

| 科目 | | 物理有機化学 (Physical Organic Chemistry) | |
|----------|--|--|--|
| 担当教員 | | 九鬼 導隆 教授 | |
| 対象学年等 | | 応用化学専攻・1年・後期・選択・2単位 | |
| 学習・教育目標 | | A4-AC3(100%) | JABEE基準1(1) (d)1.(d)2-a,(d)2-d,(g) |
| 授業の概要と方針 | | ウッドワード-ホフマン則とフロンティア軌道論のように、有機化学反応も分子軌道や遷移状態等の物理化学的視点から理解されるべきである。よって、本講義では、有機反応機構論で学習した内容をより深く理解するために分子軌道論とその有機化学への応用を解説する。また、有機物質の同定に使用される機器分析の多くは、基本原理として分子分光が用いられている。よって、機器分析の原理を理解するために分子分光の基礎についても解説する。 | |
| | | 到達目標 | 到達目標毎の評価方法と基準 |
| 1 | 【A4-AC3】変分法の原理、分子の形成や分子軌道についての基本的な概念を理解する | | 中間試験で、変分原理、分子を扱う際の種々の近似、分子軌道について説明させ、的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 2 | 【A4-AC3】ヒュッケル法等の分子軌道法の仕組みを理解する。 | | 中間試験で、ヒュッケル法等の分子軌道法について、近似の扱い等が的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 3 | 【A4-AC3】ハートリー方程式や平均場近似、SCFによる分子軌道法の仕組みを理解する。 | | 中間試験で、ハートリー方程式の導出手順、平均場近似の意味等を解説させ、的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 4 | 【A4-AC3】簡単な有機化学反応をフロンティア軌道論の立場から説明できる。 | | 中間試験で、基本的な有機化学反応を与え、分子軌道やフロンティア軌道を用いてその反応が的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 5 | 【A4-AC3】分子の電子・振動・回転状態のエネルギー準位とそれぞれの関係を理解し、分子の励起・緩和過程やその機構を定性的に説明できる。 | | 定期試験で、分子の励起と緩和の動力学をポテンシャル曲面上の代表点の運動としての的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 6 | 【A4-AC3】可視紫外吸収、発光（蛍光・燐光）スペクトルの原理と得られる情報について説明できる。 | | 定期試験で、可視紫外吸収、発光（蛍光・燐光）の選択律、フランク-コンドンの原理、分子の中の電子のエネルギー状態、電子遷移に伴う分子構造の変化等が的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 7 | 【A4-AC3】振動分光（赤外吸収とラマン分光）の原理と得られる情報について説明できる。 | | 定期試験で、赤外線吸収・ラマン分光の基本原則、分子振動と分子構造の関係等についての的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 8 | 【A4-AC3】核スピンのエネルギー状態や核磁気共鳴の基本原則、局所磁場や局所的遮蔽、化学シフト等を理解し説明できる。 | | 定期試験で、外部磁場による核スピンのエネルギー分裂、ラーモア周波数、局所磁場の変化と化学シフトへの影響、スピン結合と吸収線の分裂パターン等についての的確に説明できるかどうかで評価する。 |
| 9 | | | |
| 10 | | | |
| 総合評価 | | 成績は、試験100% として評価する。中間試験、定期試験をそれぞれ50%として評価し、2回の試験の合計100点満点中60点以上を合格とする。 | |
| テキスト | | ノート講義 | |
| 参考書 | | 「初等量子化学入門 第2版」：大岩正芳（化学同人） 「基礎量子化学 軌道概念で化学を考える」：友田修司（東京大学出版会） 「アトキンス物理化学 第6版 下巻」：P.W. Atkins 著 / 千原秀明・中村巨男 訳（東京化学同人） 「分子の構造」：坪井正道（東京化学同人） | |
| 関連科目 | | 本科4年の応用物理II，物理化学I，5年の物理化学II，専攻科1年前期の量子物理，有機反応機構論 | |
| 履修上の注意事項 | | 量子力学の知識を前提とするので、本科4年生の応用物理II，物理化学Iや5年生の物理化学IIをしっかりと理解しておくことが望ましい。また、専攻科1年前期の量子物理や有機反応機構論を履修しておくことが望ましい。 | |

