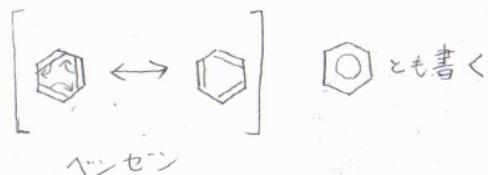
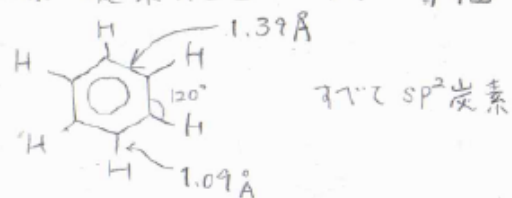


芳香族の名称、物性、分光法

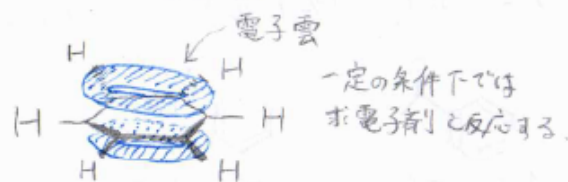
★ ベンゼンの物性



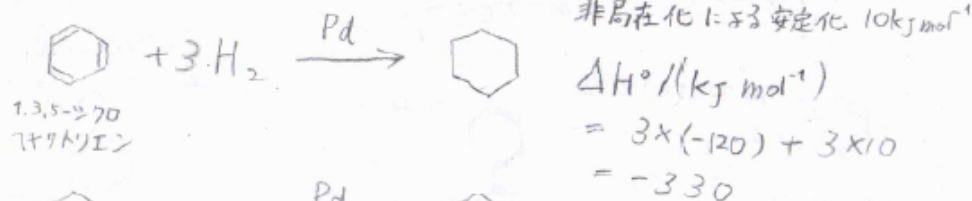
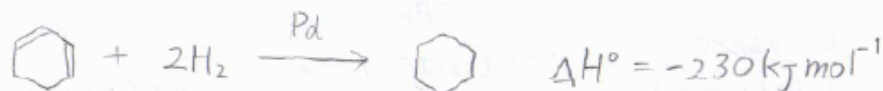
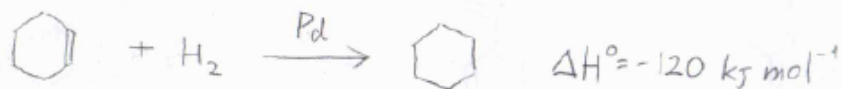
- 炭素-炭素結合はすべて等価



- 環の上下に π 電子雲を形成する



- 熱力学的にとっても安定



環状ポリエン

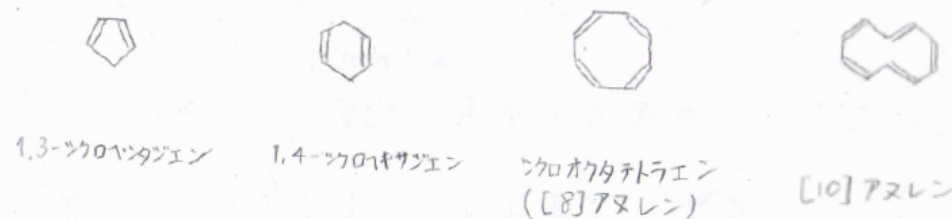
芳香族 (電子の非局在化で安定化する)



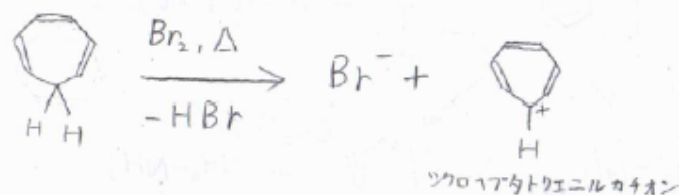
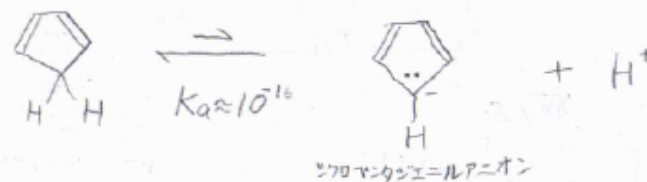
反芳香族 (電子の非局在化で不安定化する)



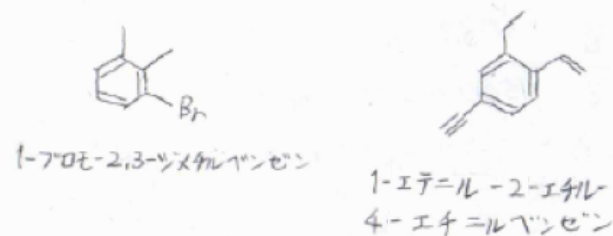
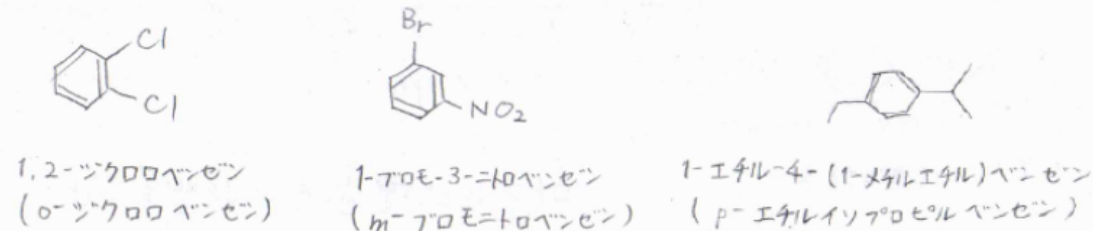
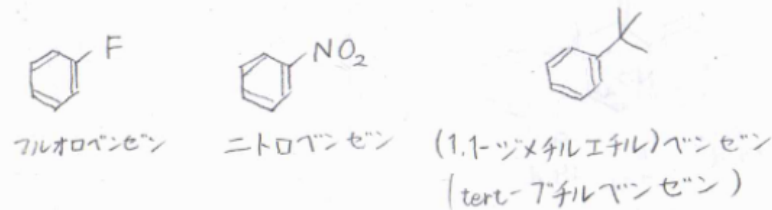
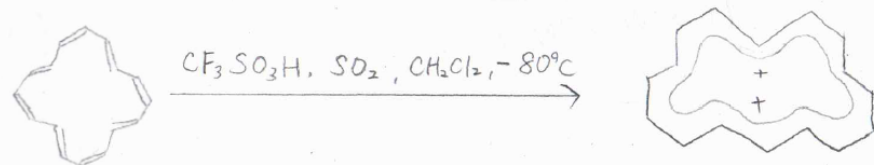
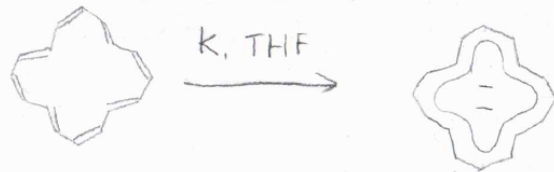
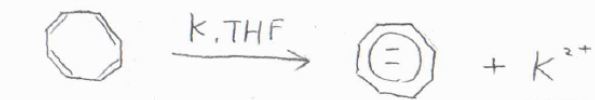
非芳香族 (非平面的 or 電子が非局在化できない)



芳香族のイオン



☆ ベンゼン誘導体の命名法、慣用名



芳香族ヘテロ環化合物

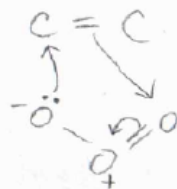


芳香族的遷移状態

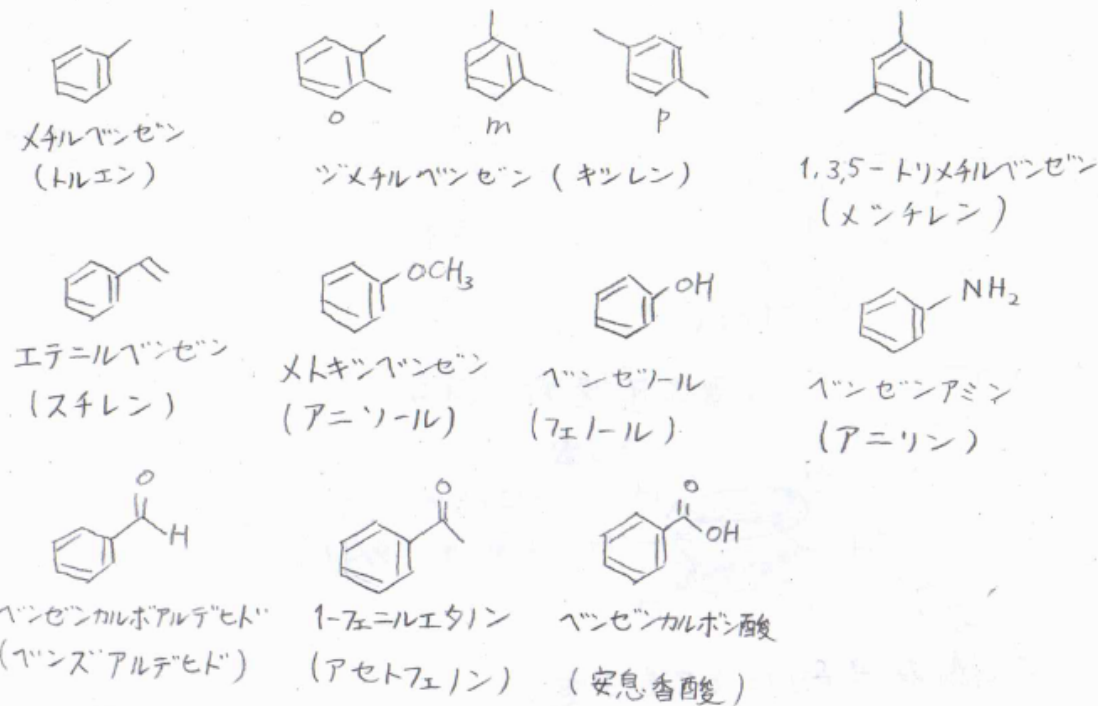
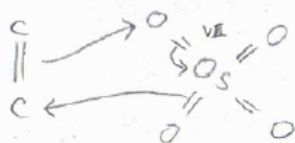
・ Diels-Alder 反応



・ オゾン分解



・ 四酸化オスmiumの付加

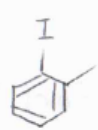
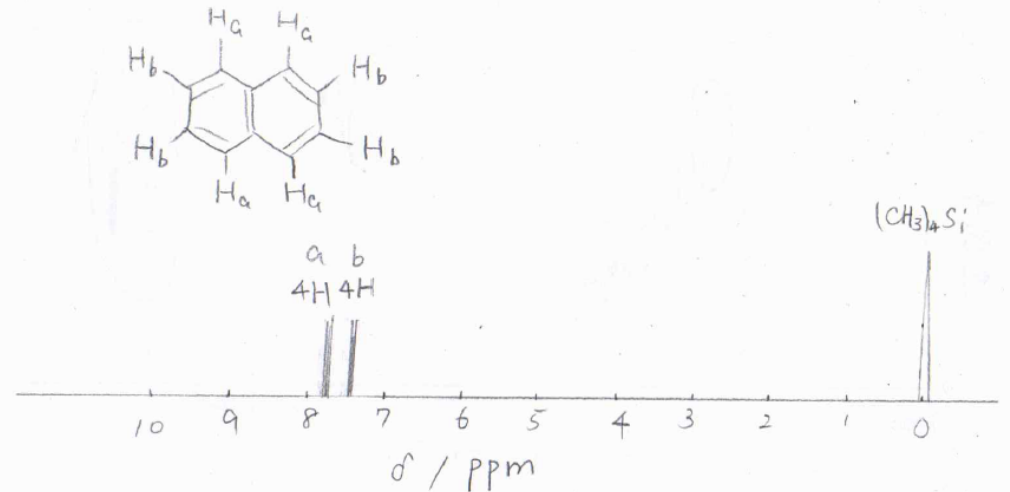
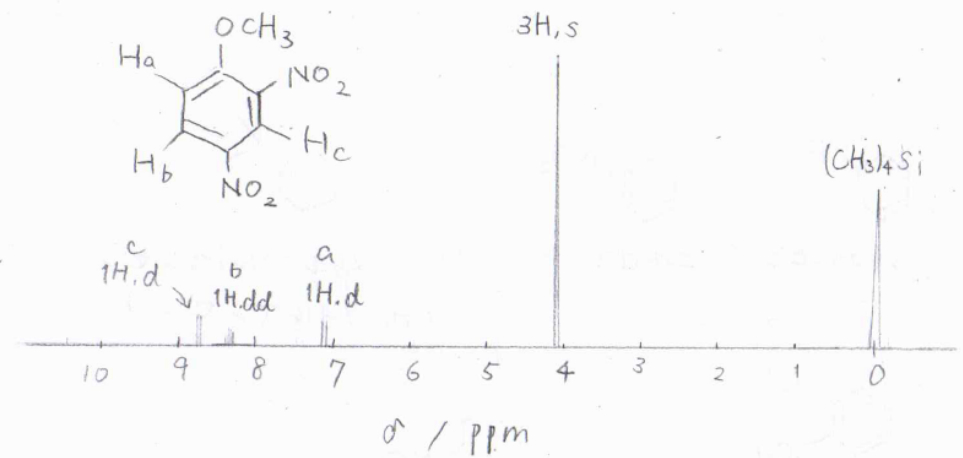


置換誘導体中の非等価な水素は、遠隔カップリングする。

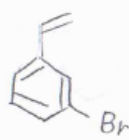
$$J_{ortho} = 6 \sim 9.5 \text{ Hz}$$

$$J_{meta} = 1.2 \sim 3.1 \text{ Hz}$$

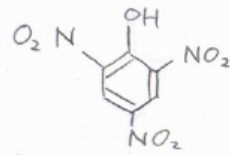
$$J_{para} = 0.2 \sim 1.5 \text{ Hz}$$



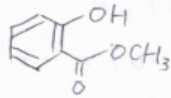
1-ヨード-2メチルベンゼン
(o-ヨードトルエン)



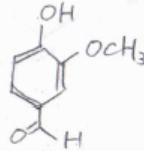
1-ブロモ-3-エチルベンゼン
(m-ブロモスチレン)



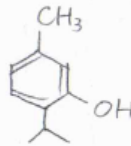
2,4,6-トリニトロフェノール
(ピクリン酸)



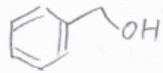
2-ヒドロキシ安息香酸メチル
(サリチル酸メチル)



4-ヒドロキシ-3-メチル
ベンズアルデヒド
(バニリン)



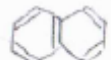
5-メチル-2-(1-メチルエチル)フェノール
(4モール)



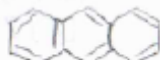
フェニルメタール
(ベンジルアルコール)

芳香環をもつ置換基をアリール(aryl)基と呼ぶ。
置換基としてのベンゼン- C_6H_5 はフェニル基という。
フェニルメチル基- $CH_2C_6H_5$ は、ベンジル基ともいう。

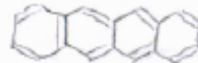
多環芳香族炭化水素(多環ベンゼン系)



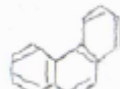
ナフタレン



アントラセン



テトラセン(ナフタセン)

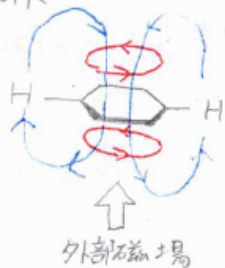


フェナントレン

アセン

★ ベンゼン環の分光学的特徴

・ 1H -NMR



水素原子は反遠蔽化される。

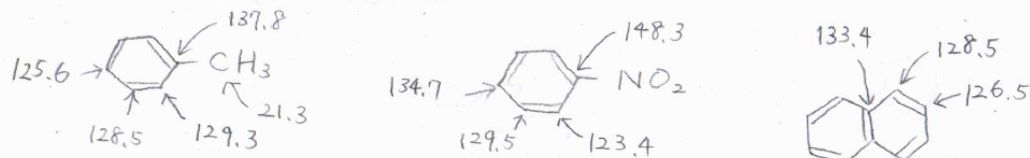
$$Ph-H \quad \delta = 7.72 \text{ ppm}$$

(ベンゼン誘導体の水素 $\delta = 6.5 \sim 8.5 \text{ ppm}$)

$$Ph-CH_2-H \quad \delta = 2.35 \text{ ppm}$$

¹³C-NMR

炭素核は、プロトンほど環電流の影響を受けない



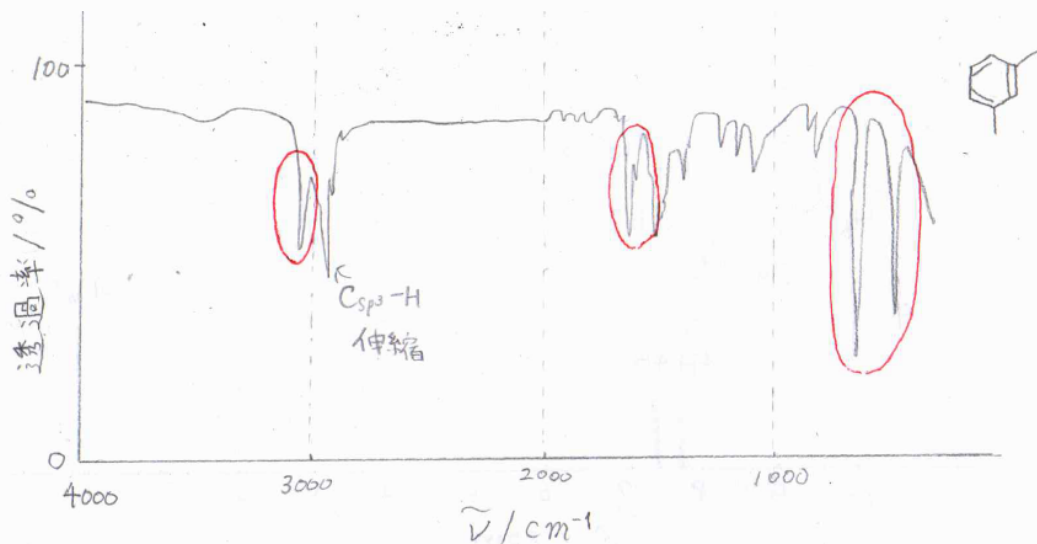
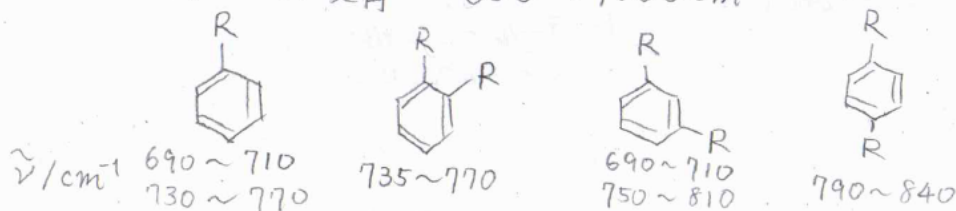
通常の sp² 炭素と大差ない化学シフトを示す。

IR

Ph-H 伸縮 3030 cm⁻¹

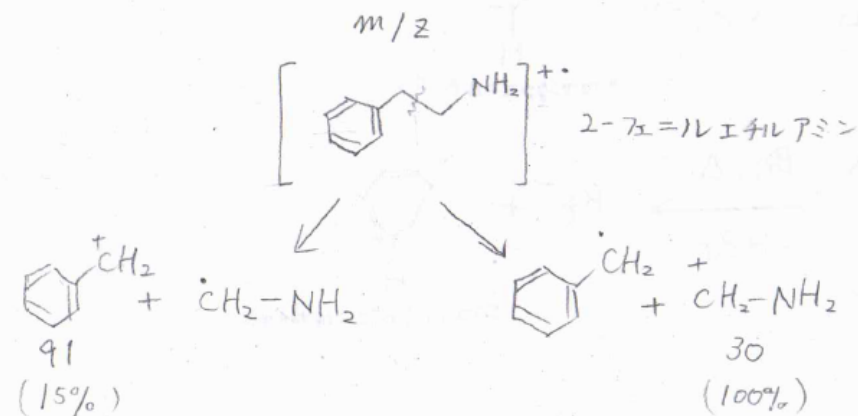
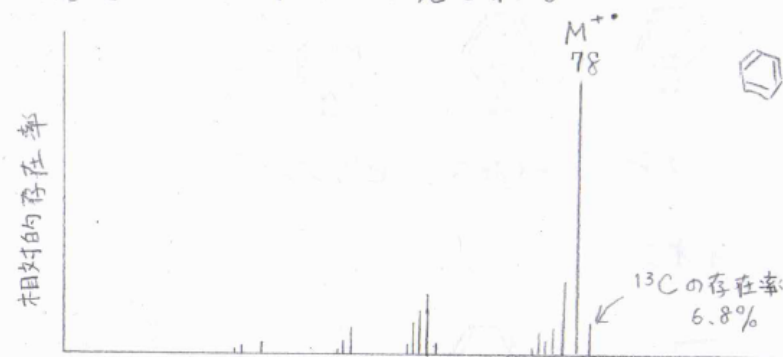
C=C 伸縮 1500~2000 cm⁻¹

C-H 面外変角 650~1000 cm⁻¹



質量分析

顕著なフラグメント化は見られない



紫外分光法

π-π* 遷移に対応する吸収帯で微細構造を示す。強度は弱い。

