

## 2006 年度実践応用化学（伊藤）試験問題

ベンズアルデヒド **1a** に対して当モル量の KO*t*-Bu 及び化合物 **2** を反応させたところ化合物 **3** が得られた。また同様の反応をアセトフェノン **1b** に対して行うと化合物 **4** が得られた (Scheme1)。化合物 **3** と **4** の  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR スペクトルをそれぞれ図 1、2 に示す。またオフレゾナンスデカップリングスペクトルでは図 1 の 6 本のシグナルは高磁場側から 2 重線、1 重線、1 重線、2 重線、2 重線、2 重線として、また図 2 の 7 本のシグナルは 4 重線、1 重線、1 重線、1 重線、2 重線、2 重線、2 重線として観測された。さらに化合物 **3** の元素分析の結果は C, 94.08% ; H, 5.92%、化合物 **4** の場合は C, 93.06% ; H, 6.94%であった。次の問いに答えなさい。

Scheme 1

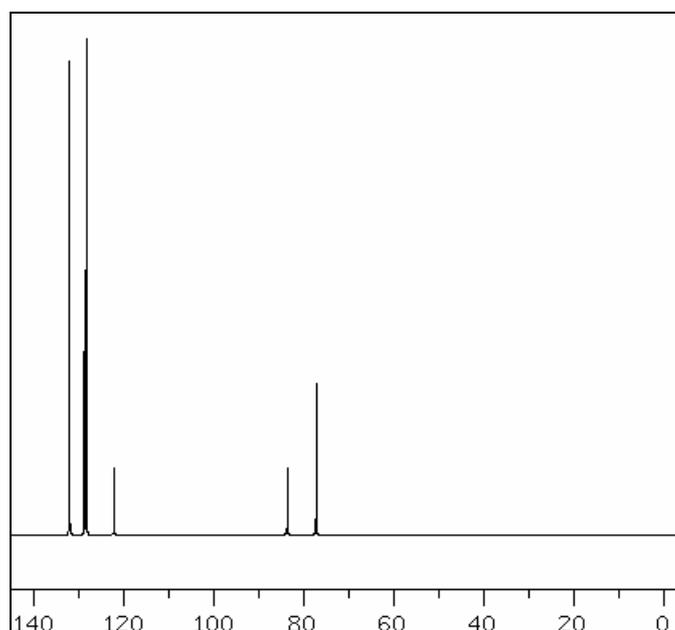


図 1

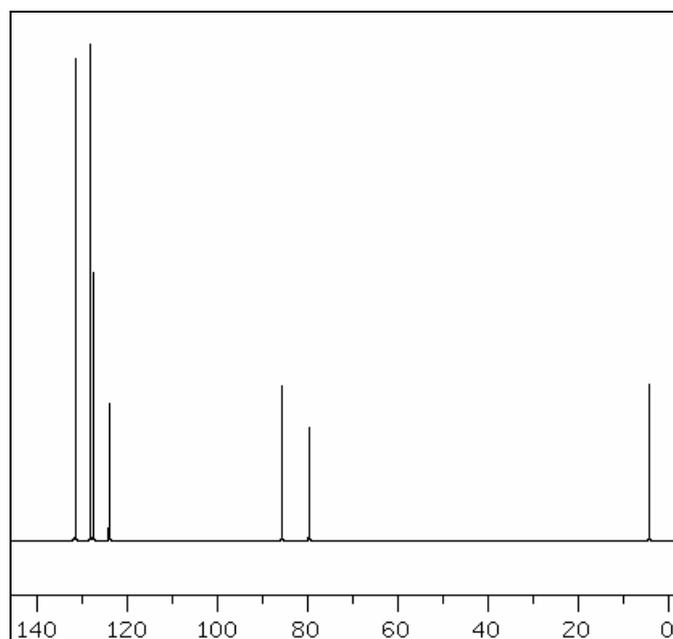


図 2

- (1) 化合物 **3** の構造を推定してその理由をのべなさい。
- (2) 化合物 **4** の構造を推定してその理由をのべなさい。
- (3) **1a** のカルボニル基の炭素を  $^{13}\text{C}$  でラベルした化合物 **1a\*** より導かれた生成物 **3\*** の  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR スペクトルと、図 1 を比較すると高磁場側から二番目のシグナルの強度が増強した。この結果から **1a** と **2** から **3** が生成する機構について考えられる二つの経路を一つに限定できる。このことについて論じなさい。

以上