.974 ppm
3977.66	9.953
2353.37	5.890
2345.28	5.869
874.48	2.189
873.08	2.185
797.12	1.995
795.52	1.991



6 ppm 付近の拡大図

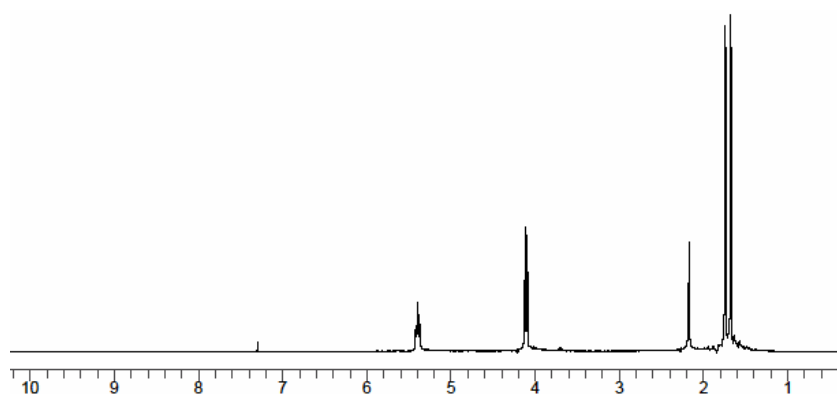
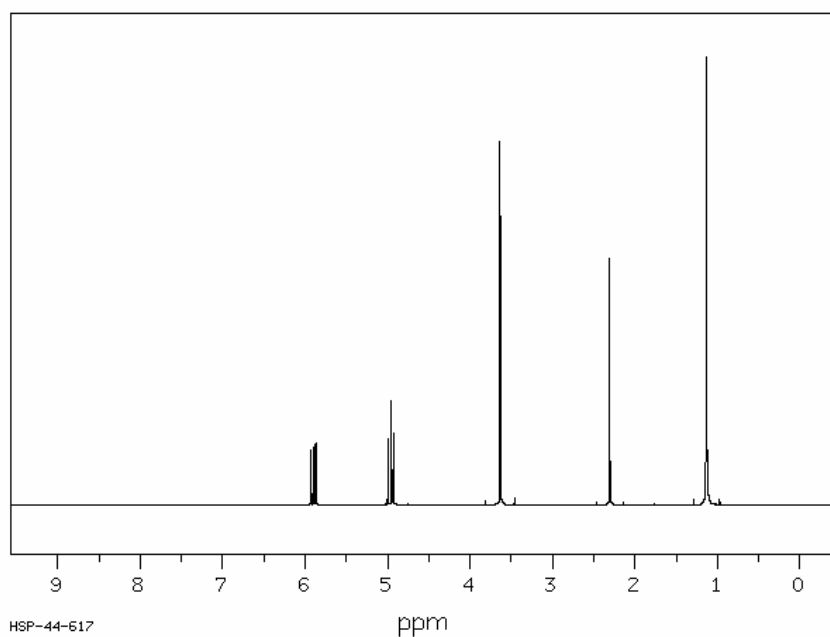


図 2(化合物 B) 積分値(左から) 1:2:1:3:3 左から 3 番目は D_2O を添加すると消失する

ピークデータ

1626.01Hz	5.418 ppm
1619.01	5.393
1612.01	5.370
1236.23	4.118
1229.23	4.095
652.31	2.173
522.51	1.740
503.39	1.677

(裏面に続く)



ピークデータ

2370.12 Hz	5.931 ppm
2359.50	5.904
2352.66	5.887
2342.04	5.861
1997.07	4.998
1995.97	4.994
1979.61	4.956
1978.51	4.952
1974.83	4.940
1973.73	4.936
1964.21	4.920
1963.11	4.917
1453.00	3.632
921.88	2.303
452.76	1.128

図 2(化合物 C) 積分値 (左から) 1:1:1:3:2:6

- (1) 化合物 A の構造について推論しなさい。
- (2) 図 1 の拡大図は理想的にはどのようなカップリングパターンになるか図示しなさい。
- (3) 化合物 B の構造について推論しなさい。
- (4) 化合物 C の構造について推論しなさい。
- (5) 化合物 A から化合物 B , 化合物 C への変換過程について説明せよ。

以上