

### บทที่ 3

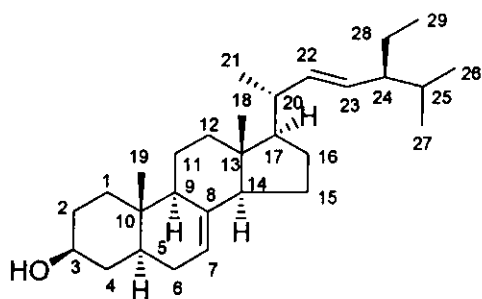
## ผลการวิจัยและอภิปรายผล

### การแยกองค์ประกอบทางเคมีให้บริสุทธิ์จากกิ่งและต้นอัครคัทวาร (*Clerodendrum serratum*)

การแยกองค์ประกอบทางเคมีให้บริสุทธิ์จากกิ่งและต้นอัครคัทวาร (*Clerodendrum serratum*) อาศัย ขบวนการแยกสารทางกายภาพและหรือการเปลี่ยนแปลงทางเคมี โดยเริ่มจากการระเหยเมทานอลออกจาก สารละลายที่ได้จากการนำกิ่งและต้นอัครคัทวารมาสกัดด้วยตัวทำละลายเมทานอลให้แห้งภายใต้เครื่องระเหย สารแบบลดความดัน จะได้ส่วนสกัดหยาบเมทานอลเป็นของหนืดสีน้ำตาล นำไปแยกด้วยวิธีคอลัมน์โครมาโทกราฟีแบบรวดเร็ว โดยใช้ซิลิกาเจลเป็นตัวอยู่กับที่ ค่อย ๆ เพิ่มขั้วของตัวชะที่ใช้เริ่มจากเฮกเซน เอทิลอะซิเทตต่อเฮกเซน เอทิลอะซิเทต เมทานอลต่อเอทิลอะซิเทต และเมทานอล ตามลำดับ สามารถแยกได้ 17 ส่วน ส่วนที่ 1-3 สารมีปริมาณน้อย และไม่เห็นการแยกของสารจึงไม่สนใจทำการศึกษาต่อ ส่วนที่ 4 แสดงผลบนโครมาโทกราฟีแผ่นบางเป็นสองจุด ในตัวเคลื่อนที่เฮกเซน จากนั้นทำการแยกองค์ประกอบที่มีในส่วนที่ 4 ให้บริสุทธิ์ด้วยวิธีคอลัมน์โครมาโทกราฟี 3 ครั้ง และตามด้วยการตกผลึกด้วยไดคลอโรมีเทนต่อเมทานอล ได้สารประกอบ bauer-9-ene-3-one (CS-S3) ซึ่งเป็นของแข็งสีขาว หนัก 2.0 มิลลิกรัม ส่วนที่ 5 และ 6 แสดงผลเป็นสองจุด ในตัวเคลื่อนที่ 4% เอทิลอะซิเทตในเฮกเซน จำนวน 6 ครั้ง และเมื่อสเปรย์ด้วยวานิลินจะเห็น 3 จุด และเห็นแถบยึดของสารหลังจากที่ทำให้ร้อนบนเตาไฟฟ้า เนื่องจากสารมีปริมาณน้อย และเห็นจุดของสารไม่ชัดเจน จึงไม่สนใจทำการศึกษาต่อ ส่วนที่ 7 แสดงผลเป็นสี่จุด ในตัวเคลื่อนที่ 10% เอทิลอะซิเทตในเฮกเซน จำนวน 7 ครั้ง เมื่อสเปรย์ด้วยวานิลินและทำให้ร้อนบนเตาไฟฟ้า จากนั้นทำการแยกองค์ประกอบทางเคมีที่มีในส่วนที่ 7 ให้บริสุทธิ์ด้วยวิธีคอลัมน์โครมาโทกราฟี 2 ครั้ง และทำการตกผลึกด้วยไดคลอโรมีเทนต่อเมทานอล ได้ผลึกใสไม่มีสี หนัก 34.3 มิลลิกรัม คือสารประกอบ spinasterol (CS-S1) ส่วนที่ 8 และ 9 แสดงผลเป็นสองจุด ที่มีค่าคงที่ของการเคลื่อนที่ ( $R_f$ ) = 0.25 และ 0.39 และเห็นแถบการยึดของสารหลังจากที่สเปรย์ด้วยวานิลินและทำให้ร้อนบนเตาไฟฟ้า ในตัวเคลื่อนที่ 4% อะซิโตนในเฮกเซน นำส่วนที่ 8 และ 9 มารวมกัน และตกผลึกด้วยคลอโรฟอร์มต่อเมทานอล ได้สารประกอบ spinasterol ซึ่งเป็นผลึกรูปเข็มใสไม่มีสี หนัก 33.0 มิลลิกรัม มีค่า  $R_f$  = 0.35 (20% เอทิลอะซิเทตในเฮกเซน 3 ครั้ง) ส่วนที่ 10 แสดงผลเป็นสองจุด ในตัวเคลื่อนที่ 10% เอทิลอะซิเทตในเฮกเซน จำนวน 7 ครั้ง เมื่อส่องภายใต้แสงอัลตราไวโอเลต และเมื่อสเปรย์ด้วยวานิลินและทำให้ร้อนบนเตาไฟฟ้า ก็จะเห็นเป็นสี่วงสามจุด โดยที่สองจุดเป็นจุดเดียวกันกับที่เห็นภายใต้แสงอัลตราไวโอเลต ส่วนอีกหนึ่งจุดเห็นเมื่อสเปรย์ด้วยวานิลินอย่างเดียว เนื่องจากสารมีปริมาณน้อย และไม่เห็นการแยกของสารที่ชัดเจนจึงไม่สนใจทำการศึกษาต่อ ส่วนที่ 11-13 ลักษณะเป็นของหนืดสีเขียว เนื่องจากในส่วนที่ 11-13 ไม่ปรากฏเป็นจุดสารเมื่อตรวจสอบด้วยโครมาโทกราฟีแผ่นบาง แต่ปรากฏเป็นแถบยึด จึงไม่สนใจทำการศึกษาต่อ ส่วนที่ 14 ลักษณะเป็นของแข็งผสมอยู่กับ

ของเหลวสีเขียว นำไปแยกด้วยวิธีคอลัมน์โครมาโทกราฟีโดยใช้ซิลิกาเจลเป็นตัวอยู่กับที่ และชะคอลัมน์ด้วยคลอโรฟอร์ม อะซิโตนต่อคลอโรฟอร์ม อะซิโตน เมทานอลต่ออะซิโตน และเมทานอล ตามลำดับ ได้สารประกอบ spinasterol จากการตกผลึกด้วยคลอโรฟอร์มต่อเมทานอล ซึ่งเป็นของแข็งสีขาว หนัก 1.6 มิลลิกรัม และสารประกอบ CS-S4 จากการตกผลึกด้วยคลอโรฟอร์มต่ออะซิโตน ซึ่งเป็นของแข็งมีลักษณะเป็นเกล็ดเล็ก ๆ สีขาว หนัก 12.5 มิลลิกรัม ส่วนที่ 15 ลักษณะเป็นของเหลวหนืดสีน้ำตาลแดง นำไปแยกด้วยวิธีคอลัมน์โครมาโทกราฟีโดยใช้ซิลิกาเจลเป็นตัวอยู่กับที่ ชะคอลัมน์ด้วยเอทิลอะซิเทท และเพิ่มความเข้มข้นด้วยเมทานอลจนถึง 100% เมทานอล ตามลำดับ ได้สารประกอบ spinasterol ซึ่งเป็นของแข็งมีลักษณะเป็นเกล็ดเล็ก ๆ สีขาว หนัก 20.1 มิลลิกรัม และสารประกอบ CS-S4 ซึ่งมีลักษณะเป็นของแข็งเป็นเกล็ดเล็ก ๆ สีขาว เป็นมันวาวหนัก 30.0 มิลลิกรัม ส่วนที่ 16 ลักษณะเป็นของเหลวหนืดสีน้ำตาลแดง นำไปตกผลึกด้วยเมทานอลต่อเอทิลอะซิเทท ได้สารประกอบ CS-S2 ซึ่งเป็นผลึกใสไม่มีสี หนัก 1.81 กรัม นั่นคือ น้ำตาลซูโครส ส่วนที่ 17 ลักษณะเป็นของหนืดสีน้ำตาลแดง ไม่ได้ทำการศึกษาต่อ เนื่องจากไม่เห็นการแยกของสารทั้งในระบบบนอร์มอเฟส และรีเวสเฟส บนโครมาโทกราฟีแผ่นบาง

#### การวิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบ CS-S1 : spinasterol



รูปที่ 1 โครงสร้างของสารประกอบ CS-S1

สารประกอบ CS-S1 เป็นผลึกรูปเข็มใสไม่มีสี มีจุดหลอมเหลว  $156.5-159.5^{\circ}$  ซ แสดงค่าสเปซฟิฟิโรเทชัน ( $[\alpha]_D^{30}$ )  $+10.91^{\circ}$  ในตัวทำละลายคลอโรฟอร์ม เข้มข้น  $1.10 \times 10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> และมีค่า  $R_f = 0.34$  ในตัวเคลื่อนที่ 30% เอทิลอะซิเททในเฮกเซน

IR สเปกตรัม (รูปที่ 2) แสดงแถบการดูดกลืนแสงที่  $3454 \text{ cm}^{-1}$  (O-H stretching) แสดงว่ามีหมู่ฟังก์ชันไฮดรอกซิล

<sup>1</sup>H NMR สเปกตรัม (รูปที่ 3) แสดงค่า chemical shift และค่าคงที่ของการคู่ควบ (ตารางที่ 10) สามารถจำแนกโปรตอนที่ปรากฏดังนี้ มีหมู่เมทิลจำนวน 6 หมู่ซึ่งจะเป็นของหมู่ tertiary methyl จำนวน 2 หมู่ ปรากฏสัญญาณเป็น singlet 2 ชุดที่  $\delta$  0.55 และ 0.80 ชุดละ 3 โปรตอนเป็นโปรตอนในตำแหน่ง H-18

และ H-19 ตามลำดับ มีสัญญาณของหมู่ secondary methyl จำนวน 3 หมู่ปรากฏเป็น doublet 3 ชุด ที่  $\delta$  1.03 ( $J = 6.5$  Hz, 3H), 0.80 ( $J = 6.0$  Hz, 3H) และ 0.85 ( $J = 6.5$  Hz, 3H) เป็นโปรตอนในตำแหน่ง H-21, H-26 และ H-27 ตามลำดับ สัญญาณปรากฏเป็น triplet ของ H-29 ที่  $\delta$  0.81 ( $J = 7.3$  Hz, 3H) จะเป็นสัญญาณของหมู่ primary methyl ค่า chemical shift ที่  $\delta$  5.16 (*dd*,  $J = 15.0$  และ 8.5 Hz, 1H) และ 5.03 (*dd*,  $J = 15.0$  และ 8.5 Hz, 1H) เป็นสัญญาณของ olefinic โปรตอน ซึ่งเป็น *trans*-disubstituted double bond ที่ตำแหน่ง 22 และ 23 ตามลำดับ พิจารณาจากค่าคงที่ของการคู่ควบของโปรตอนทั้งสองแสดงค่า 15.0 Hz ซึ่งให้เห็นว่าโปรตอนทั้งสองอยู่ในลักษณะที่เป็น *trans*- กัน นอกจากนี้ยังมีอีกหนึ่ง olefinic โปรตอน ที่ปรากฏสัญญาณที่  $\delta$  5.16 (*d*,  $J = 6.5$  Hz, 1H) ซึ่งเป็นโปรตอนในตำแหน่ง H-7 มีหนึ่ง oxymethine โปรตอน ปรากฏสัญญาณที่  $\delta$  3.61 (*tt*,  $J = 11.0$  และ 4.5 Hz, 1H) ซึ่งเป็นโปรตอนที่เกาะอยู่ที่ตำแหน่ง C-3 จากค่าคงที่ของการคู่ควบของโปรตอนนี้ซึ่งเป็นค่าที่ใหญ่ ( $J = 11.0$  Hz) ของ H-3 จะเป็นค่า  $J^{aa}$  ( $J^{axial-axial}$ ) ดังนั้นโปรตอนนี้จะ เป็นโปรตอนในตำแหน่งแอลฟา ( $\alpha$ -proton) ยังคงมี 16 โปรตอนของ methylene และอีก 6 โปรตอนของ methine ที่ปรากฏค่า chemical shift ในช่วง  $\delta$  0.81-2.03 ppm

$^{13}\text{C}$  NMR สเปกตรัม (รูปที่ 4) (ตารางที่ 10) แสดงจำนวน 29 สัญญาณของจำนวนคาร์บอน 29 คาร์บอน สามารถวิเคราะห์โดยอาศัยข้อมูลจาก DEPT (รูปที่ 5) ซึ่งว่ามี methyl คาร์บอนจำนวน 6 คาร์บอน methylene คาร์บอนจำนวน 9 คาร์บอน methine คาร์บอนจำนวน 11 คาร์บอน และ quaternary คาร์บอนจำนวน 3 คาร์บอน

ข้อมูล HMBC (รูปที่ 7) (ตารางที่ 10) แสดงว่าโปรตอนตำแหน่ง Me-21 ( $\delta$  1.03) มีความสัมพันธ์กับ C-17 ( $\delta$  55.84), C-22 ( $\delta$  138.17) และ C-20 ( $\delta$  40.84) และโปรตอนตำแหน่ง H-22 ( $\delta$  5.16) มีความสัมพันธ์กับ C-17 ( $\delta$  55.84), C-24 ( $\delta$  51.23), C-21 ( $\delta$  138.17), C-20 ( $\delta$  40.84) และ C-23 ( $\delta$  129.39) ซึ่งยืนยันว่า side chain ในสารประกอบ CS-S1 ต่อกับคาร์บอนที่ C-17 ของโครงสร้างหลัก อีกทางหนึ่งโปรตอนตำแหน่ง H-19 ( $\delta$  0.80) มีความสัมพันธ์กับ C-1 ( $\delta$  37.11), C-5 ( $\delta$  40.22), C-9 ( $\delta$  49.40) และ C-10 ( $\delta$  34.19) ซึ่งยืนยันตำแหน่งของ Me-19 ต่อกับคาร์บอนที่ C-10 ( $\delta$  34.19) สุดท้ายโปรตอนตำแหน่ง H-14 ( $\delta$  1.79) มีความสัมพันธ์กับ C-8 ( $\delta$  139.55) และ C-7 ( $\delta$  117.44) ซึ่งยืนยันตำแหน่งของ trisubstituted double bond อยู่ที่ C-7

นอกจากนั้นการเปรียบเทียบค่าสเปซิฟิกโรเทชันของสารประกอบ CS-S1 ซึ่งมีค่า  $[\alpha]_D^{30} +10.91^\circ$  ในตัวทำละลายคลอโรฟอร์ม เข้มข้น  $1.10 \times 10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> กับค่าสเปซิฟิกโรเทชันของสารประกอบ spinasterol มีค่า  $[\alpha]_D^{20} -3^\circ$  (Sucrow, W. *et al.*, 1976) และสารประกอบ chondrillasterol มีค่า  $[\alpha]_D^{22} +1.7^\circ$  ในตัวทำละลายคลอโรฟอร์ม เข้มข้น  $50.00 \times 10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> (Wandji, J. *et al.*, 2002) จากค่าสเปซิฟิกโรเทชันของสารประกอบทั้งสองไม่สามารถระบุได้ว่าสารประกอบ CS-S1 จะเหมือนกับสารใด เนื่องจากสารประกอบทั้งสองมีสเตอริโอเคมีสัมพันธ์เหมือนกันยกเว้นที่ตำแหน่ง 24 ที่ต่างกัน แต่ถ้าพิจารณาจากค่าการเปรียบเทียบค่าสัญญาณคาร์บอนของสารประกอบ CS-S1 กับค่าสัญญาณคาร์บอนของสารประกอบ spinasterol (Kojima, H. *et al.*, 1990) และสารประกอบ chondrillasterol (Wandji, J. *et al.*, 2002) ดังแสดงใน ตารางที่ 11 จากข้อ

ผลที่ได้จะเห็นว่าค่าสัญญาณของคาร์บอนของสารประกอบ CS-S1 มีค่าใกล้เคียงกันกับของสารประกอบ spinasterol จึงคาดว่าสารประกอบ CS-S1 น่าจะมีโครงสร้างดังแสดง

ตารางที่ 10 แสดงข้อมูล  $^1\text{H NMR}$   $^{13}\text{C NMR}$  และ 2D HMBC ของสารประกอบ CS-S1

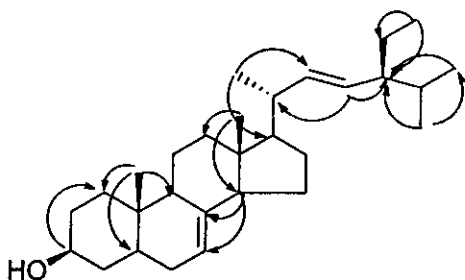
ตำแหน่ง	$\delta_{\text{H}}$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_{\text{C}}$	HMBC
1	1.80 (m, 1H); 1.06 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	37.11	C-2, C-5, C-10
2	1.79 (m, 1H); 1.36 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	31.45	C-3
3	3.61 (t, 11.0 และ 4.5, 1H)	CH	71.05	C-1
4	1.70 (m, 1H); 1.25 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	37.96	C-2, C-3, C-10
5	1.37 (m, 1H)	CH	40.22	
6	1.74 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	29.61	
7	5.16 (d, 6.5, 1H)	CH	117.44	
8	-	C	139.55	
9	1.64 (m, 1H)	CH	49.40	
10	-	C	34.19	
11	1.59 (m, 1H); 1.44 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	21.52	C-10, C-12, C-13
12	2.03 (m, 1H); 1.22 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	39.42	C-11, C-13
13	-	C	43.26	
14	1.79 (m, 1H)	CH	55.10	C-7, C-8
15	1.34 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	23.00	
16	1.30 (m, 1H); 1.24 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	28.51	
17	1.25 (m, 1H)	CH	55.84	C-14
18	0.55 (s, 3H)	CH <sub>3</sub>	12.03	C-12, C-13, C-14
19	0.80 (s, 3H)	CH <sub>3</sub>	13.04 <sup>a</sup>	C-1, C-5, C-9, C-10
20	2.03 (m, 1H)	CH	40.84	C-23
21	1.03 (d, 6.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	21.36	C-17, C-20, C-22
22	5.16 (dd, 15.0, 8.5, 1H)	CH	138.17	C-17, C-20, C-21, C-23, C-24
23	5.03 (dd, 15.0, 8.5, 1H)	CH	129.39	C-20, C-22, C-24, C-25, C-28
24	1.52 (m, 1H)	CH	51.23	
25	1.53 (m, 1H)	CH	31.86	C-22, C-24, C-26, C-27
26	0.80 (d, 6.0, 3H)	CH <sub>3</sub>	18.97	C-24, C-25
27	0.85 (d, 6.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	21.10	C-24, C-25, C-26
28	*	CH <sub>2</sub>	25.39	

## ตารางที่ 10 (ต่อ)

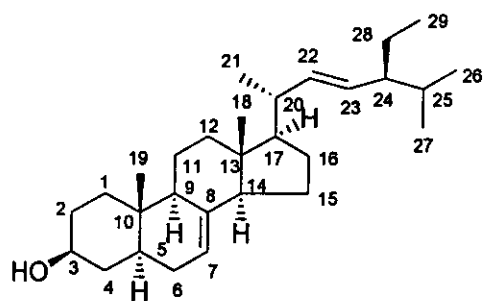
ตำแหน่ง	$\delta_H$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_C$	HMBC
29	0.81 (t, 7.3, 3H)	CH <sub>3</sub>	12.25 <sup>a</sup>	C-24, C-25

<sup>a</sup> ข้อมูลอาจสลับที่กันได้

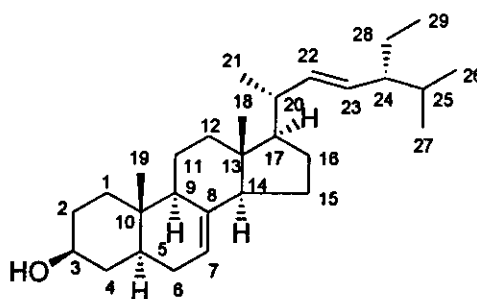
\* ไม่ปรากฏ



รูปที่ 8 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างโปรตอนกับคาร์บอนบางส่วนจากข้อมูล 2D HMBC



spinasterol



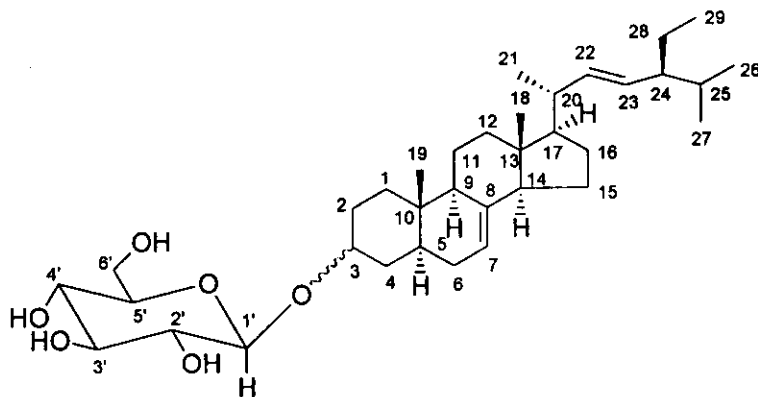
chondrillasterol

ตารางที่ 11 แสดงข้อมูล  $^{13}\text{C}$  NMR สเปกตรัมของสารประกอบ CS-S1 เปรียบเทียบกับสารประกอบ spinasterol และสารประกอบ chondrillasterol

ตำแหน่ง	$\delta_{\text{C}}$ (ppm)		
	CS-S1 <sup>a</sup>	spinasterol <sup>c</sup>	chondrillasterol <sup>c</sup>
1	37.11	37.1	37.1
2	31.45	31.4	26.1
3	71.05	71.0	71.0
4	37.96	38.0	34.2
5	40.22	40.2	40.2
6	29.61	29.6	29.6
7	117.44	117.4	117.4
8	139.55	139.5	139.5
9	49.40	49.4	49.4
10	34.19	34.2	34.2
11	21.52	21.5	21.5
12	39.42	39.4	39.4
13	43.26	43.3	43.3
14	55.10	55.1	55.1
15	23.00	23.0	23.0
16	28.51	28.5	28.5
17	55.84	55.8	55.9
18	12.03	12.0	12.0
19	13.04 <sup>b</sup>	13.0	13.0
20	40.84	40.8	40.8
21	21.36	21.4	21.1
22	138.17	138.7	138.2
23	129.39	129.4	129.4
24	51.23	51.2	51.2
25	31.86	31.9	31.9
26	18.97 <sup>d</sup>	21.1	19.0
27	21.10 <sup>d</sup>	19.0	21.4
28	25.39	25.4	25.4
29	12.25 <sup>b</sup>	12.3	12.2

<sup>a</sup> 125 MHz in  $\text{CDCl}_3$ ; <sup>b</sup> ข้อมูลอาจสลับที่กันได้; <sup>c</sup> 100 MHz in  $\text{CDCl}_3$ ; <sup>d</sup> ข้อมูลอาจสลับที่กันได้

การวิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบ CS-S4 : 3-O- $\beta$ -D-glucofuranosyl-stigmasta-7,22-diene



รูปที่ 9 โครงสร้างของสารประกอบ CS-S4

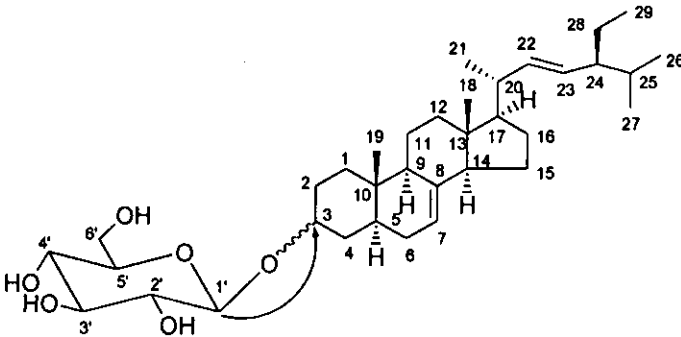
สารประกอบ CS-S4 เป็นของแข็งสีขาว มีจุดหลอมเหลว 262.4-262.7<sup>o</sup> ซ แสดงค่า  $[\alpha]_D^{29} +90.00^o$  ในตัวทำละลายคลอโรฟอร์ม เข้มข้น  $1.00 \times 10^{-2} \text{ g/cm}^3$  และมีค่า  $R_f = 0.12$  ในตัวเคลื่อนที่ 40% อะซิโตนในคลอโรฟอร์ม จำนวน 4 ครั้ง

IR สเปกตรัม (รูปที่ 10) แสดงแถบการดูดกลืนแสงที่  $3410 \text{ cm}^{-1}$  (O-H stretching) แสดงว่ามีหมู่ฟังก์ชันไฮดรอกซิล

เปรียบเทียบ  $^1\text{H}$  NMR สเปกตรัม (รูปที่ 11) (ตารางที่ 12) ของสารประกอบ CS-S4 กับ CS-S1 แสดงค่า ที่ใกล้เคียงกันในส่วนของสเตียรอล [ $\delta$  5.12 (*dd*,  $J = 15.5$  และ  $9.0 \text{ Hz}$ , 1H) และ 5.07 (*dd*,  $J = 15.5$  และ  $9.0 \text{ Hz}$ , 1H) สำหรับ *trans*-disubstituted double bond ที่ C- 22 และ C-23 ตามลำดับ สัญญาณของ olefinic โปรตอนปรากฏเป็น broad doublet ที่  $\delta$  5.17 ( $J = 2.5 \text{ Hz}$ , 1H) สัญญาณของ oxymethine โปรตอน ที่  $\delta$  3.90 (*m*, 1H) ที่ตำแหน่ง C-3 ในวง A ของสเตียรอล และหมู่เมทิลจำนวน 6 หมู่] ความแตกต่างระหว่าง CS-S4 กับ CS-S1 ตรงที่มีส่วนของน้ำตาลเพิ่มมา ซึ่งปรากฏสัญญาณของ anomeric โปรตอน ที่  $\delta$  4.93 (*d*,  $J = 8.0 \text{ Hz}$ ) จากค่าคงที่ของการคู่ควบ ( $J^{\text{aa}} = 8.0 \text{ Hz}$ ) ยืนยันว่าโปรตอนนี้อยู่ในตำแหน่งแอลฟา สัญญาณของโปรตอนอื่นของน้ำตาลปรากฏที่  $\delta$  3.87 (*m*, 1H),  $\delta$  4.18 (*t*,  $J = 8.5 \text{ Hz}$ , 1H),  $\delta$  4.13 (*t*,  $J = 8.5 \text{ Hz}$ , 1H),  $\delta$  3.84 (*m*, 1H),  $\delta$  4.48 (*brd*,  $J = 12.0 \text{ Hz}$ , 1H) และ  $\delta$  4.31 (*brdd*,  $J = 12.0$  และ  $5.5 \text{ Hz}$ , 1H) ซึ่งเป็นโปรตอนที่ตำแหน่ง H-2', H-3', H-4', H-5' และ H-6' ตามลำดับ จากผลนี้บ่งบอกว่าส่วนที่เป็นน้ำตาลคือกลูโคส ในของส่วนที่เป็น aglycone เปรียบเทียบกับค่า  $^1\text{H}$  NMR สเปกตรัมกับสารประกอบ CS-S1

$^{13}\text{C}$  NMR สเปกตรัม (รูปที่ 12) (ตารางที่ 12) แสดงจำนวน 35 สัญญาณของจำนวนคาร์บอน 35 คาร์บอน สามารถวิเคราะห์โดยอาศัยข้อมูลจาก DEPT (รูปที่ 13) ซึ่งว่ามี methyl คาร์บอนจำนวน 6 คาร์บอน methylene คาร์บอนจำนวน 10 คาร์บอน methine คาร์บอนจำนวน 16 คาร์บอน และ quaternary คาร์บอนจำนวน 3 คาร์บอน

ข้อมูล HMBC (รูปที่ 15) (ตารางที่ 12) แสดงว่าโปรตอนในตำแหน่ง anomeric (H-1',  $\delta$  4.93) มีความสัมพันธ์กับ C-3 ( $\delta$  75.05) ซึ่งยืนยันว่าส่วนของ aglycone เชื่อมต่อกับส่วนของน้ำตาลที่ C-3 ( $\delta$  75.05) ในกรณีที่ไม่สามารถระบุสเตอริโอเคมีของโปรตอนในตำแหน่งที่ 3 ได้เนื่องจากว่าสัญญาณของโปรตอนดังกล่าวเกิดการซ้อนทับกันกับสัญญาณของโปรตอนของน้ำตาลในตำแหน่งที่ 2' เมื่อทำ NOE แล้วก็ไม่สามารถระบุได้ ซึ่งในขณะนี้กำลังรอผลของ NOEDIFF ที่ทำใหม่อีกครั้งหนึ่งว่าสามารถจะระบุได้หรือไม่ ดังนั้นจากข้อมูลที่มีอยู่ทั้งหมดที่กล่าวถึงข้างต้นคาดว่าสารประกอบ CS-S4 น่าจะเป็นสารประกอบ 3-O- $\beta$ -D-glucopyranosylstigmasta-7,22-diene



รูปที่ 16 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างโปรตอนกับคาร์บอนบางส่วนจากข้อมูล 2D HMBC

ตารางที่ 12 แสดงข้อมูล  $^1\text{H}$  NMR  $^{13}\text{C}$  NMR และ 2D HMBC ของสารประกอบ CS-S4

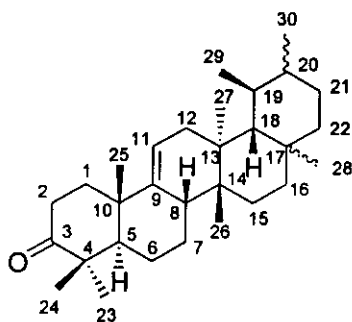
ตำแหน่ง	$\delta_{\text{H}}$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_{\text{C}}$	HMBC
1	1.70 (m, 1H); 0.94 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	35.13	
2	1.94 (m, 1H); 1.32 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	32.40	C-3, C-5
3	3.90 (m, 1H)	CH	75.05	
4	2.00 (m, 1H); 1.55 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	27.69	C-6
5	1.22 (m, 1H)	CH	37.97	C-19
6	1.69 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	27.77	
7	5.17 (brd, 2.5, 1H)	CH	115.62	
8	-	C	137.29	
9	1.60 (m, 1H)	CH	47.37	
10	-	C	32.33	
11	1.55 (m, 1H); 1.43 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	19.52	
12	1.97 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	37.44	C-11



## ตารางที่ 12 (ต่อ)

ตำแหน่ง	$\delta_H$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_C$	HMBC
13	-	C	41.26	
14	1.82 ( <i>m</i> , 1H)	CH	53.01	
15	1.79 ( <i>m</i> , 1H), 1.56 ( <i>m</i> , 1H)	CH <sub>2</sub>	21.13	
16	1.30 ( <i>m</i> , 2H)	CH <sub>2</sub>	26.68	
17	1.28 ( <i>m</i> , 1H)	CH	53.84	C-16, C-20
18	0.58 ( <i>s</i> , 3H)	CH <sub>3</sub>	10.09	C-12, C-13, C-14
19	0.72 ( <i>s</i> , 3H)	CH <sub>3</sub>	10.91	C-1, C-5, C-9, C-10
20	2.06 ( <i>m</i> , 1H)	CH	38.94	
21	1.08 ( <i>d</i> , 6.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	19.46	C-17, C-20, C-22
22	5.12 ( <i>dd</i> , 15.5, 9.0, 1H)	CH	136.42	C-20, C-23, C-24
23	5.07 ( <i>dd</i> , 15.5, 9.0, 1H)	CH	127.42	C-20, C-22, C-24
24	1.57 ( <i>m</i> , 1H)	CH	49.27	
25	1.56 ( <i>m</i> , 1H)	CH	29.96	
26	0.88 ( <i>d</i> , 7.0, 3H)	CH <sub>3</sub>	17.05	C-28
27	0.91 ( <i>d</i> , 6.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	19.17	C-24, C-25, C-26
28	1.42 ( <i>m</i> , 2H)	CH <sub>2</sub>	23.50	
29	0.88 ( <i>t</i> , 7.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	10.36	C-24, C-25
1'	4.93 ( <i>d</i> , 8.0, 1H)	CH	99.91	C-3
2'	3.87 ( <i>m</i> , 1H)	CH	72.80	C-3'
3'	4.18 ( <i>t</i> , 8.5, 1H)	CH	76.05	C-2', C-4'
4'	4.13 ( <i>t</i> , 8.5, 1H)	CH	69.43	C-5'
5'	3.84 ( <i>m</i> , 1H)	CH	75.90	
6'	4.48 ( <i>brd</i> , 12.0, 1H) 4.31 ( <i>brdd</i> , 12.0 และ 5.5, 1H)	CH <sub>2</sub>	60.62	C-5'

## การวิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบ CS-S3 : bauer-9-en-3-one



รูปที่ 17 โครงสร้างของสารประกอบ CS-S3

สารประกอบ CS-S3 เป็นของแข็งสีขาว มีจุดหลอมเหลว  $199.0-202.0^{\circ}$  ซ แสดงค่า  $[\alpha]_D^{30} +34.00^{\circ}$  ในตัวทำละลายคลอโรฟอร์ม เข้มข้น  $1.10 \times 10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> และมีค่า  $R_f = 0.43$  ในตัวเคลื่อนที่ 3% เอทิลอะซิเทท ในเฮกเซน จำนวน 4 ครั้ง คำนวณที่แน่นอนด้วยเมสสเปกโตรมิเตอร์ที่มีกำลังการแยกสูงของสารประกอบ CS-S3 ได้  $M^+ = 424.3716$  ส่วนค่าที่ได้จากการคำนวณ = 424.3707 ซึ่งใกล้เคียงกับค่าที่วัดได้มากซึ่งตรงกันกับสูตรโมเลกุล  $C_{30}H_{48}O$

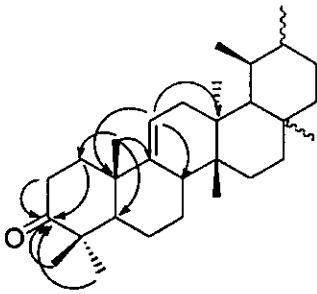
IR สเปกตรัม (รูปที่ 18) แสดงแถบการดูดกลืนแสงที่  $1709$  cm<sup>-1</sup> (C=O stretching) แสดงว่ามีหมู่ฟังก์ชันคาร์บอนิล สามารถยืนยันเพิ่มเติมได้จาก <sup>13</sup>C NMR ซึ่งแสดงสัญญาณของคาร์บอนิลคาร์บอนที่  $\delta 217.30$

<sup>1</sup>H NMR สเปกตรัม (รูปที่ 19) (ตารางที่ 13) แสดงสัญญาณของโปรตอนที่เป็นลักษณะเฉพาะของไตรเทอร์พีน ซึ่งปรากฏค่า chemical shift ของหมู่เมทิลจำนวน 6 หมู่ที่ปรากฏสัญญาณเป็น singlet ที่  $\delta 1.21$ ,  $1.07$  (2xMe),  $0.81$ ,  $0.79$  และ  $0.77$  และหมู่เมทิลอีกจำนวน 2 หมู่ที่ปรากฏสัญญาณเป็น doublet ที่  $\delta 0.89$  ( $J = 6.5$  Hz) และ  $\delta 0.83$  ( $J = 6.0$  Hz) มีสัญญาณของ methylene โปรตอนที่  $\delta 2.72$  ( $ddd$ ,  $J = 15.5$ ,  $13.5$  และ  $6.5$  Hz, 1H) และ  $\delta 2.40$  ( $ddd$ ,  $J = 15.5$ ,  $5.5$  และ  $3.5$  Hz, 1H) ซึ่งเป็นโปรตอนในตำแหน่ง H-2 จากผลของแอนไอโซโทรปิกของหมู่คาร์บอนิลที่ C-3 ทำให้ methylene โปรตอนนี้ปรากฏทางด้านสนามต่ำ สัญญาณของ olefinic โปรตอนที่ปรากฏที่  $\delta 5.29$  ( $d$ ,  $J = 6.5$  Hz, 1H) ซึ่งเป็นโปรตอนที่ตำแหน่ง C-11

<sup>13</sup>C NMR สเปกตรัม (รูปที่ 20) (ตารางที่ 13) แสดงจำนวน 30 สัญญาณของจำนวนคาร์บอน 30 คาร์บอน สามารถวิเคราะห์โดยอาศัยข้อมูลจาก DEPT (รูปที่ 21) ซึ่งว่ามี methyl คาร์บอนจำนวน 8 คาร์บอน methylene คาร์บอนจำนวน 9 คาร์บอน methine คาร์บอนจำนวน 6 คาร์บอน และ quaternary คาร์บอนจำนวน 7 คาร์บอน

ข้อมูล HMBC (รูปที่ 23) (ตารางที่ 13) แสดงว่า olefinic โปรตอนที่ตำแหน่ง H-11 ( $\delta 5.29$ ) มีความสัมพันธ์กับ C-8 ( $\delta 41.04$ ), C-10 ( $\delta 39.30$ ) และ C-13 ( $\delta 36.75$ ) ซึ่งยืนยันตำแหน่งของ olefinic

โปรตอน H-11 โปรตอนที่ตำแหน่ง H-1 $\alpha$  ( $\delta$  2.09), H-2 ( $\delta$  2.72, 1H, H-2 $\beta$ ; 2.40, 1H, H-2 $\alpha$ ), Me-23 ( $\delta$  1.07, 6H) และ Me-24 ( $\delta$  1.07, 6H) มีความสัมพันธ์กับ C-3 ( $\delta$  217.30) ซึ่งยืนยันตำแหน่งของ คาร์บอนิลที่ C-3 methyl โปรตอนที่ตำแหน่ง 25 ( $\delta$  1.21) มีความสัมพันธ์กับ C-1 ( $\delta$  36.64), C-5 ( $\delta$  53.26), C-9 ( $\delta$  147.41) และ C-10 ( $\delta$  39.30) ซึ่งยืนยันตำแหน่งของพันธะคู่ที่ C-9 และตำแหน่งของ Me-25 ว่าเกาะอยู่บน C-10 สเตอริโอเคมีสัมพันธ์ของสารประกอบ CS-S3 ยืนยันจากข้อมูลของ NOEDIFF โดยการฉายแสงที่  $\delta$  2.72 (H-2 $\beta$ ) (รูปที่ 25) ทำให้สัญญาณของโปรตอนที่  $\delta$  1.21 (Me-25) และ  $\delta$  1.07 (Me-24) เข้มขึ้น และฉายแสงที่  $\delta$  0.79 (Me-26) (รูปที่ 26) ทำให้สัญญาณของโปรตอนที่  $\delta$  2.07 (H-8) และ  $\delta$  1.21 (Me-25) เข้มขึ้น บ่งบอกว่าโปรตอนของ Me-25, Me-24, Me-26, H-8 และ H-2 $\beta$  ชี้ไปทางด้านเดียวกันนั่นคือทางด้านเบต้า คืออยู่ในตำแหน่ง axial ฉายแสงที่  $\delta$  0.98 (H-18) (รูปที่ 27) ทำให้สัญญาณของโปรตอนที่  $\delta$  0.83 (Me-29) เข้มขึ้น บ่งบอกว่าโปรตอนของ Me-29 และ H-18 ชี้ไปทางด้านเดียวกันคืออยู่ในตำแหน่ง axial ยังมี Me-28 และ Me-30 ที่ไม่สามารถระบุสเตอริโอเคมีสัมพันธ์ได้ ขณะนี้กำลังรอผลของ NOEDIFF อันใหม่ จากข้อมูลทั้งหมดที่กล่าวถึงข้างต้นสารประกอบ CS-S3 น่าจะเป็นสารประกอบ bauer-9-en-3-one



รูปที่ 24 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างโปรตอนกับคาร์บอนบางส่วนจากข้อมูล 2D HMBC

ตารางที่ 13 แสดงข้อมูล  $^1\text{H}$  NMR  $^{13}\text{C}$  NMR และ 2D HMBC ของสารประกอบ CS-S3

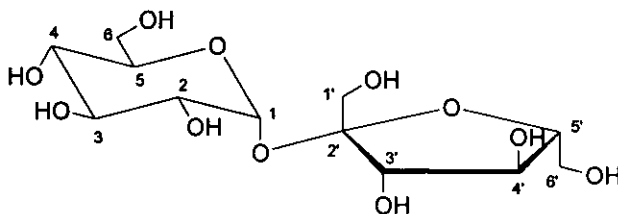
ตำแหน่ง	$\delta_{\text{H}}$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_{\text{C}}$	HMBC
1	H $\alpha$ : 2.09 ( <i>ddd</i> , 13.5, 6.5 และ 3.5, 1H); H $\beta$ : 1.78 ( <i>m</i> , 1H)	CH <sub>2</sub>	36.64	C-3, C-5, C-9, C-10
2	H $\beta$ : 2.72 ( <i>ddd</i> , 15.5, 13.5 และ 6.5, 1H); H $\alpha$ : 2.40 ( <i>ddd</i> , 15.5, 5.5 และ 3.5, 1H)	CH <sub>2</sub>	34.89	C-1, C-3, C-10
3	-	C	217.30	
4	-	C	47.64	
5	1.35 ( <i>m</i> , 1H)	CH	53.26	C-4, C-10, C-25
6	1.46 ( <i>m</i> , 1H); 1.38 ( <i>m</i> , 1H)	CH <sub>2</sub>	35.86	

## ตารางที่ 13 (ต่อ)

ตำแหน่ง	$\delta_H$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_C$	HMBC
7	1.23 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	28.18	
8	2.07 (m, 1H)	CH	41.04	C-5, C-9
9	-	C	147.41	
10	-	C	39.30	
11	5.29 (d, 6.5, 1H)	CH	115.61	C-8, C-10, C-13
12	1.44 (m, 1H); 1.26 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	29.62	C-9, C-11, C-14
13	-	C	36.75	
14	-	C	38.18	
15	1.34 (m, 1H); 1.30 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	20.15	
16	1.60 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	22.57	C-13, C-17, C-18, C-27, C-28
17	-	C	42.80	
18	0.98 (m, 1H)	CH	59.59	
19	1.60 (m, 1H)	CH	51.99	
20	*	CH	30.77	
21	1.86 (m, 1H), 1.24 (m, 1H)	CH <sub>2</sub>	26.27	
22	1.70 (m, 2H)	CH <sub>2</sub>	36.07	
23	1.07 (s, 6H)	CH <sub>3</sub>	22.04	C-3, C-4, C-5, C-24
24	1.07 (s, 6H)	CH <sub>3</sub>	25.53	C-3, C-4, C-5, C-23
25	1.21 (s, 3H)	CH <sub>3</sub>	21.64	C-1, C-5, C-9, C-10
26	0.79 (s, 3H)	CH	15.29	C-8, C-12, C-13, C-14
27	0.81 (s, 3H)	CH <sub>3</sub>	16.95	C-19
28	0.77 (s, 3H)	CH <sub>3</sub>	13.98	C-17, C-18, C-19
29	0.83 (d, 6.0, 3H)	CH <sub>3</sub>	22.99	C-18, C-20, C-30
30	0.89 (d, 6.5, 3H)	CH <sub>3</sub>	22.10	C-18, C-20, C-29

\* ไม่ปรากฏ

## การวิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบ CS-S2 : Sucrose



รูปที่ 28 โครงสร้างของสารประกอบ CS-S2

สารประกอบ CS-S2 เป็นผลึกใสไม่มีสี มีจุดหลอมเหลว 175.2-176.9<sup>o</sup> ซ แสดงค่า  $[\alpha]_D^{28} +78.37^o$

ในตัวทำละลายฟิรีดีน เข้มข้น  $2.50 \times 10^{-2} \text{ g/cm}^3$

IR สเปกตรัม (รูปที่ 29) แสดงแถบการดูดกลืนแสงที่  $3373 \text{ cm}^{-1}$  (O-H stretching) แสดงว่ามีหมู่ฟังก์ชันไฮดรอกซิล

<sup>1</sup>H NMR สเปกตรัม (รูปที่ 30) (ตารางที่ 14) แสดงค่า chemical shift ที่อยู่ในช่วง  $\delta$  3.98-5.94 ppm ซึ่งเป็นสัญญาณที่เป็นลักษณะเฉพาะของน้ำตาล สามารถยืนยันเพิ่มเติมได้จาก <sup>13</sup>C NMR สเปกตรัม (รูปที่ 31) (ตารางที่ 14) แสดงจำนวนคาร์บอนทั้งหมด 12 คาร์บอน ข้อมูล DEPT (รูปที่ 32) ซึ่งว่ามี methylene คาร์บอนจำนวน 3 คาร์บอน ( $\delta$  62.90, 60.25 และ 60.12) methine คาร์บอนจำนวน 8 คาร์บอน ( $\delta$  91.31, 82.03, 78.25, 73.09, 72.67, 72.63, 70.98 และ 69.40) และ quaternary คาร์บอนจำนวน 1 คาร์บอน ( $\delta$  103.35) ซึ่งว่าสารประกอบ CS-S2 เป็นน้ำตาลชนิด disaccharide สัญญาณของโปรตอนที่ปรากฏเป็น doublet ที่  $\delta$  5.94 ( $J = 4.0 \text{ Hz}$ ) เป็นสัญญาณของ anomeric โปรตอนของน้ำตาลกลูโคสในตำแหน่งแอลฟา โดยพิจารณาจากค่าคงที่ของการคู่ควบ [ $J^{\text{ae}} = 4.0 \text{ Hz}$  ( $J^{\text{axial-equatorial}}$ )] ตามค่า chemical shift และการแตกยอดของ oxymethylene โปรตอนที่  $\delta$  4.28 ( $dd, J = 12.0$  และ  $2.5 \text{ Hz}, 1\text{H}$ ) และ  $\delta$  4.14 ( $dd, J = 12.0$  และ  $4.5 \text{ Hz}, 1\text{H}$ ) เป็นลักษณะเฉพาะของโปรตอนในตำแหน่ง H-6 ของกลูโคส นอกจากนี้ยังมี oxymethylene โปรตอนจำนวน 2 โปรตอนที่  $\delta$  4.07 ( $s, 2\text{H}$ ) และ  $\delta$  4.05 ( $d, J = 12.0 \text{ Hz}, 1\text{H}$ ),  $\delta$  4.13 ( $d, J = 12.0 \text{ Hz}, 1\text{H}$ ) เป็นโปรตอนที่ตำแหน่ง H-5' และ H-6' ของส่วนที่เป็นน้ำตาลฟรุคโทส ตามลำดับ ดังนั้นน้ำตาล 2 หน่วยจะเป็นกลูโคสและฟรุคโทส สัญญาณของโปรตอนของกลูโคสและฟรุคโทสจะยืนยันจาก <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY สเปกตรัม (รูปที่ 35) (ตารางที่ 14) HMQC (รูปที่ 33) และข้อมูล 2D HMBC (รูปที่ 34) (ตารางที่ 14) ดังนั้นจากข้อมูลทั้งหมดที่กล่าวถึงข้างต้นยืนยันว่าสารประกอบ CS-S2 จะเป็นน้ำตาลซูโครส

ตารางที่ 14 แสดงข้อมูล  $^1\text{H}$  NMR  $^{13}\text{C}$  NMR  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY และ 2D HMBC ของสารประกอบ CS-S2

ตำแหน่ง	$\delta_{\text{H}}$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	ชนิดของ C	$\delta_{\text{C}}$	$^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ COSY	HMBC
1	5.94 ( <i>d</i> , 4.0, 1H)	CH	91.31	H-2	C-3, C-2'
2	3.98 ( <i>dd</i> , 9.5 และ 4.0, 1H)	CH	70.98	H-1, H-3	
3	4.39 ( <i>t</i> , 9.5, 1H)	CH	72.63	H-2, H-4	C-2, C-4
4	3.97 ( <i>t</i> , 9.5, 1H)	CH	69.40	H-3, H-5	C-3
5	4.46 ( <i>ddd</i> , 9.5, 4.5 และ 2.5, 1H)	CH	72.67	H-4, H <sub>b</sub> -6	
6	H <sub>a</sub> : 4.28 ( <i>dd</i> , 12.0 และ 2.5, 1H); H <sub>b</sub> : 4.14 ( <i>dd</i> , 12.0 และ 4.5, 1H)	CH <sub>2</sub>	60.12 <sup>a</sup>	H <sub>b</sub> -6 H-5, H <sub>a</sub> -6	
1'	4.07 ( <i>s</i> , 2H)	CH <sub>2</sub>	60.25 <sup>a</sup>		C-5'
2'	-	C	103.35		
3'	4.67 ( <i>d</i> , 8.0, 1H)	CH	78.25	H-4'	
4'	4.78 ( <i>t</i> , 8.0, 1H)	CH	73.09	H-3', H-5'	C-4', C-6'
5'	4.24 ( <i>td</i> , 8.0 และ 4.0, 1H)	CH	82.03	H-4', H <sub>a</sub> -6'	C-3', C-1'
6'	H <sub>a</sub> : 4.05 ( <i>d</i> , 12.0, 1H); H <sub>b</sub> : 4.13 ( <i>d</i> , 12.0, 1H)	CH <sub>2</sub>	62.90	H-5'	C-2', C-3'

<sup>a</sup>ข้อมูลอาจสลับที่กันได้

นอกจากนี้สารประกอบ CS-S2 ยืนยันว่าเป็นน้ำตาลซูโครส โดยการนำไปทำปฏิกิริยา acetylation พบว่ามีหมู่อะเซทิลทั้งหมดจำนวน 8 หมู่ [ $\delta$  2.18, 2.12 (2xMe), 2.11, 2.10 (2xMe), 2.05 และ 2.02] ยืนยันว่าสารประกอบ CS-S2 มีหมู่ไฮดรอกซิลทั้งหมดจำนวน 8 หมู่ และ  $^{13}\text{C}$  NMR สเปกตรัมของ octaacetate ของ CS-S2 ปรากฏสัญญาณของคาร์บอนิลคาร์บอนจำนวน 8 หมู่ [ $\delta$  170.68, 170.47, 170.08 (3xC), 169.90, 169.65 และ 169.50] methine คาร์บอนจำนวน 8 คาร์บอน [ $\delta$  89.89, 97.07, 75.65, 74.94, 70.23, 69.59, 68.46 และ 68.18] methylene คาร์บอนจำนวน 3 คาร์บอน ( $\delta$  63.61, 62.84 และ 61.71) และ quaternary คาร์บอนจำนวน 1 คาร์บอน ( $\delta$  103.96) และทำการเปรียบเทียบ  $^1\text{H}$  NMR และ  $^{13}\text{C}$  NMR สเปกตรัมของ octaacetate ของ CS-S2 กับข้อมูลของ octaacetate ของซูโครส (Nishida, T. *et al.*, 1986) ดังแสดงใน ตารางที่ 15 จากข้อมูลที่กล่าวมาข้างต้นสรุปว่าสารประกอบ CS-S2 คือ ซูโครส

ตารางที่ 15 แสดงข้อมูล  $^1\text{H}$  และ  $^{13}\text{C}$  NMR (300 MHz และ 75 MHz ใน  $\text{CDCl}_3$ ) สเปกตรัมของสารประกอบ octaacetate ของ CS-S2 เปรียบเทียบกับสารประกอบ octaacetate ของซูโครส

ตำแหน่ง	octaacetate ของ CS-S2		octaacetate ของซูโครส	
	$\delta_{\text{H}}$ , (ลักษณะการแยก, ค่าคงที่ของการคู่ควบ, J, Hz)	$\delta_{\text{C}}$ (ชนิดของ C)	$\delta_{\text{H}}$	$\delta_{\text{C}}$ (ชนิดของ C)
1	5.65 ( <i>d</i> , 3.6, 1H)	89.89 (CH)	5.69	89.93 (CH)
2	4.83 ( <i>dd</i> , 10.2 และ 3.6, 1H)	70.23 (CH)	4.87	70.26 (CH)
3	5.40 ( <i>t</i> , 10.2, 1H)	69.59 (CH)	5.44	69.61 (CH)
4	5.04 ( <i>t</i> , 10.2, 1H)	68.18 (CH)	5.08	68.17 (CH)
5	4.26 ( <i>m</i> , 1H)	68.46 (CH)	4.28	68.50 (CH)
6	4.14 ( <i>m</i> , 1H), 4.28 ( <i>m</i> , 1H)	61.71 ( $\text{CH}_2$ )	4.14, 4.28	61.75 ( $\text{CH}_2$ )
1'	4.15 ( <i>s</i> , 2H)	62.84 ( $\text{CH}_2$ )	4.17	62.85 ( $\text{CH}_2$ )
2'	-	103.96 (C)	-	104.02 (C)
3'	5.42 ( <i>d</i> , 5.7, 1H)	75.65 (CH)	5.47	75.68 (CH)
4'	5.33 ( <i>t</i> , 5.7, 1H)	74.94 (CH)	5.36	74.98 (CH)
5'	4.18 ( <i>m</i> , 1H)	79.07 (CH)	4.21	79.14 (CH)
6'	4.31 ( <i>dd</i> , 12.0 และ 4.8, 2H)	63.61 ( $\text{CH}_2$ )	4.35, 4.29	63.63 ( $\text{CH}_2$ )
2-CO- $\text{CH}_3$	2.10* ( <i>s</i> , 6H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.10	20.64 ( $\text{CH}_3$ )
3-CO- $\text{CH}_3$	2.02 ( <i>s</i> , 3H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.02	20.66 ( $\text{CH}_3$ )
4-CO- $\text{CH}_3$	2.05 ( <i>s</i> , 3H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.05	20.61 ( $\text{CH}_3$ )
6-CO- $\text{CH}_3$	2.10 ( <i>s</i> , 6H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.10	20.58 ( $\text{CH}_3$ )
1'-CO- $\text{CH}_3$	2.12* ( <i>s</i> , 6H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.12	20.69 ( $\text{CH}_3$ )
3'-CO- $\text{CH}_3$	2.18 ( <i>s</i> , 3H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.18	20.56 ( $\text{CH}_3$ )
4'-CO- $\text{CH}_3$	2.11 ( <i>s</i> , 3H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.11	20.72 ( $\text{CH}_3$ )
6'-CO- $\text{CH}_3$	2.12* ( <i>s</i> , 6H)	20.60 ( $\text{CH}_3$ )	2.12	20.63 ( $\text{CH}_3$ )
2-CO- $\text{CH}_3$	-	170.08 (C=O)	-	170.07 (C=O)
3-CO- $\text{CH}_3$	-	170.08 (C=O)	-	170.01 (C=O)
4-CO- $\text{CH}_3$	-	169.50 (C=O)	-	169.50 (C=O)
6-CO- $\text{CH}_3$	-	170.68 (C=O)	-	170.66 (C=O)
1'-CO- $\text{CH}_3$	-	170.08 (C=O)	-	170.09 (C=O)
3'-CO- $\text{CH}_3$	-	169.65 (C=O)	-	169.65 (C=O)
4'-CO- $\text{CH}_3$	-	169.90 (C=O)	-	169.88 (C=O)
6'-CO- $\text{CH}_3$	-	170.47 (C=O)	-	170.46 (C=O)

\*อาจสลับที่กันได้