

2000年度応用化学実験第3「有機反応(1)」(伊藤)試験問題

問1 (1) 分子式 C_5H_8O で表される化合物Aの 1H NMRを、 $(CH_3)_4Si$ を含む $CDCl_3$ を用いて測定したところ図1のようなスペクトルを得た。またそのIRを測定すると図2のようなスペクトルを得た。Aの構造を推定しその理由を2つのスペクトルのピークの帰属をもとに説明せよ。

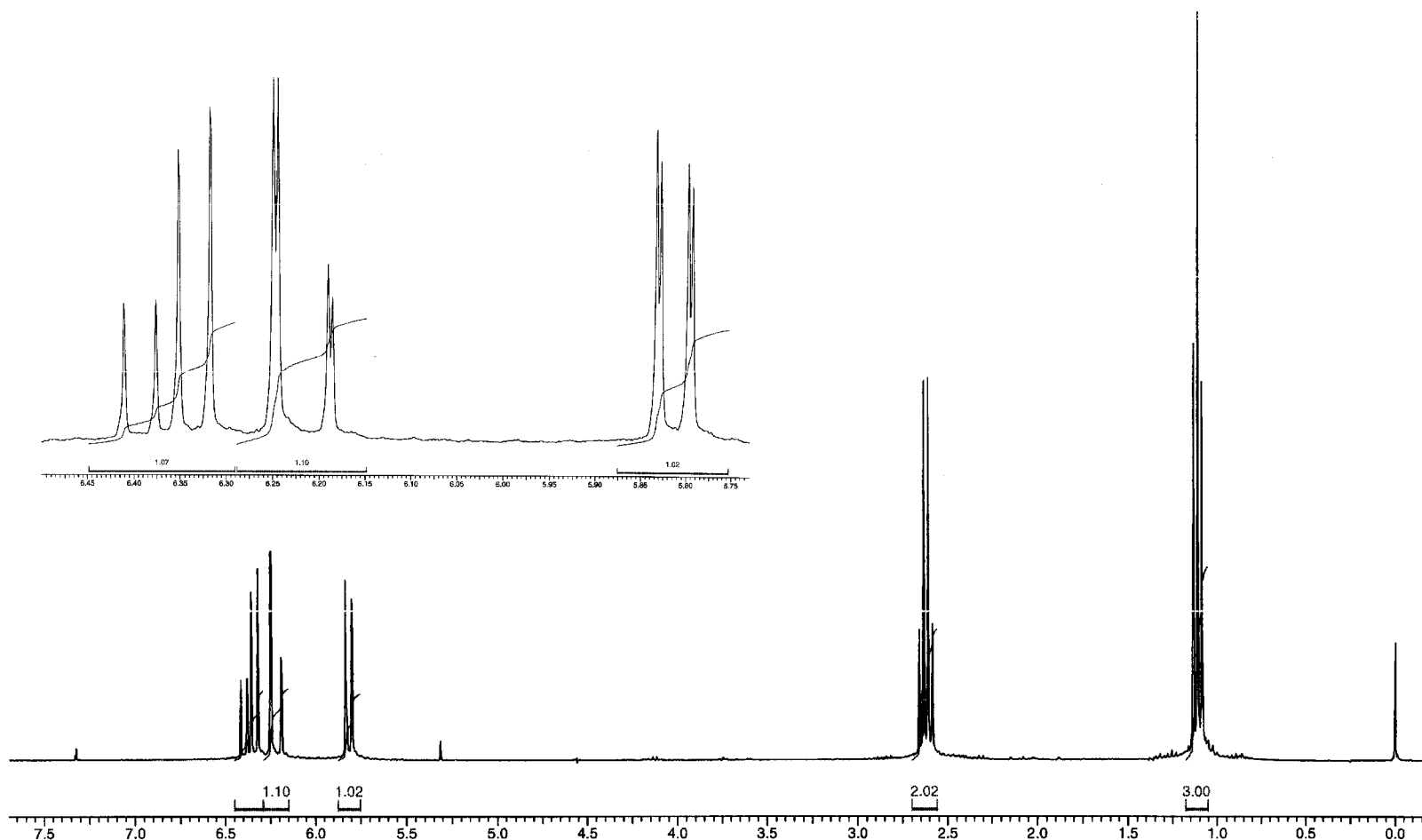


図1

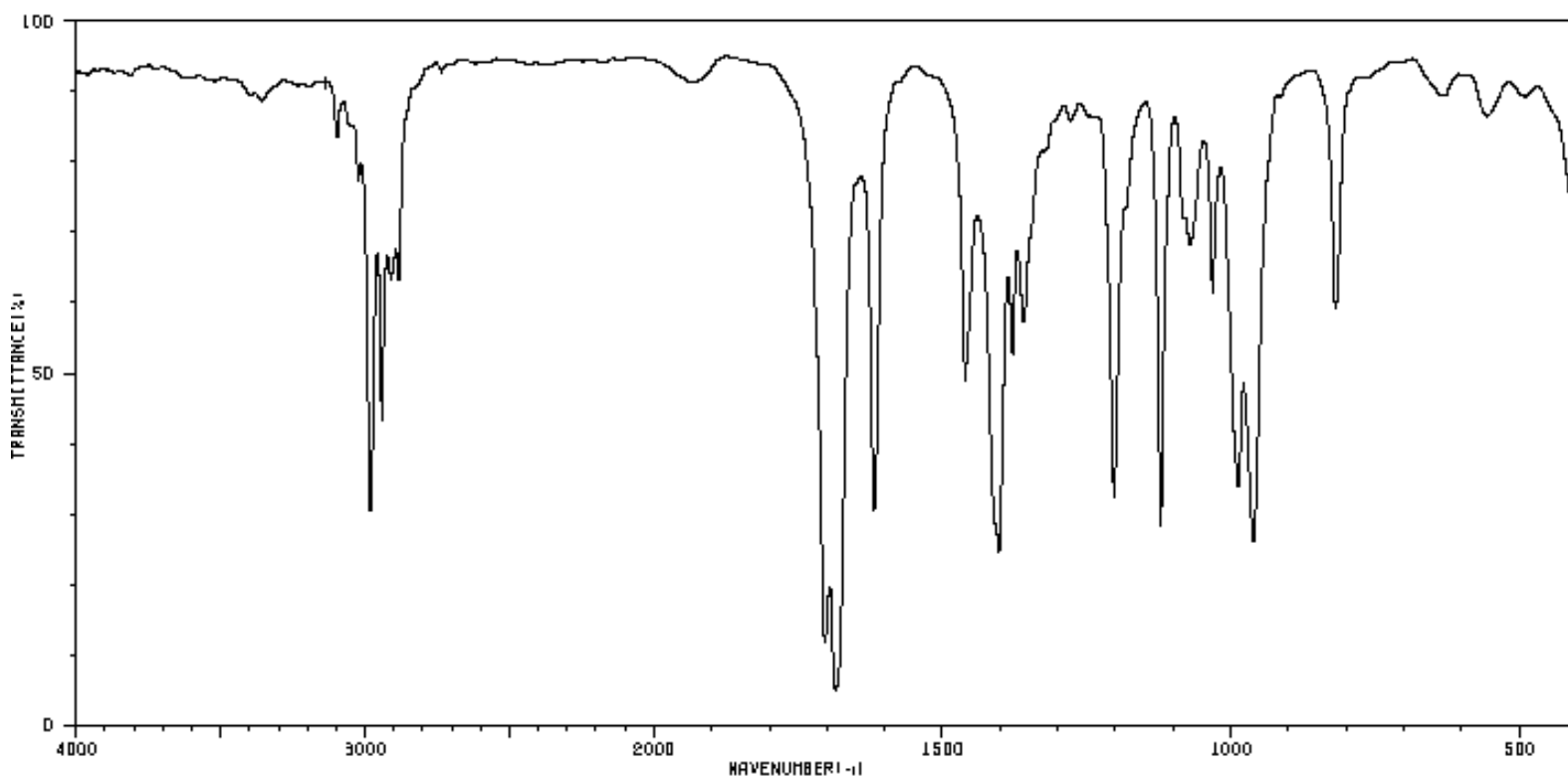
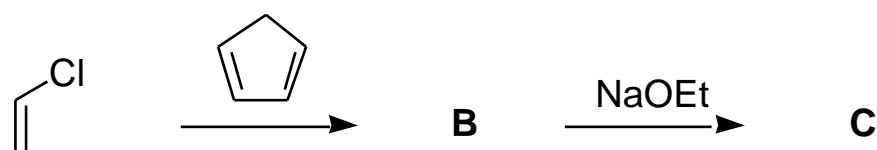


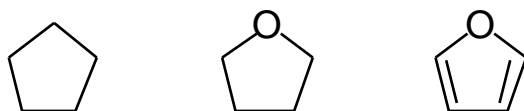
図2

(2) 化合物Aとtrans,trans-2,4-hexadieneとの反応で得られる生成物の構造を予測しその理由を軌道の相互作用をもとに説明しなさい。

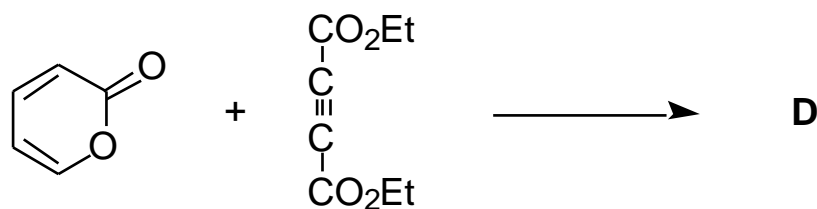
問2 クロロエチレンに対しシクロペンタジエンを反応させると化合物Bが得られ、さらにこれに対しナトリウムエトキシドを作用させると化合物Cが得られた。化合物B、Cの構造を考え、その生成機構について説明せよ。



問3 次の3種類の化合物は¹H NMR測定でどのように区別されるか論じなさい。



問4 -ピロンとアセチレンジカルボン酸ジエチルの反応で得られる化合物Dは次のような¹H NMRスペクトルを与えた。Dの構造を示すと共にその生成機構について論じなさい。



化合物Dの¹H NMRスペクトル(CDCl₃)

- 1.37 (triplet, 6H, J=7Hz)
- 4.36 (quartet, 4H, J=7Hz)
- 7.53 (multiplet, 2H)
- 7.71 (multiplet, 2H)