

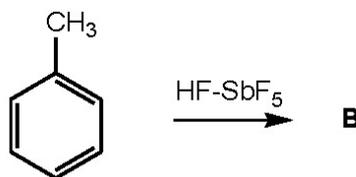
Preparatory Problems IChO 2012

Theoretical Problems



問題 19. 超強酸溶液中のトルエン

HF-SbF₅混合物にトルエンを溶解すると、次ページの温度依存¹H-NMRスペクトル (60 MHz)を示す、化学種**B**が生じる。上部の図 (a)は-97°Cにおけるそのスペクトルの全体図で、次のパラメータ, δ : 9.38 (d, 2H), 8.40 (d, 2H), 5.05 (m, 2H), 3.30 (t, 3H) (化学シフトはppm単位で表記されている) で示される。下部の図 (b)は、温度を上昇させたときの、上部の図(a)の5-10 ppmの範囲の部分のシグナルを示したものである。



- 97°Cのときのスペクトルに対応する化学種**B**の構造を示せ。
- 97°Cのときのスペクトルにおけるそれぞれのピークを化学種**B**の対応するプロトンに帰属せよ。
- なぜ温度の上昇とともにスペクトルが変化するのか、構造と化学式、もしくはそのどちらかを用いて説明せよ。それぞれのスペクトルにどの構造が対応するか示せ。
- 与えられたデータと理論的考察を基に、c)で挙げた構造群の相対的な安定性を定性的に予測せよ。
- 97°Cにおけるスペクトルの3.30 ppmのピークはメチル基に対応している。なぜトリプレット($J = 4.4$ Hz)であるか説明せよ。

