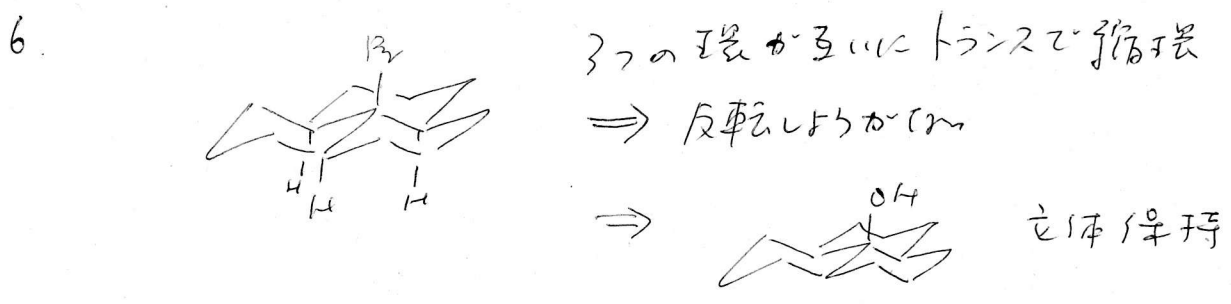
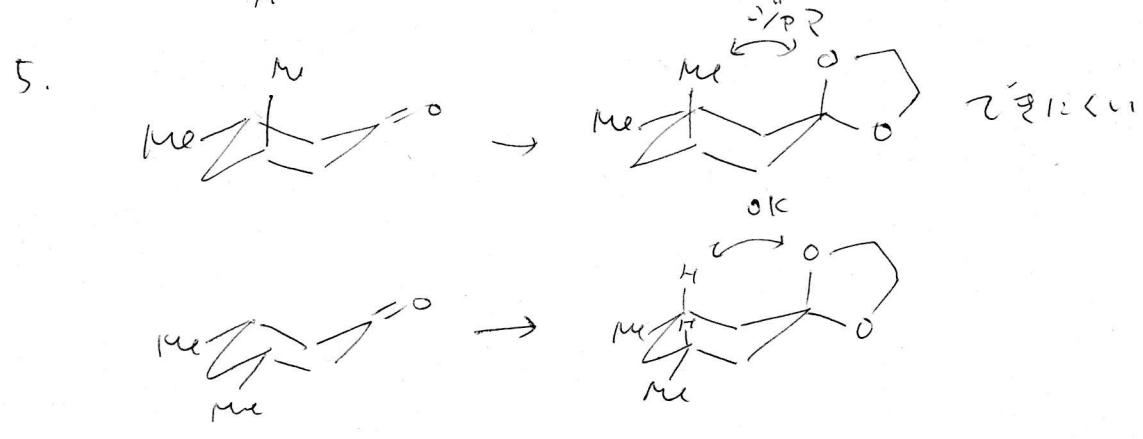
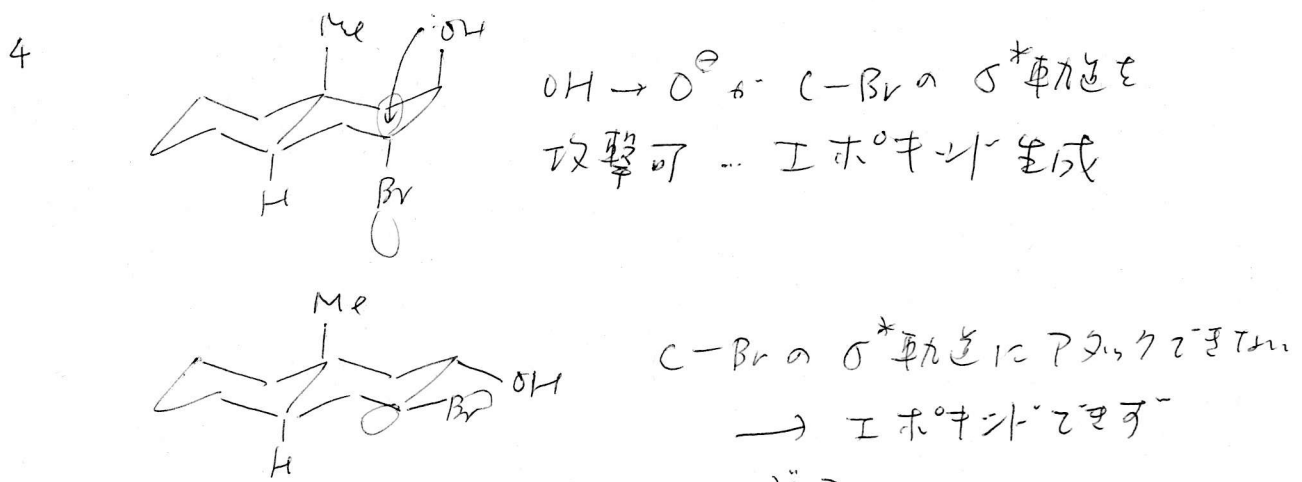
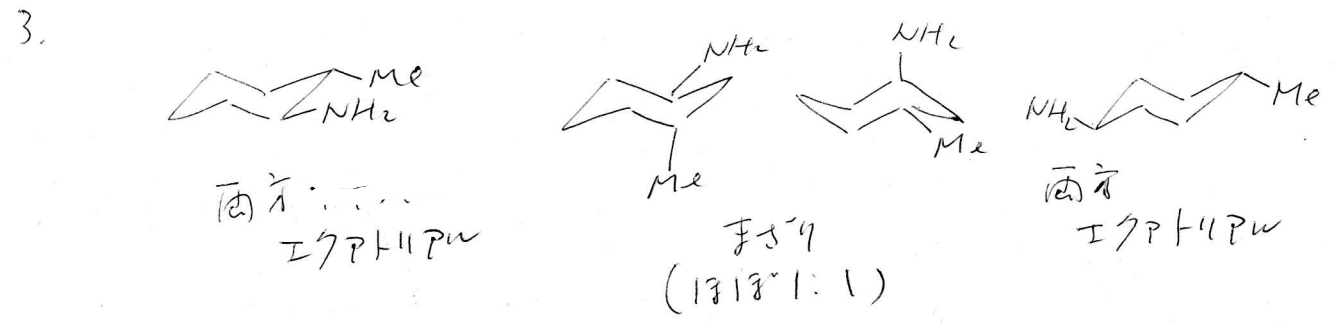
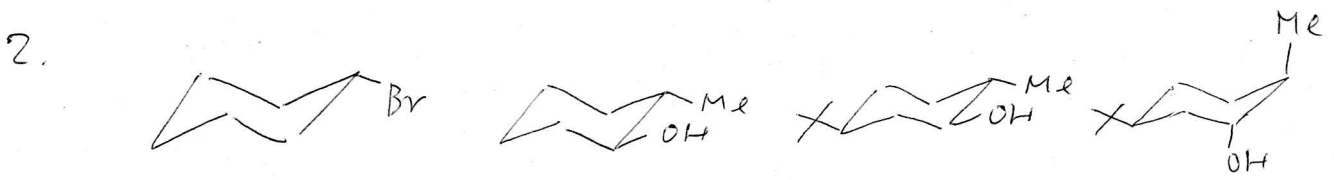
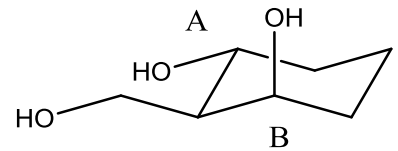


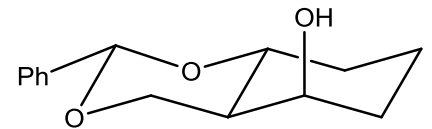
Chap.16 Answer keys for selected problems



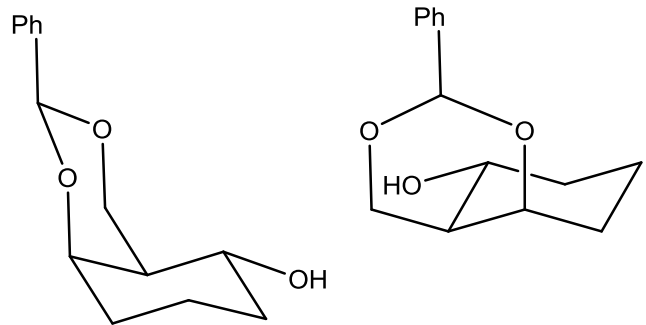
7. この化合物はシクロヘキサン環に直接ついた2つのOHが一つはエクアトリアル (A), 一つはアキシヤル (B) になっている。ベンズアルデヒドと反応するとアセタールが生じる。



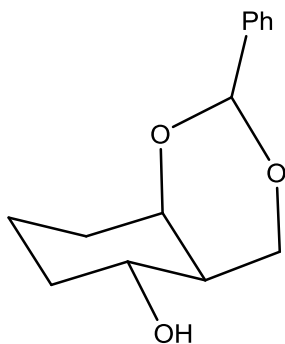
Aが含まれるアセタールは右のものであり、トランスデカリン形構造。



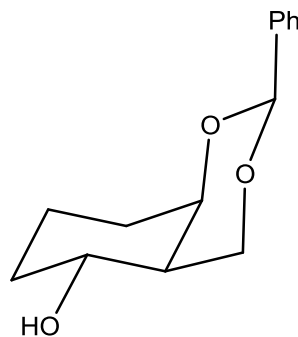
Bだと右のシスデカリン形で、これは明らかにトランス型よりも高エネルギー。描き方の注意として、2つめの6員環のいす形が分からないようなものはNG (右側の絵)。



他にも何通りか描けるが、いずれにしても、2つめの6員環のコンホメーションがわかる角度で描くこと。

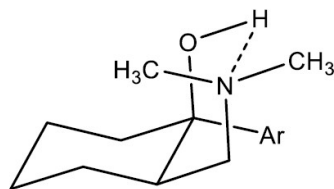


no good

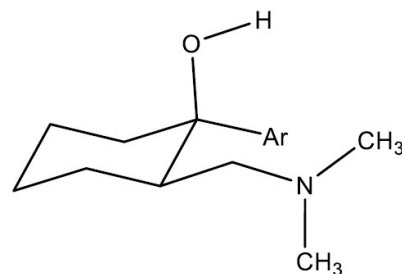


good

8. (a)



(b)



[Ar は 3-methoxyphenyl 基を表す]

a)は水素結合をしているが cis-デカリン類似の構造であり、擬アキシヤル方向に出た置換基にはそれなりに立体反発がありそう。b)は立体反発は回避できているが、水素結合によるエネルギーの利得がない。どちらもどっちに見えるが、半経験的分子軌道法(PM3)で計算すると、b)の方が 2.9 kJ/mol だけ低エネルギーという結果が得られた。これを $\Delta E = -RT \ln K$ に入ると、室温で a):b) = 24:76 となる。