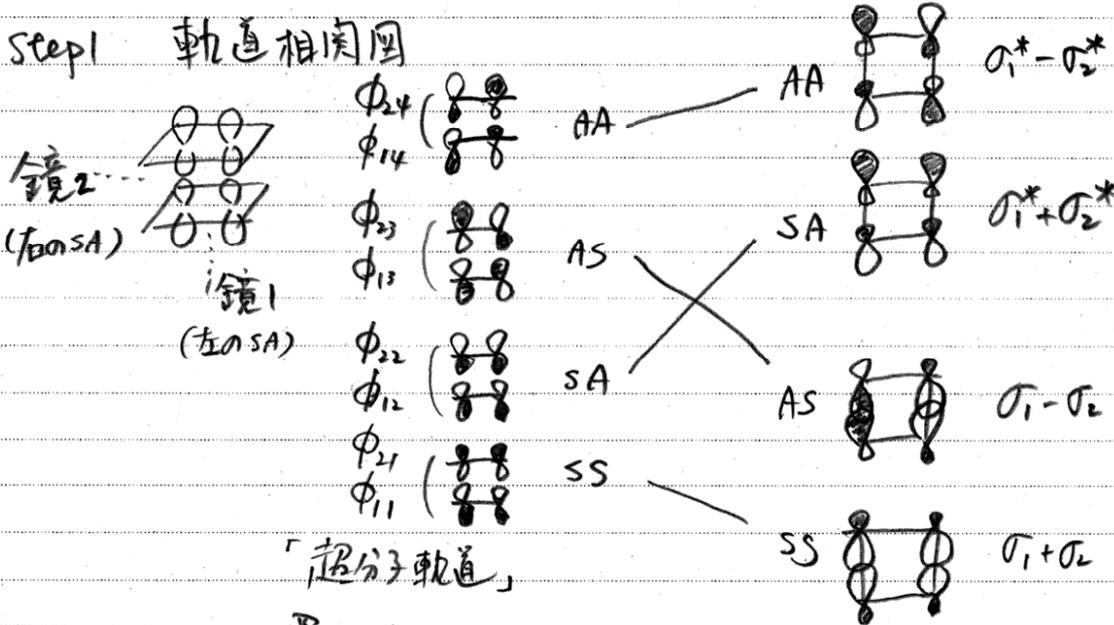


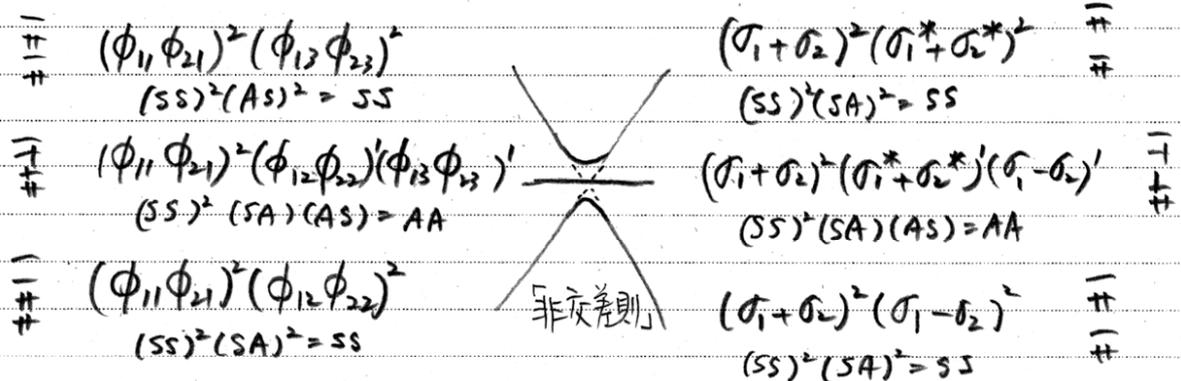
授業科目 固体化学 量子化学	施行 月 日	年 月 日 曜日 第 時限	昼・夜の別 入学年度 学年 学籍(番号)	ふりがな	★評点
担当教員	座席	教室 番	学籍番号	氏名 石田	

(注意) ★印を除き必ず記入すること。1年生は、クラス番号も記入すること。(学籍番号は全桁記入すること)

[2+2] 環化付加が光励起熱禁制であることの説明



Step 2 電子配置相関図



Step 3 詳細

鏡2の置換は, supra-supra を仮定したものである。このとき光励起 AA が許容, 基底 SS は禁制である。対称性の交替により選択律を比べる;

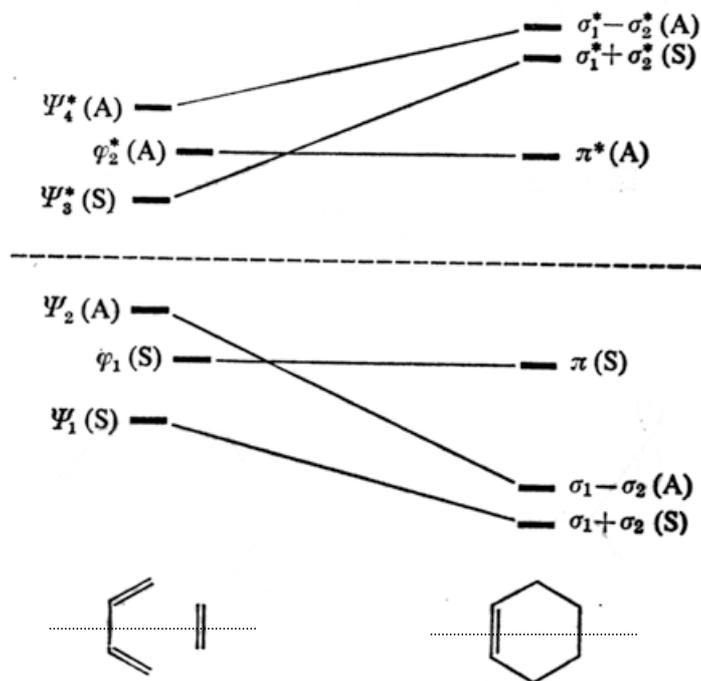
[2+2] 熱 (supra-antara, antara-supra) 光 (supra-supra, antara-antara)

antara は立体因子に依り禁制である。E4v は小さいから、(裏面は※印の箇所から書始めること。)

[4+2] の場合 宿題

軌道相関図をヒントに示すので、残りを完成させなさい。

Step 1. 軌道相関図



(問1) 原系、生成系の分子軌道を図示して、エネルギー準位が妥当であることを確認せよ。ここで S, A は、上記点線のように紙面垂直に置いた鏡に対する対称性を示してある。

Step 2. (問2) 電子配置状態相関図を描け。ブタジエンとエチレンともに基底状態、ブタジエンが第一励起状態でエチレンが基底状態、ブタジエンが基底状態でエチレンが第一励起状態、の3つを描く。

Step 3. (問3) 対称性保存則 (および非交差則) を適用し、[4+2] 環化付加反応における熱反応と光反応の許容/禁制を評価してみよ。 Woodward-Hoffmann 則を確認せよ。

(問4) ジエンの励起が関わる光反応と、ジエノフィル (モノエン) の励起が関わる光反応とでは、許容/禁制の状況が異なるかもしれない。状態相関図から考察せよ。