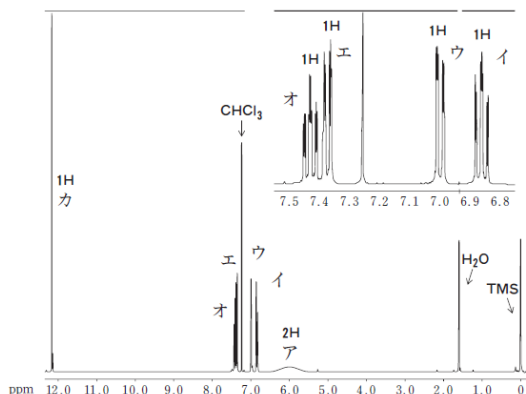
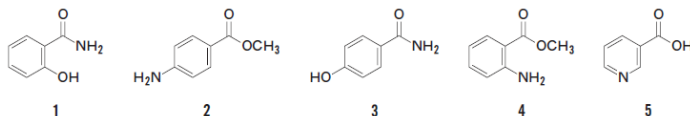


99-110

問題文

日本薬局方エテンザミドは、化合物Aを経て合成される。図はAの ^1H -NMRスペクトル(400MHz、 CDCl_3 、基準物質はテトラメチルシラン)である。Aの構造は1~5のうちどれか。1つ選べ。なお、アとカのシグナルは重水(D_2O)を添加するとほぼ消失した。



解答

1

解説

芳香環に直接結合している水素は大体 7~8 ppm くらいのところにピークが出てくるので、イ、ウ、エ、オがそれに当たります。

イ~オの4つはそれぞれ違ったピークなので、等価な水素ではないはずです。よって、この時点で選択肢2と3は不適切だとわかります(1,4-置換体だと2位と6位、3位と5位の水素がそれぞれ等価なので)。

また、イ~オのピークは、ダブルット(二重線)が2つと、トリプレット(三重線)が2つです。よって、選択肢5も外れます。もし選択肢5が正解なら、シングレットが1つと、ダブルットが2つ、トリプレットが1つという構成のはずです。

残るは選択肢1か4ですが、4のほうだと芳香環以外の水素が5つあります($-\text{OCH}_3$ と $-\text{NH}_2$)。しかし、NMRチャートには残りがアの2Hとカの1Hしかないので、水素の数が合いません。よって、選択肢1が正解となります(アが $-\text{NH}_2$ に該当し、カが $-\text{OH}$ に該当します)。

また、問題文中に「アとカのシグナルは重水(D_2O)を添加するとほぼ消失した」とありますが、これは溶液中ではイオン化しやすい $-\text{OH}$ や $-\text{NH}_2$ が存在するというヒントですので、ぜひ覚えておいてください。

($-\text{OH}$ や $-\text{NH}_2$ がそれぞれ $-\text{OD}$ や $-\text{ND}_2$ に置換されるため、 ^1H -NMRチャートには現れなくなります。)

以上より、正解は1です。

