

[Chem. Pharm. Bull., 28, 708 (1980)]

**^{13}C -Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectral Studies
on Polysubstituted Flavonoids I.**

^{13}C -NMR Spectra of Flavones

MUNEKAZU IINUMA, SHIN MATSUURA, KOUSUKE KUSUDA*

多置換フラボノイドの C-13核磁気共鳴スペクトルに関する研究 (第1報)

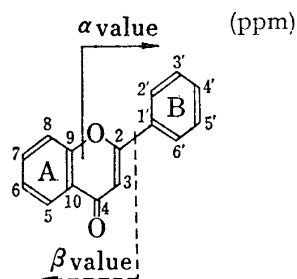
フラボン類の C-13核磁気共鳴スペクトルについて

飯沼宗和, 松浦 信, 楠田貢典*

フラボノイドの置換基および置換場所と各骨格炭素の化学シフトとの関連を体系化するために、無置換フラボンから始まり、A 環および B 環別々に段階的に置換基の数を増加させ、また置換基が増加するにつれて生ずる幾何異性を可能な限り合成し、フラボンの 3 位を除く全てを置換した nona 体まで 61 種類について ^{13}C -NMR を測定した。置換基と骨格炭素の化学シフトを検討し、1 位エーテル部分が A 環各炭素に寄与する恒数的な数値 (α 値) と benzopyrone 部分が B 環に寄与する数値 (β 値) を算出した。(Table I)

TABLE I. SCS of the Ether Moiety (α value) and Benzopyrone Moiety (β value) in Flavones

	C-9	C-8, 10	C-5, 7	C-6
α value	+28.5	-11.6	-2.6	-3.2
	C-1'	C-2', 6'	C-3', 5'	C-4'
β value	+2.5	-2.2	0	+2.6



さらに、メトキシル基が隣接して置換する場合の補正値 (O 値) を経験的に導き出し、これら α , β , O 値と置換基化学シフトによる計算値から 61 種のフラボンの骨格炭素の帰属が可能であることを明らかにした。

* 大阪市立大学原子力基礎研究所