

(科目コード : 8707920075KZ)

【改訂】第19版(2015-03-12)

【科目】構造化学

【科目分類】専門科目 【選択・必修の別】必修 【学期・単位数】後期・1単位

【対象学科・専攻】材料コース 5年

【担当教員】武田 亘弘

【授業目標】

この授業では、「有機構造化学」を学び、以下を目標とする。

原子軌道の線形結合により、混成軌道や分子軌道ができあがる概念が説明できるようになる。

芳香族性、ホモ芳香族性、メビウス芳香族性などについて説明できるようになる。

分子軌道計算の基礎が理解でき、その計算結果から、電子密度、結合次数などを求められるようになる。

分子軌道の関連の概念を理解し、ペリ環状反応における位置および立体選択性を分子軌道から説明できるようになる。

【教育方針・授業概要】

本科目の総授業時間数は22.5時間である。

【教科書・教材・参考書等】

教科書：構造有機化学 有機化学を新しく理解するためのエッセンス：齋藤勝裕：三共出版：4-7827-0402-X

教科書：構造有機化学演習：齋藤勝裕 他：三共出版：4-7827-0443-7

参考書：有機化学の理論 学生の質問に答えるノート：山口達明：三共出版：4-7827-0678-2

参考書：わかる有機化学シリーズ1 有機構造化学：齋藤勝裕：東京化学同人：4-8079-1488-3

参考書：はじめての構造化学 構造化学のなぜに答える：細谷治夫：オーム社：4-274-21401-1

【授業形式・視聴覚・機器等の活用】

講義形式で行う

【事前に行う準備学習】

この授業は、基礎有機化学、有機化学I、有機化学II、を履修していることを要件とする。

【成績評価方法】

[後期]中間試験：50%、期末試験：50%、レポート：0%

【本校の学習・教育目標】

(C) 技術的問題解決のための専門分野の基本的知識を身に付ける

各学科における専門科目を学習することにより、技術的課題を理解し対応できる

【授業計画】（構造化学）

回数	授業の主題	内容	レポート	宿題
1	炭素原子	炭素原子における軌道の混成 非局在二重結合		
2	アルカン	シクロプロパン 立体電子効果 アンチペリプラナー効果 ゴーシュ効果 アノマー効果 エタンの分子内回転		
3	ヘテロ原子 芳香族性	アンモニア、アンモニウムイオン 水の結合様式 混成軌道を用いる説明、 原子価状態から組み立てる方法 C=O、C=N ピリジン、ピロール 置換基の結合状態、置換基効果 ヘテロ環とヒュッケル芳香族性 メビウス芳香族性		
4-7	反応中間体として現れる不安定種	カチオンの構造、置換基効果、隣接基関与 アリルカチオン 架橋イオン、ホモイオン 非古典的構造 ホモ芳香族性		
8	試験			
9-11	分子軌道法基礎	FEMによる分子軌道 シュレディンガー方程式 ヒュッケル法と永年方程式 電子密度 結合次数 自由原子価		
12-15	ペリ環状反応	軌道相関と非局在化による安定化 シグマトロピー転位 スプラ、アンタラ 軌道対称性と選択律 クライゼン転位における反応中間体の構造と立体選択性 電子環状反応（共役ポリオレフィンの閉環、環状オレフィンの開環） 軌道の対象性と、同旋、逆旋 環状付加反応 置換基によるフロンティア軌道の変化と位置選択性 軌道の二次相互作用による立体選択性		