

「ジベンジリデンアセトンの合成」に関する考察

1. ベンジリデン (benzylidene) とはどのような基を指すか。
2. 今回の反応 (混合アルドール縮合) の反応機構を考察せよ。
3. ベンジリデンアセトン $C_6H_5CH=CHCOCH_3$ を合成する場合には合成方法をどのように変更したらよいか。
4. 融点の値から, 生成物の純度について考察せよ。この反応の副生成物としては何が予想されるか。
5. IR スペクトルの中でジベンジリデンアセトンの特徴付けるピークを帰属せよ。
6. ジベンジリデンアセトンには単離可能な3種の異性体が存在する。それらの構造式を示せ。
7. 6で示した3種の異性体のうち最も長波長側に紫外・可視吸収があるものはどれか。また, 今回の実験の生成物はこれらのうちどれか。
8. 生成物の 1H NMR スペクトル中の各シグナルを帰属せよ。7で示した異性体であることを裏付けるにはどこに着目したらよいか。
9. 生成物の ^{13}C NMR スペクトル中の各シグナルを帰属せよ。
10. 1,3-ブタジエン $CH_2=CH-CH=CH_2$ には単結合回りの s-cis, s-trans 異性体 (s は single bond の s) が存在する (下図, 異性化が速いため各々の単離は不可)。ジベンジリデンアセトンはカルボニル基も含めて二重結合を3つ有しているので, s-cis, s-trans 異性体を考慮すると多くの異性体が存在することになる。それらすべての中でどの構造が最も安定と考えられるか, 構造式で示せ。

