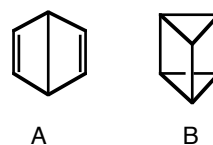


固体物性化学特論 クイズ 石田

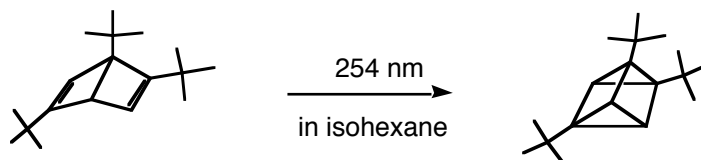
問 1

C_6H_6 の異性体として、Dewar ベンゼン(A)とプリズマン(B)が知られており、このような歪みをもった化合物を合成するのに、しばしば光反応が用いられる。以下に述べられているように、歪みのエネルギーは大変大きく、これをエネルギー貯蔵に使えるかどうか検討されたことがある。



(a) A は、ベンゼンに比べて約 250 kJ/mol 不安定であるにもかかわらず、暗所室温でベンゼンへ変換されるのは大変遅く、半減期約 2 日である。この E_{act} が大きいのは熱反応対称禁制であることに帰せられている。説明せよ。(ヒント：シクロブテンとブタジエンとの変換を適用)

(b) つぎの反応機構を説明し、熱反応対称禁制であることを示せ。なお、*t*-ブチル基は、化合物を安定化させるためだけに導入されたものである。(ヒント：エチレンの二量化を適用)



問 2

NBMO 法を用いて、下の分子 ($C_{11}H_{11}$ ラジカル) のスピン密度分布を求めよ。

次に、この分子を 1 電子酸化して、 $C_{11}H_{11}$ カルボカチオンとしたときの、陽電荷分布を求めよ。

