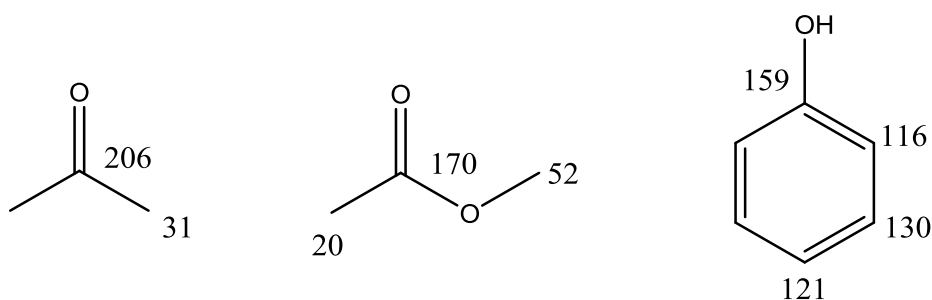
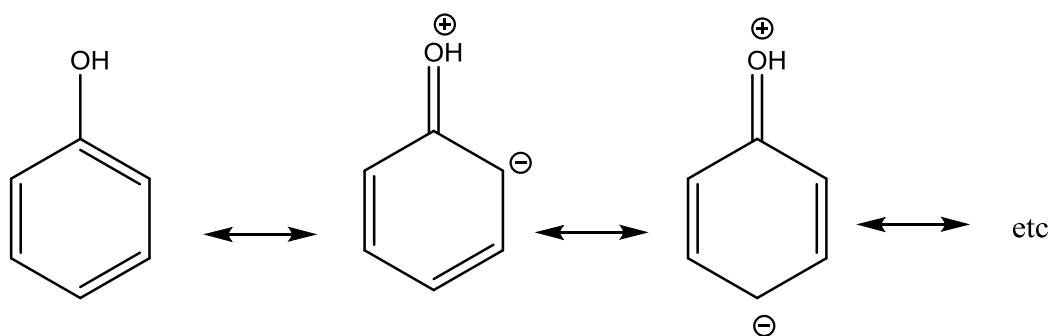


有機1 質問への回答

質問の内容：エステルとケトンの ^{13}C NMR の化学シフトの差を R 効果によるものとしていたが、だとすると、下記のフェノールの酸素の隣の化学シフトも同じ理屈で他のベンゼン環の炭素よりも高磁場に出るはずではないのか？（質問はフェノールそれ自体ではなく置換フェノールについてのものでしたが、同じ議論なので簡単のためフェノールにしてあります。）



回答：フェノールの共鳴構造を見てみましょう。



これをみるとまず、OH の *o* 位や *p* 位の炭素の化学シフトが通常のベンゼンの 128.5 ppm よりも高磁場に出ていることが納得できます。では OH の付け根の炭素はどうでしょうか。フェノール自身と、他の寄与構造に分けて考えます。

1) フェノールそれ自体・・・酸素原子の電子求引性の I 効果によりベンゼン環の炭素としては低磁場（化学シフトの大きな側）に出ると考えられる。

2) 他の電荷分離した寄与構造・・・この炭素は確かに π 電子の通り道ではあるが、この炭素は（プロトン化された）カルボニル炭素である。だから、カルボニル基にしてはとても高磁場にある、とみることができる。

これらの2つの観点から、フェノールの OH の付け根の炭素の化学シフトが説明できます。

以上