置換ケイ皮酸の臭素化を光で探る

菊地 祐大

抄録

いくつかの植物由来天然有機分子は共通してケイ皮酸の分子構造を含む。これら生体分子の多様性を理解するため、分光光度計を駆使して置換ケイ皮酸の臭素化反応の速度定数や吸収スペクトル変化を計測した。計測結果を置換基効果などから考察し、置換ケイ皮酸の臭素化には2種類の反応機構があるとわかった。

1. 研究の背景と目的

天然有機分子にはケイ皮酸と同じ「ベンゼン環・二重結合・カルボニル基」の組み合わせをもつものが多い。置換ケイ皮酸の反応性から、これら共通の分子構造を含む多様な天然有機分子がなぜ生じたのかを、考察しようと研究を始めた。

2. 方法

置換ケイ皮酸溶液と臭素化剤(PBP)溶液を混合し、臭素の吸光度や吸収スペクトルの時間変化を分光光度計で測定し、反応速度定数を計算した。溶液混合直後から吸光度変化を安定して測定するために実験上の工夫も行った。

3. 結果

反応速度定数と置換基定数との直線関係が2通り存在することから、置換ケイ皮酸の臭素化には2種類の反応機構があるとわかった。臭素化反応の吸収スペクトル変化は、4-ヒドロキシケイ皮酸とスチレンとで似かよった変化を示した。

4. 考察

4-ヒドロキシ基、4-メトキシ基などの置換基を含むケイ皮酸は、置換基の共鳴 効果が大きく、二重結合での求電子付加反応が優先し、臭素化反応全体も非常に 加速される。一方、酸素原子をもたない置換基を含むケイ皮酸は共鳴効果が小さ く、求電子付加反応と求電子置換反応が同時に非常にゆっくり進行する。

5. 結論

ケイ皮酸自体の反応性は非常に低いが、4-ヒドロキシ基など酸素を含む置換基をもつケイ皮酸は、側鎖での反応性が著しく高くなる。ケイ皮酸分子にこれら置換基が導入されると反応性が増し、新種の有機分子が生成されやすくなる。このことが、ケイ皮酸構造を共通して含む多様な天然有機分子の起源と考えられる。

6. 参考文献

1) 丸山和博ら,有機化学序説,化学同人(1980). 2) 稲本直樹,ハメット則,丸善(1983).

7. キーワード

ケイ皮酸 反応速度定数 求電子置換反応 求電子付加反応

2472 Miyazakikita High School

Search Bromination of Substituted Cinnamic Acid with Light

Yudai Kikuchi

Abstract

Several plant-derived natural organic molecules contain the molecular structure of cinnamic acid in common. To understand the diversity of these biomolecules, I measured the bromination rates of the substituted cinnamic acids. Considering the measurement results, it turned out that there are two reaction mechanisms.

1. Introduction

Many natural organic molecules have the same combination of "benzene ring, double bond, carbonyl group" as cinnamic acid. The purpose of this study is to explore why these various natural organic molecules are formed.

2. Theory and Experiment

Solutions of both substituted cinnamic acids and brominating reagent (PBP) were mixed and the changes in the absorption spectrum of bromine were measured with a spectrophotometer to constantly calculate the reaction rate.

3. Results

Since there are two linear relationships between reaction rate constants and substituent constants, it was considered that bromination of substituted cinnamic acid has two kinds of reaction mechanisms.

4. Discussion

Substituted cinnamic acids containing oxygen atoms in substituent group have a larger resonance effect than that with no oxygen atoms, and greatly promotes bromination.

5. Conclusion

The cinnamic acids having a substituent containing oxygen have remarkably high reactivity at the side chain. When these substituents are introduced into the cinnamic acid molecule, the reactivity is increased and generated a new kinds of organic molecules easily. This is considered to be the origin of various natural organic molecules including the structure of cinnamic acid.

6. References

Maruyama Kazuhiro et al., introduction to Organic Chemistry, kagaku Doujin (1980). Naoki Inamoto, Hammett's Rule, Maruzen (1983).

7. Key words

Cinnamic acid Reaction rate constant Bromination