

2008 年度応用化学実験専門「有機金属」(伊藤) 試験問題

問1 ある有機化合物 A に対して H_2O_2 及び NaOH を作用させると $\text{C}_9\text{H}_{12}\text{O}$ の組成をもつ化合物 B が生成し、 NaBH_4 を作用させると化合物 C が得られた。化合物 A と C については図1 および図2の $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz, Me_4Si) スペクトルが得られている。また元素分析の結果は、化合物 A は C, 81.04%; H, 8.16%, 化合物 C は C, 79.96%; H, 9.39% であった。下の問に答えなさい。

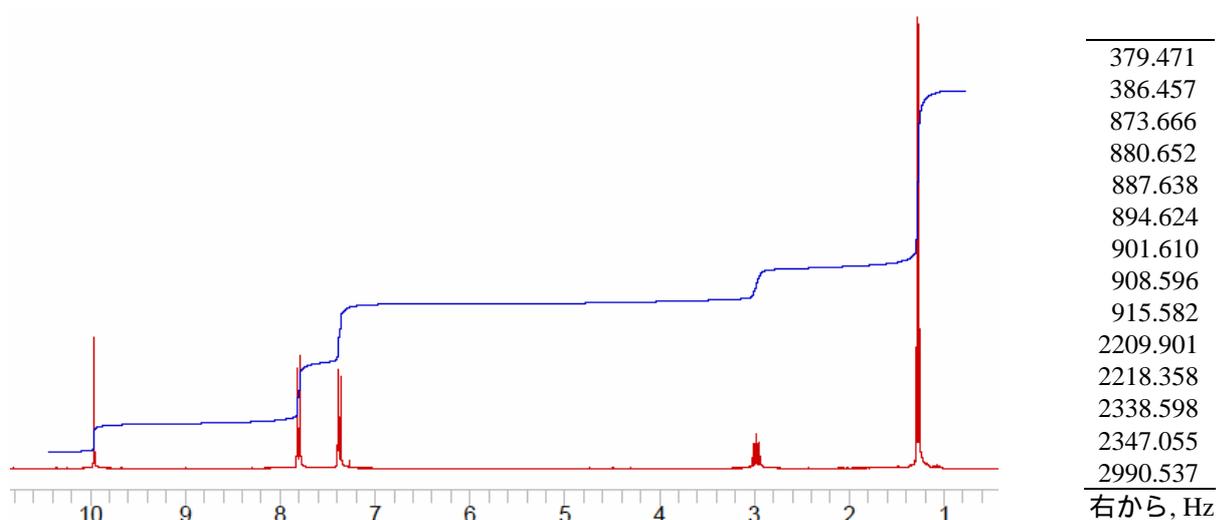
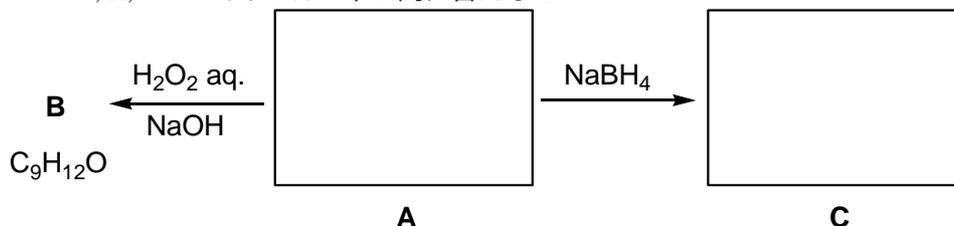


図1 化合物 A の $^1\text{H NMR}$

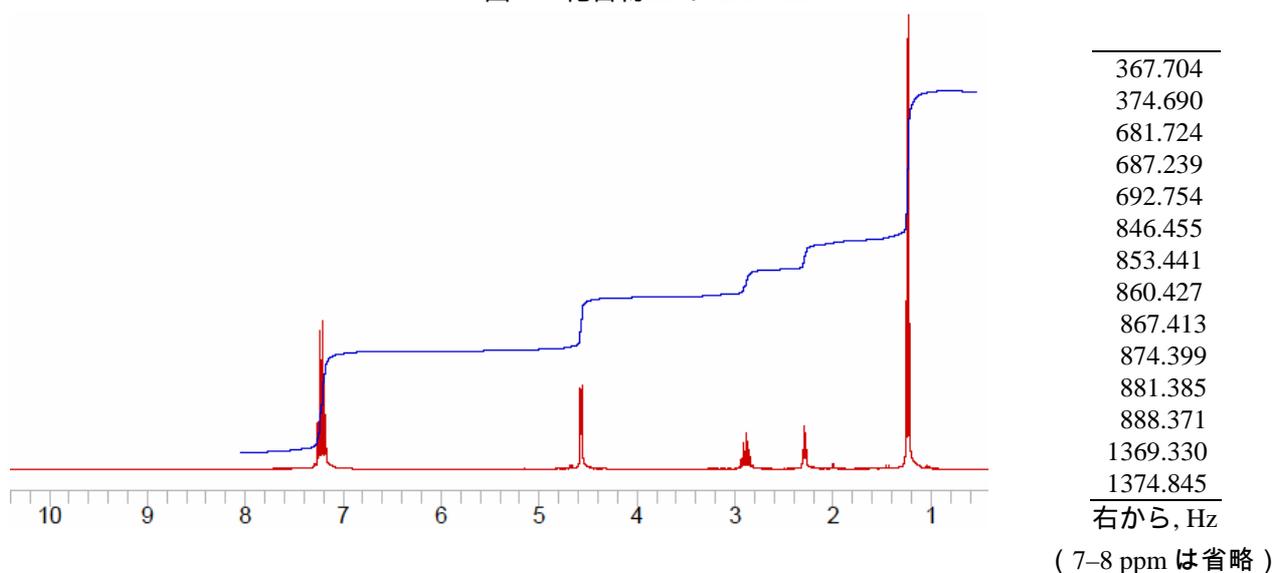
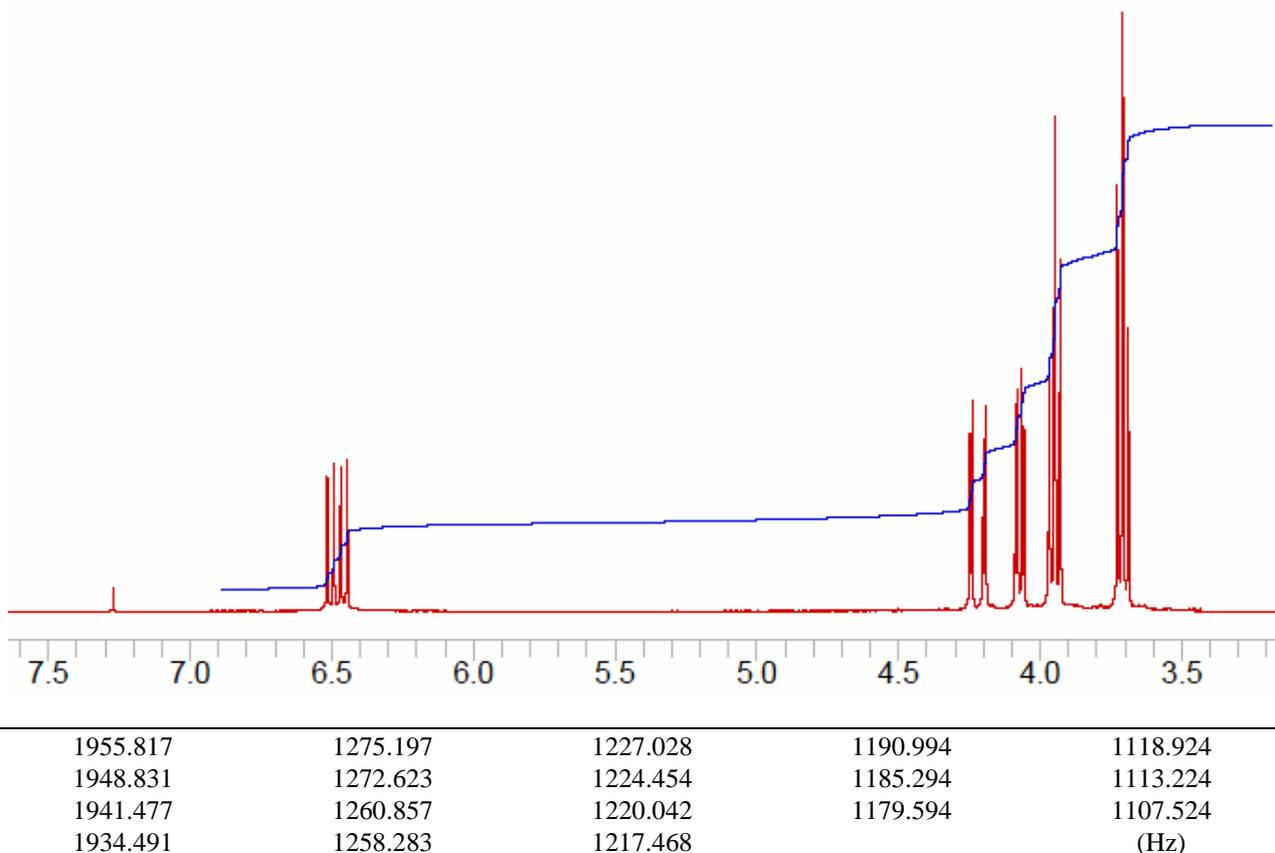


図2 化合物 C の $^1\text{H NMR}$
(裏面に続く)

- (1) 化合物 A の構造について推論し NMR のピークの帰属を説明しなさい。
- (2) 化合物 C の構造について推論し NMR のピークの帰属を説明しなさい。
- (3) 化合物 C の NMR サンプルに D₂O を添加するとどのような変化が見られるか予想しなさい。
- (4) 化合物 A から B への変換についてどのような反応が進行したのか考えて説明を試みよ。

問 2 $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ に対して NaOH を作用させると新たな化合物 D が生成した。この化合物 D の構造を調べるため元素分析を行ったところ C, 45.09%; H, 6.62% であり, ^1H NMR (CDCl_3 , 300 MHz, Me_4Si) を測定したところ図 3 のようなスペクトルが得られた。スペクトルの下の表は 7.0–3.5 ppm までのピークの詳細データをまとめたものである。化合物 D の構造について推論し図 3 のスペクトルのピークについて帰属を行いなさい。



以上