

問題 3 1 : [18] アヌレンの核磁気共鳴スペクトル

[18] アヌレンは、18個の炭素原子から構成される芳香族化合物の一つである。[18] アヌレン分子は、6個の環内水素 ($H_{\text{内}}$) と12個の環外水素 ($H_{\text{外}}$) をもち、ほぼ平面の分子構造をしている。この [18] アヌレンについて、213K と 383K で測定した核磁気共鳴スペクトルを図1に示した。

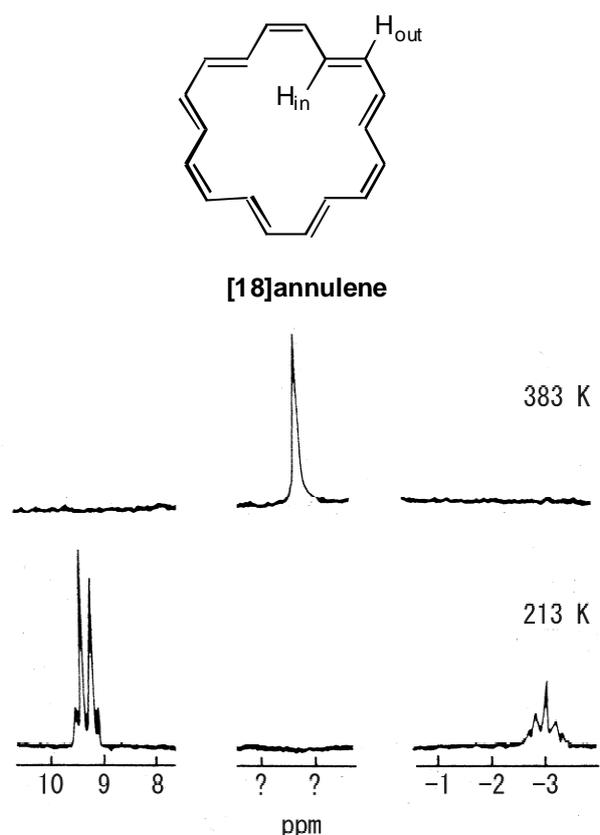


Fig.1

- 213Kでの測定スペクトルにおいて、9.3 ppm 付近のピーク群と -3.0 ppm 付近のピーク群の面積比を推定せよ。
- 213Kでの測定スペクトルは2種類の多重線ピーク群を示すのに対して、383Kでの測定スペクトルは1種類の一重線を示すのみである。この理由を説明しなさい。
- 383Kでの測定スペクトルにおいて、一重線ピークの現れる位置は、およそどのあたりと予想されるか。