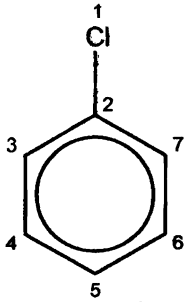
基礎化学 II（前半）期末試験問題（H. Yasuda, 1/31/2005）



1. 右図のクロロベンゼンに対する MO

$$\Psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2 + C_3\phi_3 + C_4\phi_4 + C_5\phi_5 + C_6\phi_6 + C_7\phi_7$$

の量子力学的な計算結果は下表のようになることが知られている。ただしここで、固有値は $\lambda = (E-\alpha)/\beta$ で定義される。（$\alpha < 0$, $\beta < 0$）

固有値	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7
2.39524	0.68799	0.5119	0.29179	0.18702	0.15616	0.18702	0.29179
1.75457	-0.56562	0.03212	0.25154	0.40922	0.46646	0.40922	0.25154
1	0	0	0.5	0.5	0	-0.5	-0.5
0.84409	0.41613	-0.49723	-0.33155	0.21737	0.51503	0.21737	-0.33155
-1	0	0	-0.5	0.5	0	-0.5	0.5
-1.0158	-0.16224	0.57103	-0.27652	-0.29013	0.57124	-0.29013	-0.27652
-1.99809	0.0852	-0.4045	0.40644	-0.4076	0.40799	-0.4076	0.40644

問1. この結合に関与する電子の総数は 8 であることを説明し、HOMO および LUMO を指定せよ。

問2. オルト、メタおよびパラ位の全電子密度を計算せよ。

問3. 求電子反応に対するオルト、メタおよびパラ位のフロンティア電子密度を計算せよ。

問4. 求電子反応に対するオルト、メタおよびパラ位の superdelocalizability を計算せよ。

問5. 求核反応に対するパラ位の superdelocalizability を計算せよ。

問6. クロロベンゼンの HSO_3^+（SO_2OH^+）イオンによるスルホン化について述べよ。

2. 次 2 つのうちどちらか 1 つを選んで簡潔に論じよ。

シスブタジエンの閉環反応

p-n 接合