

<有機化学1 参考資料>

半経験的分子軌道法 (PM3) で見積もった各種物質の反応性軌道のエネルギー (単位 eV,

使用ソフトウェア: Winmoster (freeware), 1 eV = 96.487 kJ/mol)

[定性的な評価にとどめる事。イオンの計算値は特に慎重に評価する必要あり]

