

宿題その2 固体物性化学 石田 提出8月25日まで

[1]

演習 1.2 図 1.20 は、ピラジンを金属カリウムで還元して得た生成物の ESR スペクトルである。hfs を解析し、生成したラジカル種を同定せよ。



図 1.20 ピラジンの還元生成物の hfs

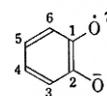
演習 1.3 *o*-キノンアニオンラジカル (*o*-セミキノンイオンラジカル) の ESR スペクトルは図 1.21 に示すとおりであるが、これを解析し、超微細結合定数を決定せよ。*o*-キノンの LCAO MO 法のエネルギーの低い方から 4 番目、および 5 番目の分子軌道は次のようである。



図 1.21 *o*-キノンアニオンの hfs

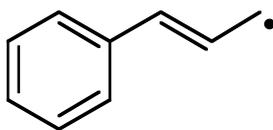
$$\phi_4 = 0.2115(\chi_1 - \chi_2) - 0.5762(\chi_3 - \chi_6) - 0.3041(\chi_4 - \chi_5) - 0.1755(\chi_7 - \chi_8)$$

$$\phi_5 = 0.4758(\chi_1 + \chi_2) + 0.1444(\chi_3 + \chi_6) - 0.3855(\chi_4 + \chi_5) - 0.3227(\chi_7 + \chi_8)$$



[2]

次の分子のスピンドensity分布を、NBMO 法によって求めよ。実際の Hückel 計算により確認するとよいだろう。



[3]

固体物性科学にかかわる文献を紹介せよ。

J. Am. Chem. Soc. (2008) からの full paper に限る。