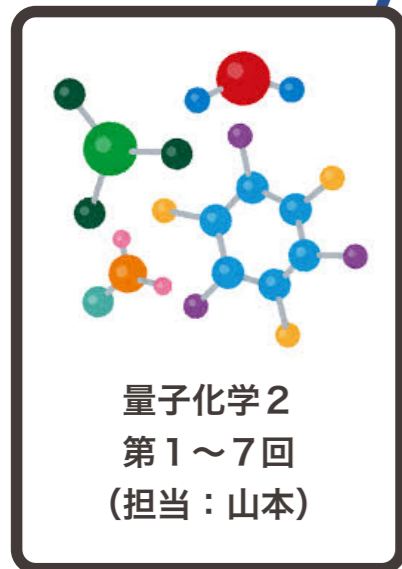


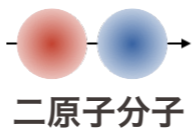
量子化学 2 : ガイダンス

講義スケジュール

1~6	前半の講義（担当：山本）
7	前半の試験（中間試験）
8~12	後半の講義（担当：松澤先生）
13	後半の試験（期末試験）



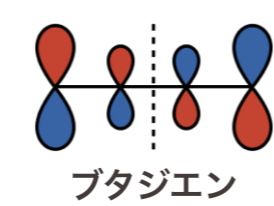
量子化学1の
学習内容を
「復習」する



第1回
二原子分子の電子状態を変分原理で解く (復習)

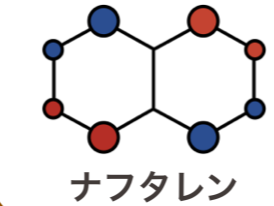


第2回
エチレンの電子状態を
ヒュッケル近似で解く

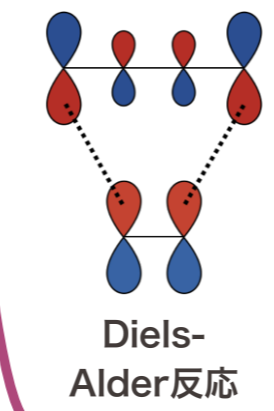


第3回
ブタジエンの電子状態を
ヒュッケル近似で解く

第4回
ブタジエンの分子軌道から
化学的性質を予想する



第5回
芳香族分子の分子軌道から
化学反応性を予測する



第6回
分子軌道から共役分子系の
化学反応を読み解く

共役分子系の
量子化学を深
く理解する

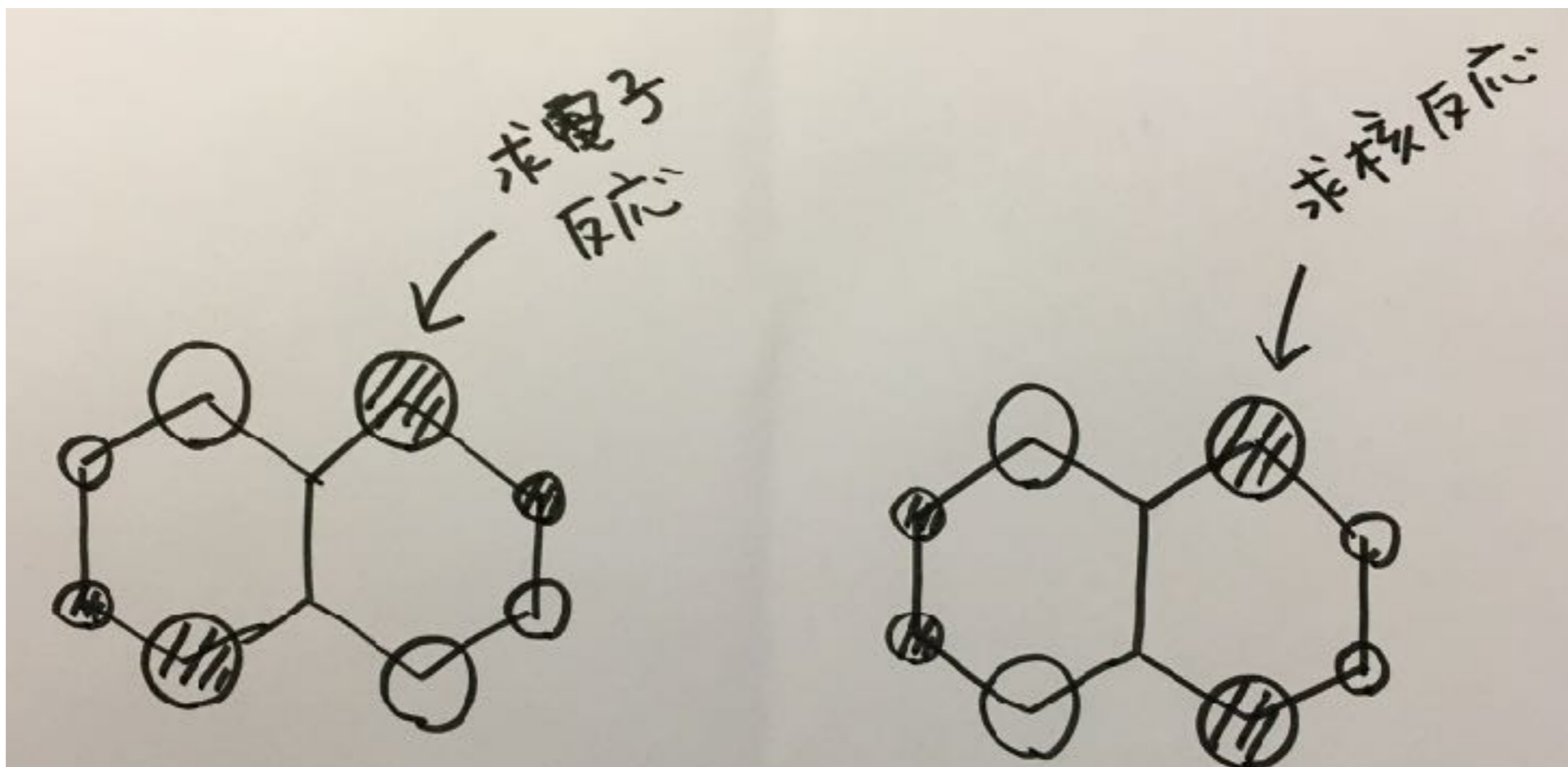
「基礎」
電子状態を解く方法を
理解する・使いこなす

「応用」
分子軌道を読み解いて
分子の性質を予測する

前半（第1～7回）の到達目標

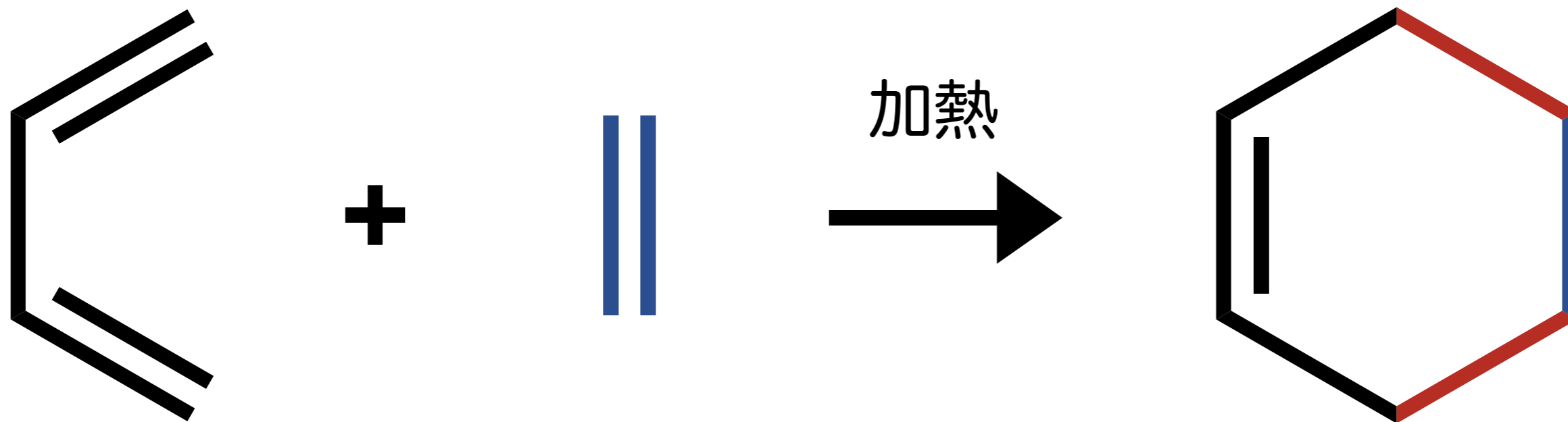
分子のなかの電子の状態を表す **分子軌道** を **図** として読み解くことで、**分子の性質** や **化学反応のしくみ** をロジカルに分析する

化学的な図解思考の技術 を身につける



Diels-Alder反応とは？

共役ジエンにアルケンが付加して6員環構造を生成する [4+2] 環化付加反応の代表例

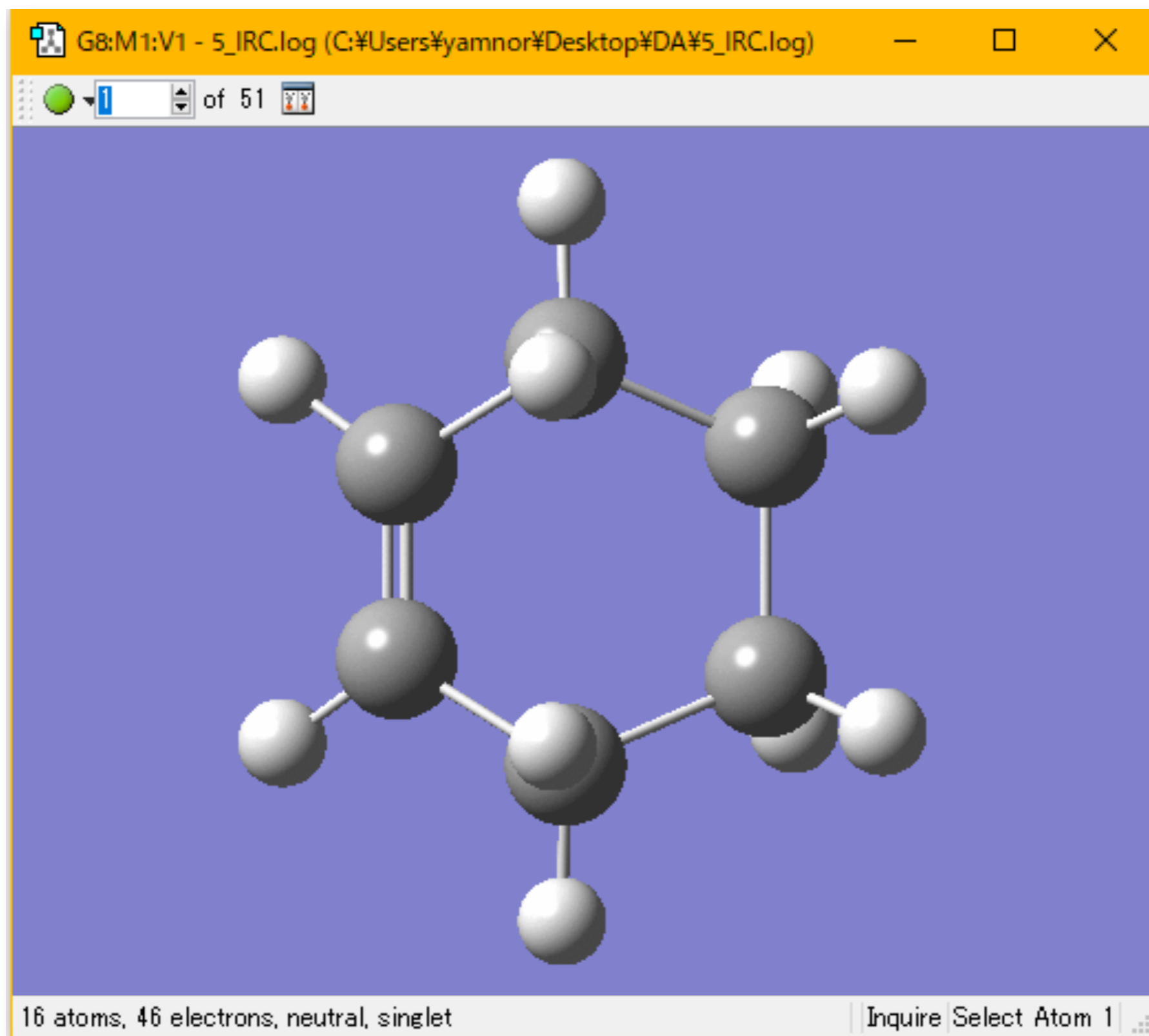


1,3-ブタジエン

エチレン

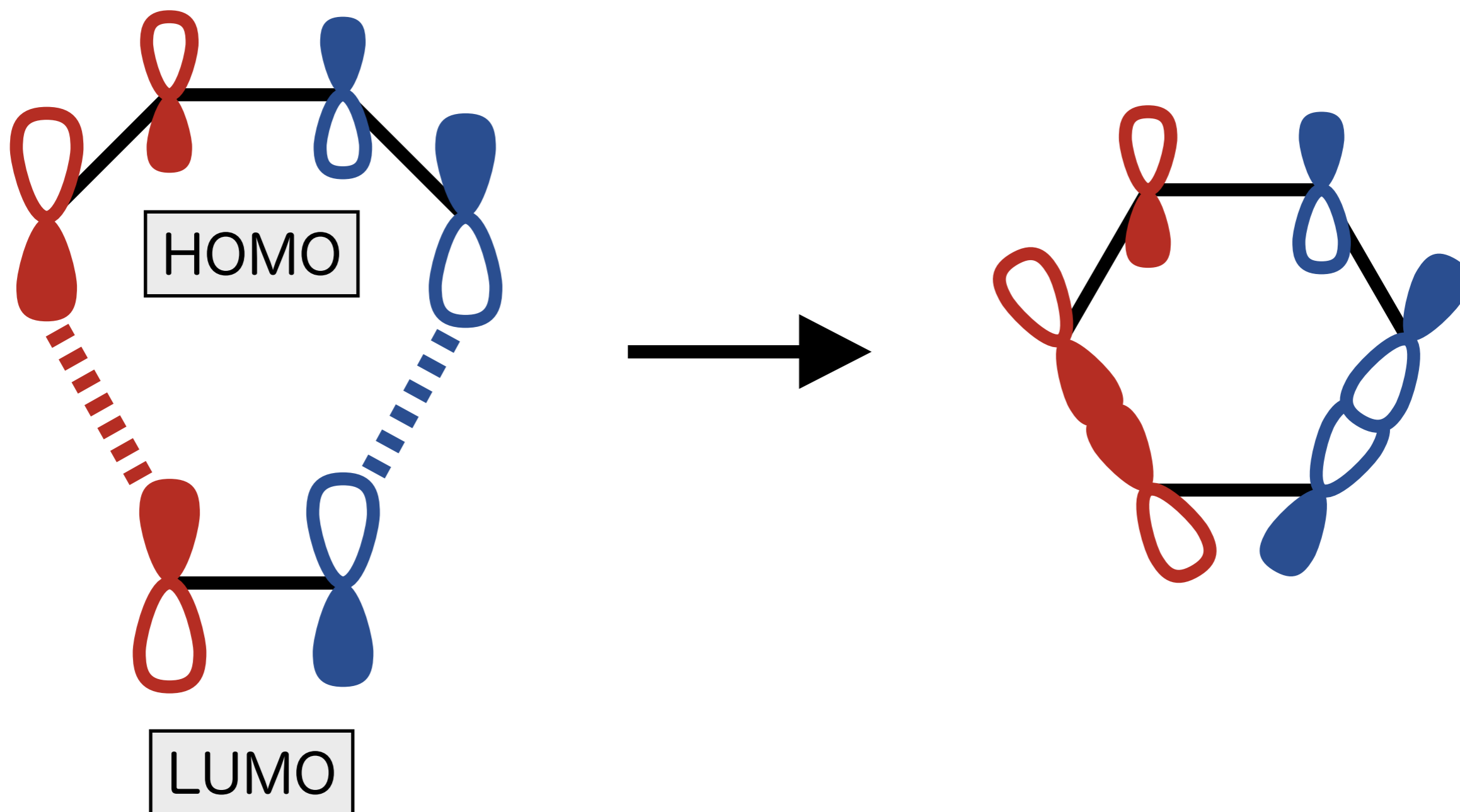
シクロヘキセン

Diels-Alder反応とは？

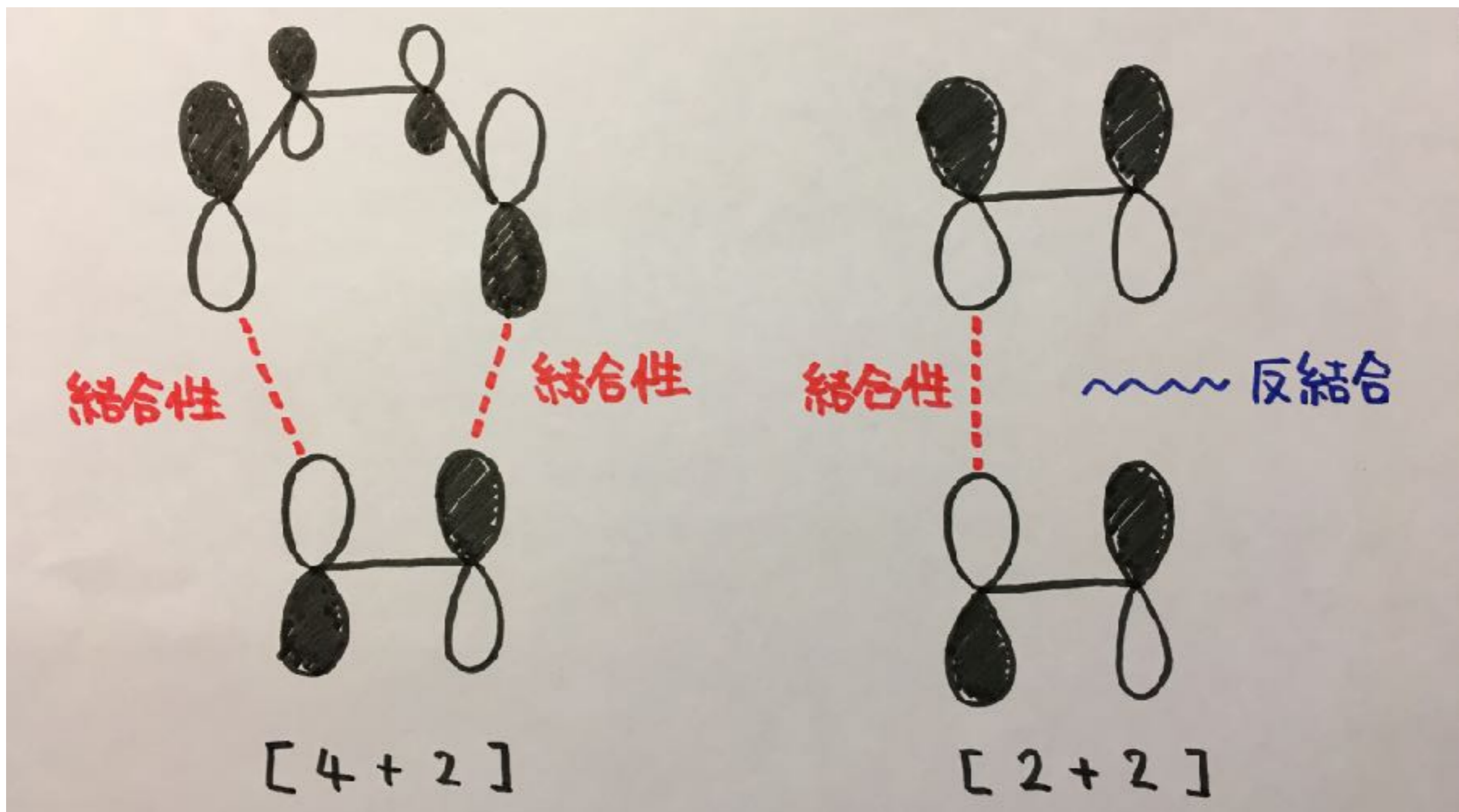


Diels-Alder反応を分子軌道論で考えると？

ブタジエンの HOMO と エチレンの LUMO が相互作用することで、環化（結合形成）が起こる

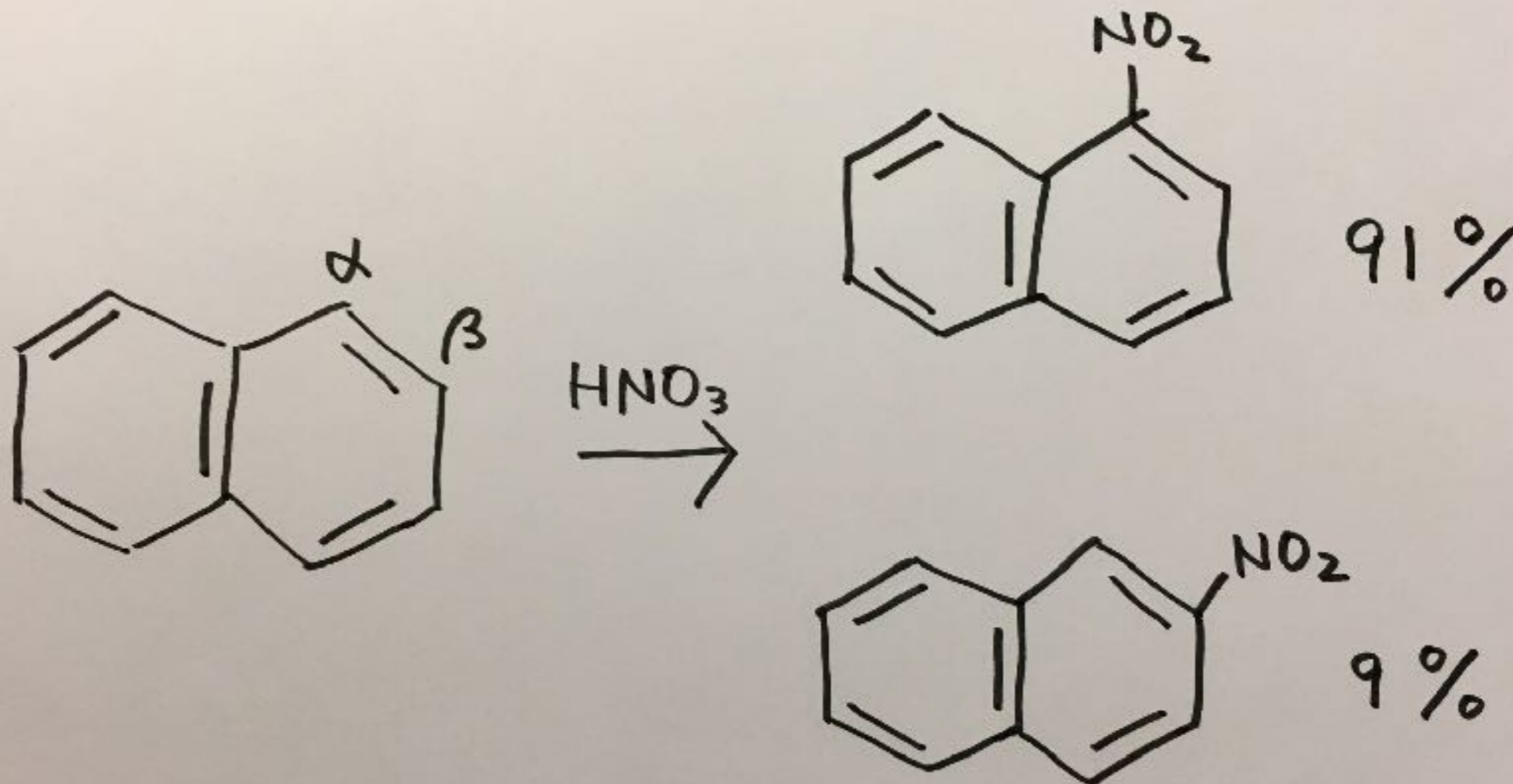


できる化学者は「図」で考える



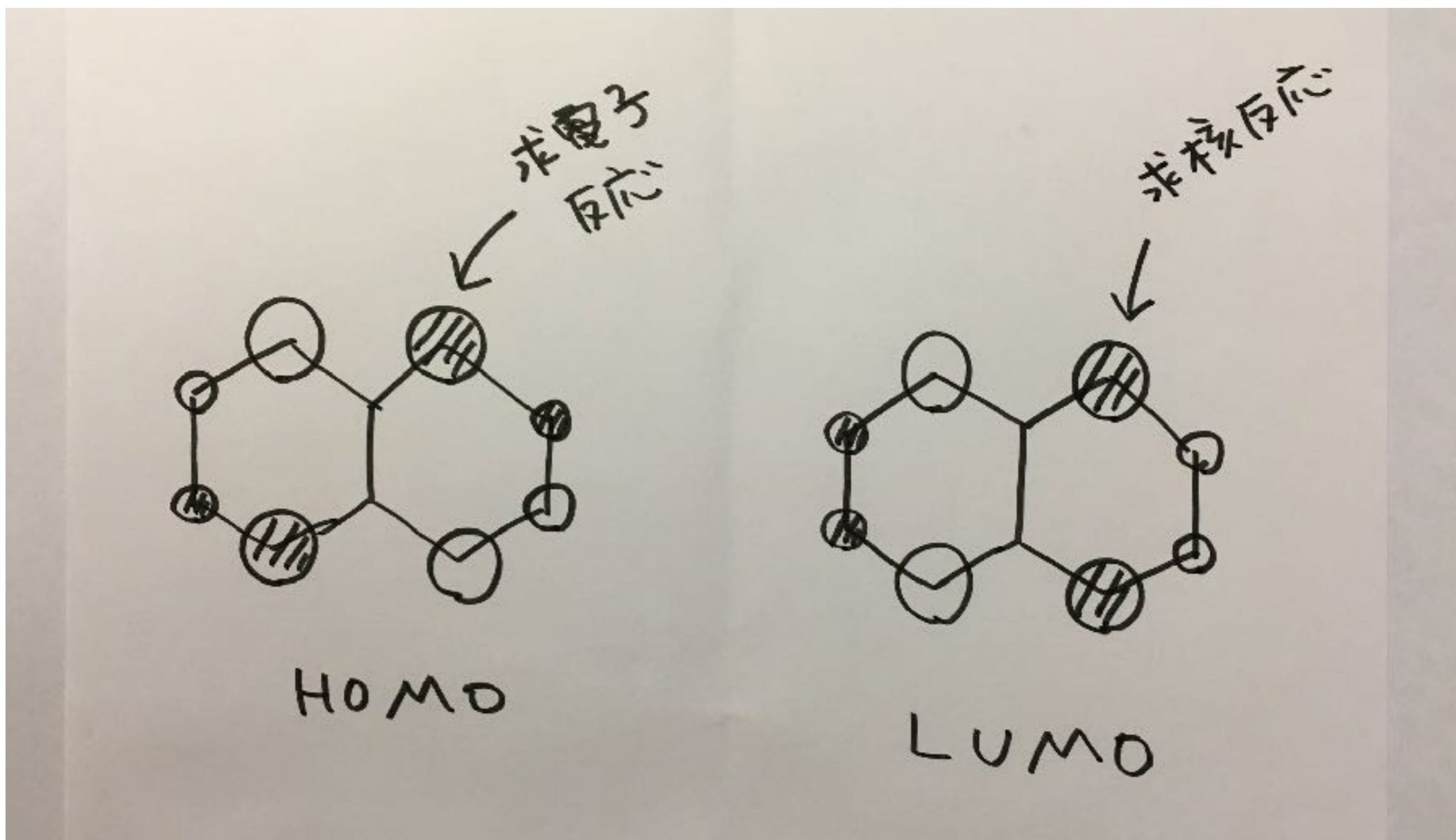
Q) 化学的な「**図解思考の技術**」を身に付けると？

A) 分子軌道を「**図**」として読み解き，分子の性質をロジカルに分析することができるようになる



Q) 化学的な「**図解思考の技術**」を身に付けると？

A) 分子軌道を「**図**」として読み解き，分子の性質をロジカルに分析することができるようになる



前半（第1～7回）の成績評価

- 小テスト（6回）：30%
 - ▶ manaba の小テスト ページで実施します
 - ▶ 提出期限は、授業の1週間後の午前9時
- 中間試験（1回）：70%
 - ▶ 試験範囲は授業中に配布する演習プリントから
 - ▶ 試験日までに演習プリントを復習しておけば、自信をもって受験することができます
 - プリントの内容が必ずそのまま出題されるというわけではありません