

分子の構造と性質(物理的・化学的) の関係を知る・予測する

分子構造・・・分子を構成する原子(主として原子核)の
相対的空間配置

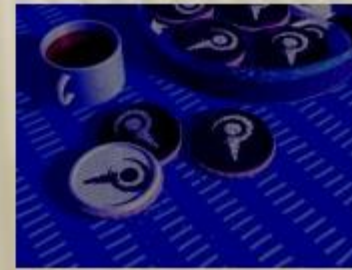
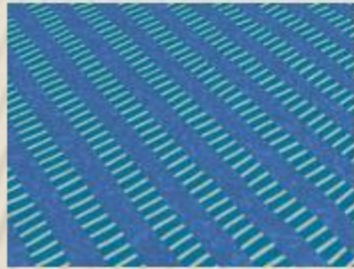
分子構造を規定するものは何か？

⇒ 構成粒子の“心地よさ”(=エネルギー的安定性)。
これは、量子化学計算により見積もり可能

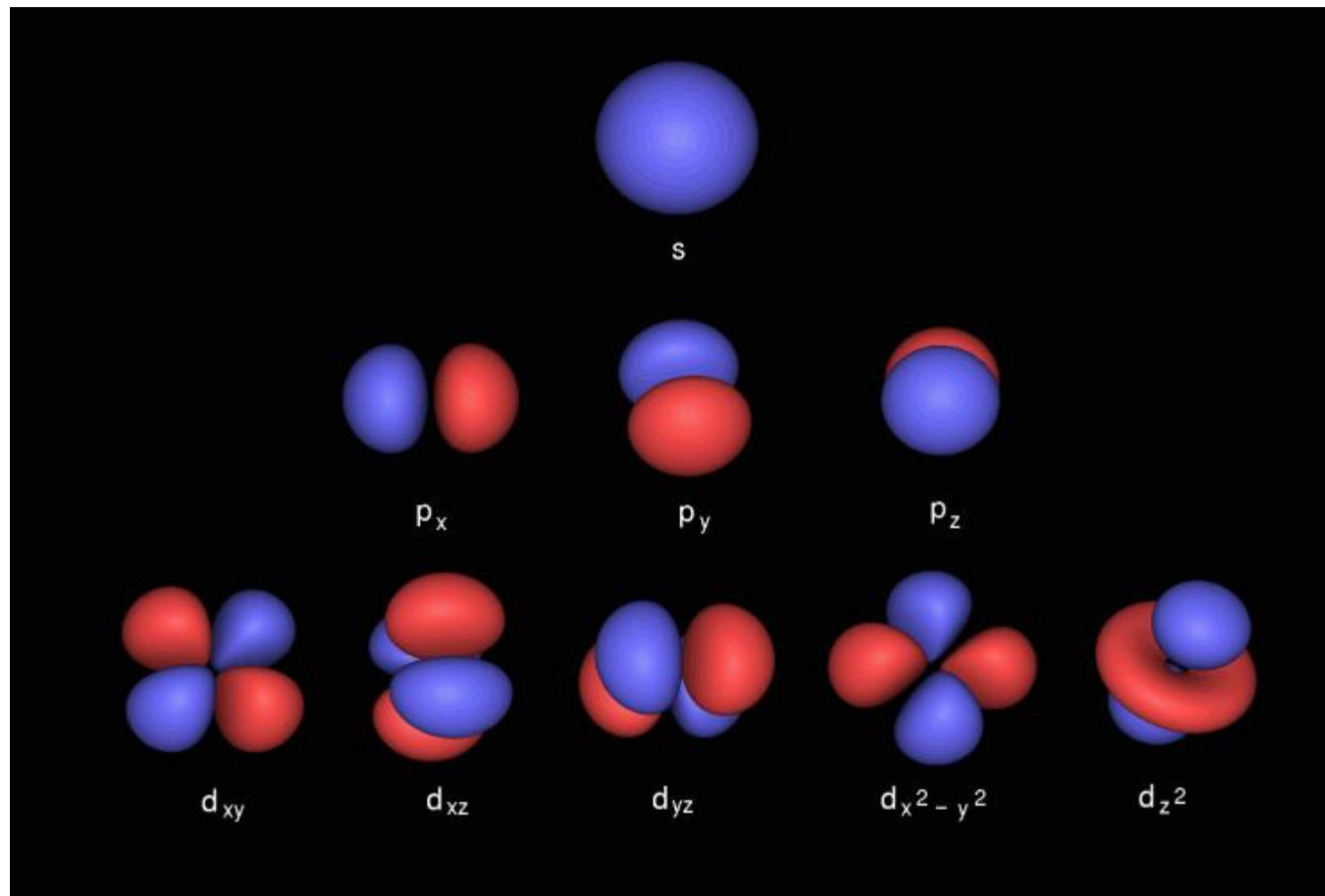
原子価結合法 (VB法)・・・原子軌道のつなぎ合わせ (直感的・メタンや π 共役系で矛盾)

分子軌道法 (MO法)・・・分子を構成する複数原子の原子核の集合体を1つの原子核のように見立てて電子の運動を見積もる

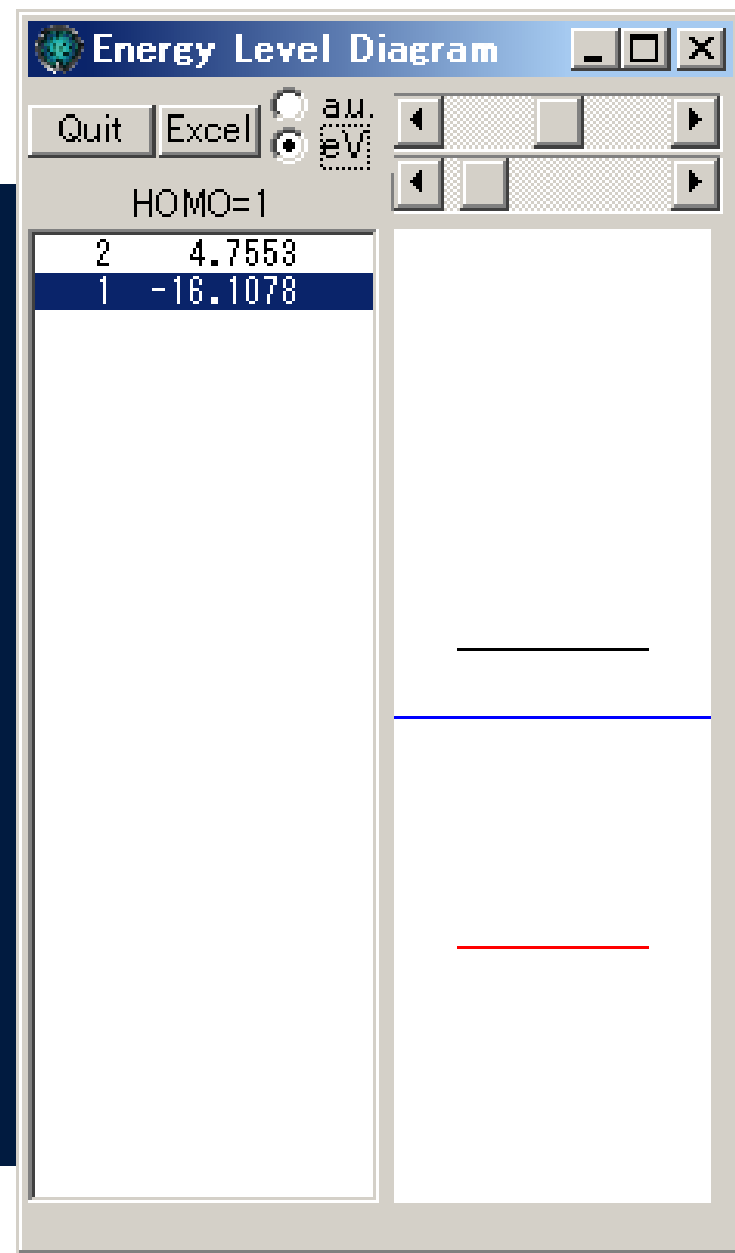
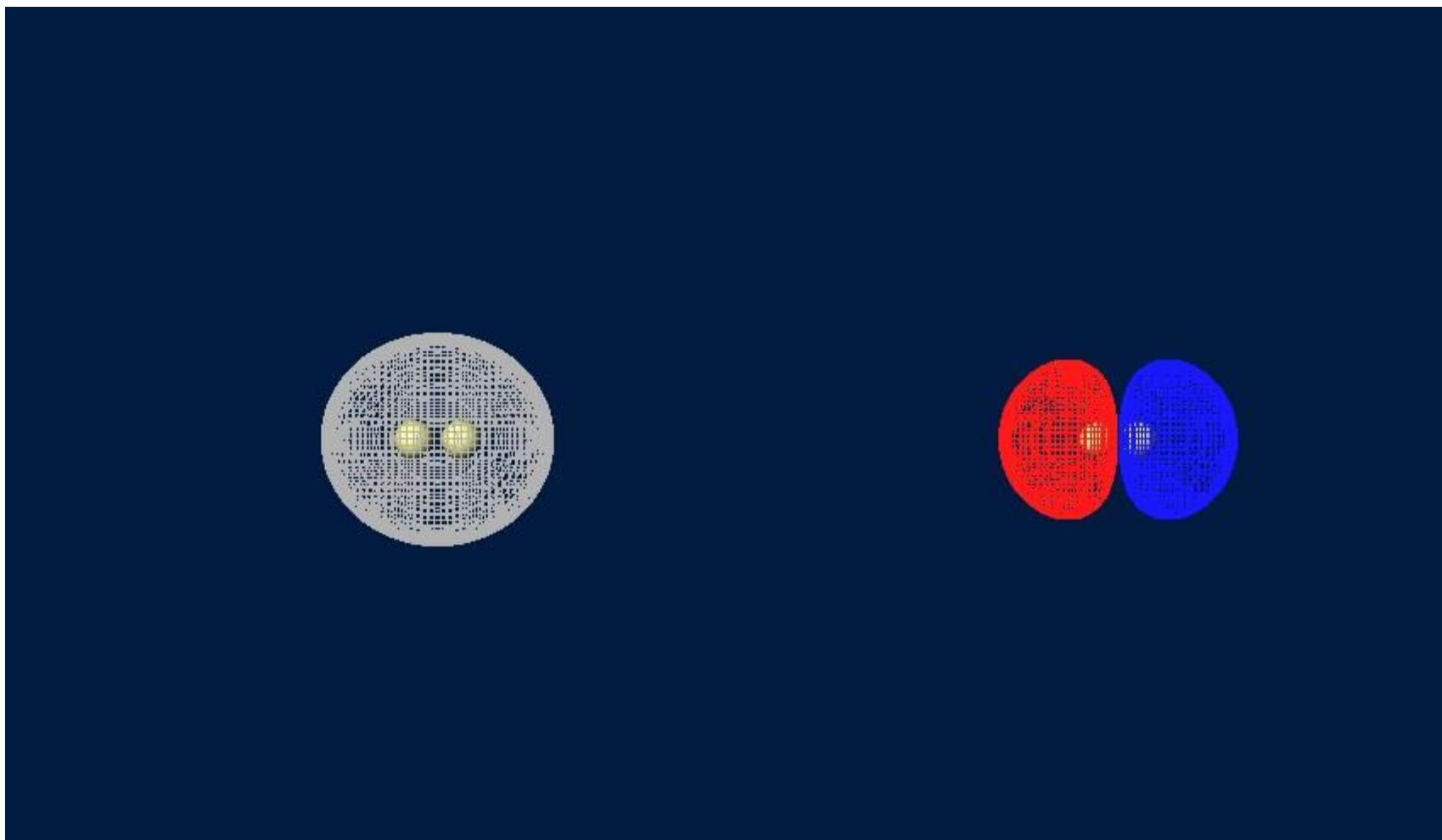
VBとMOの違いを直観的に理解する



原子軌道のかたち

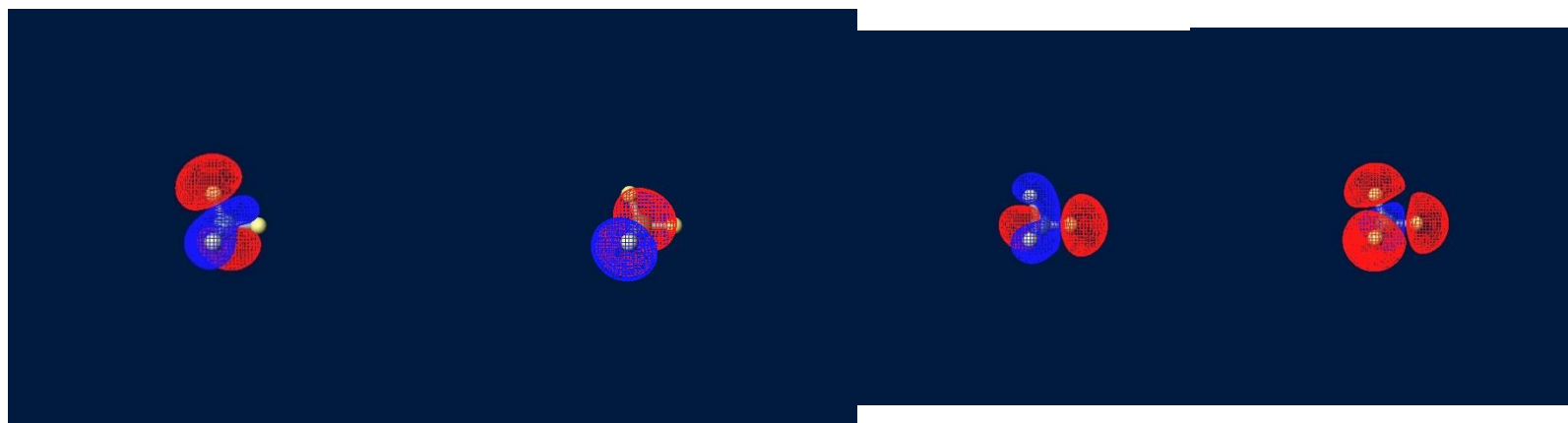
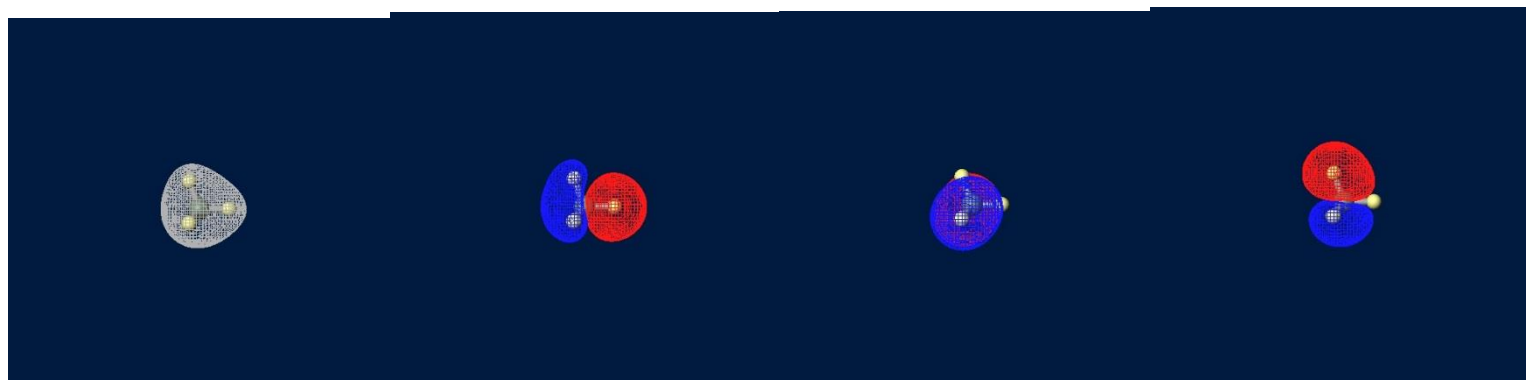


水素の分子軌道

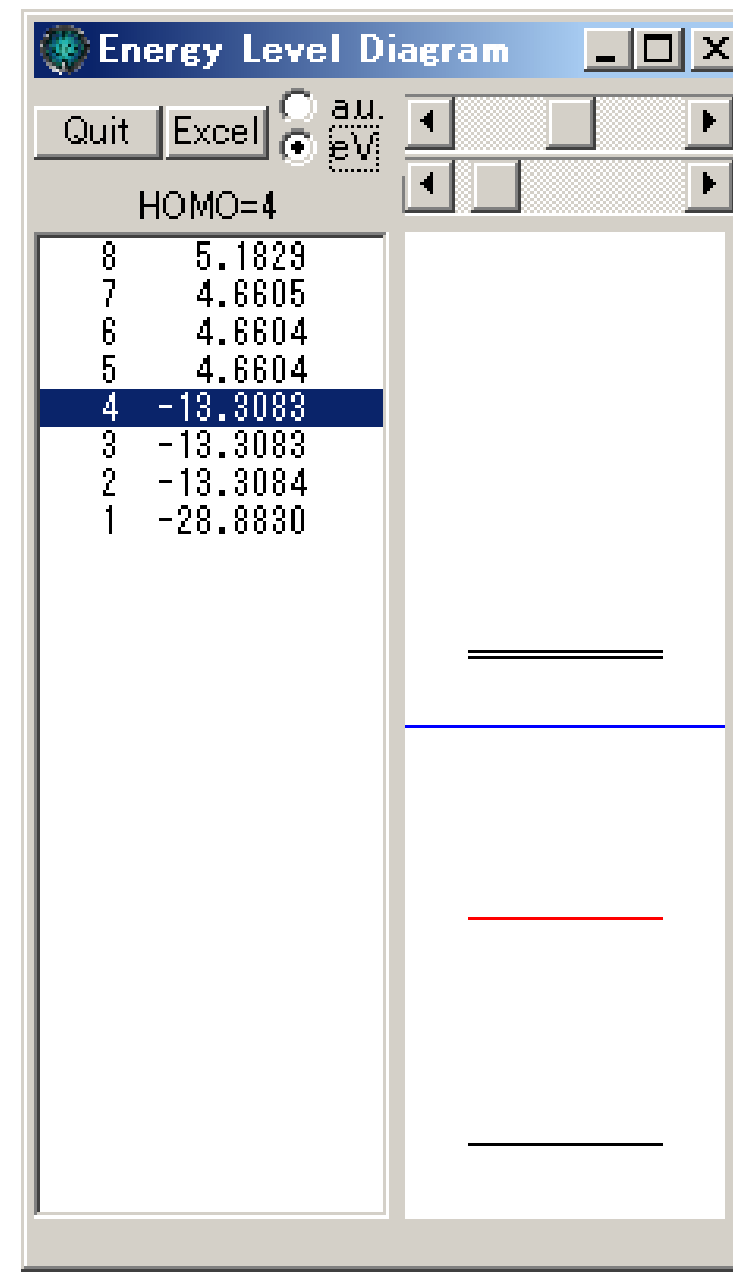


Winmostar (Free) V5.006を用いて計算

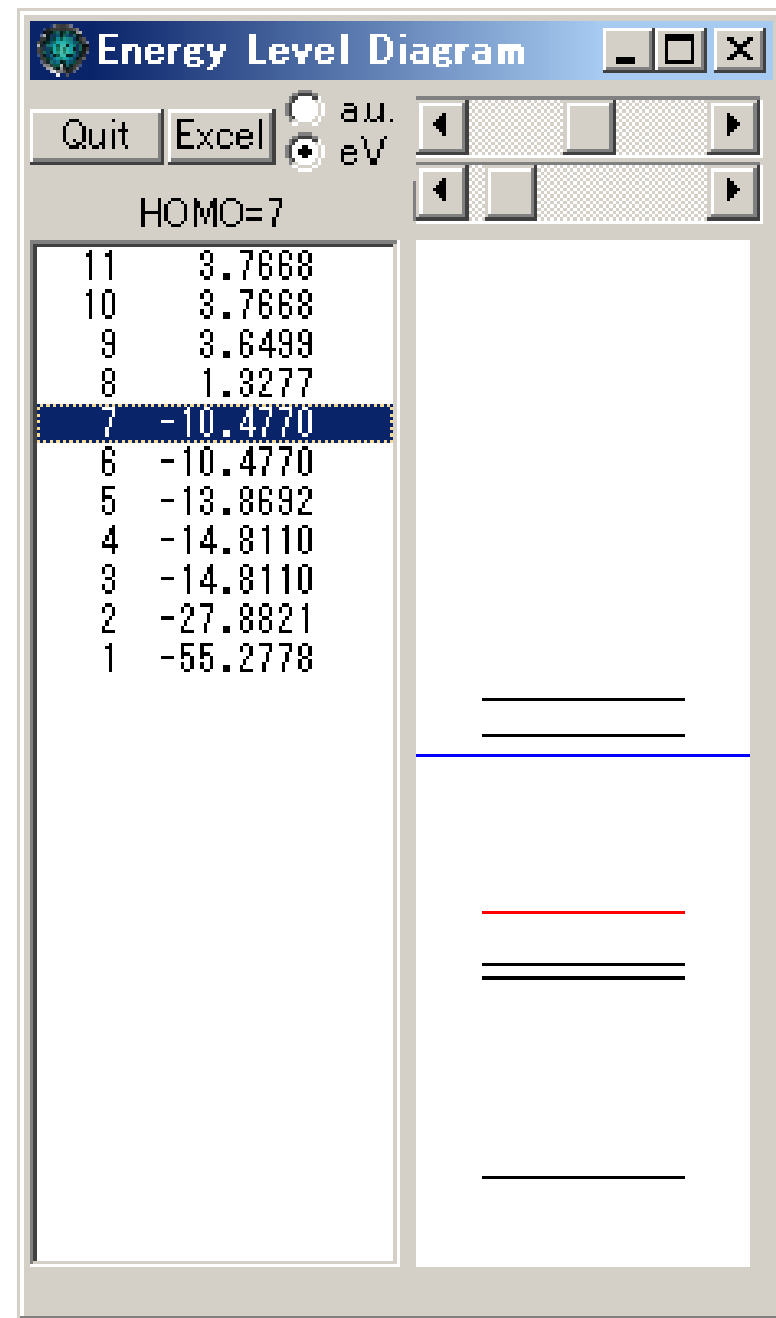
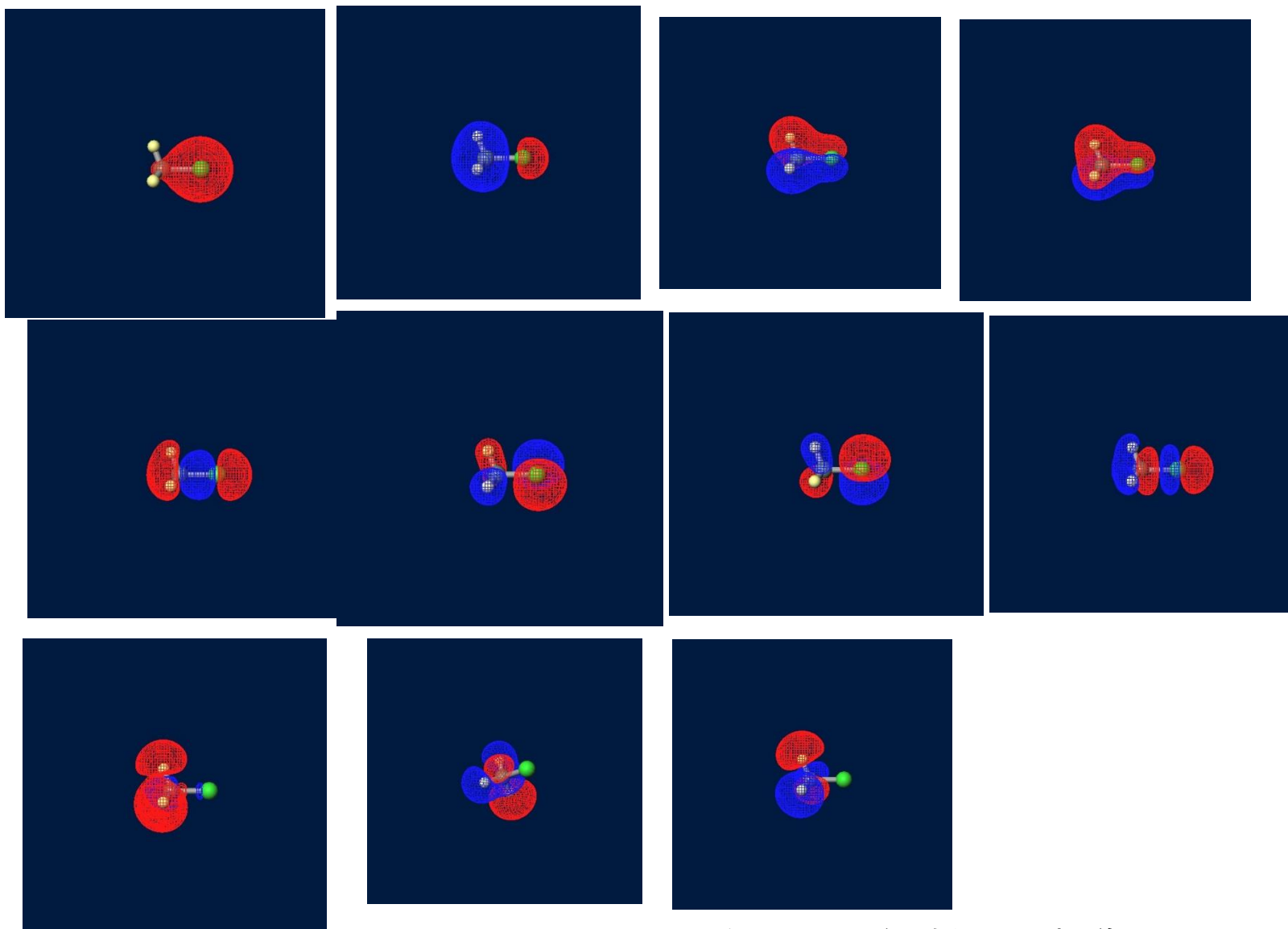
メタンの分子軌道



Winmostar (Free) V5.006を用いて半経験的分子軌道法(PM3)にて計算

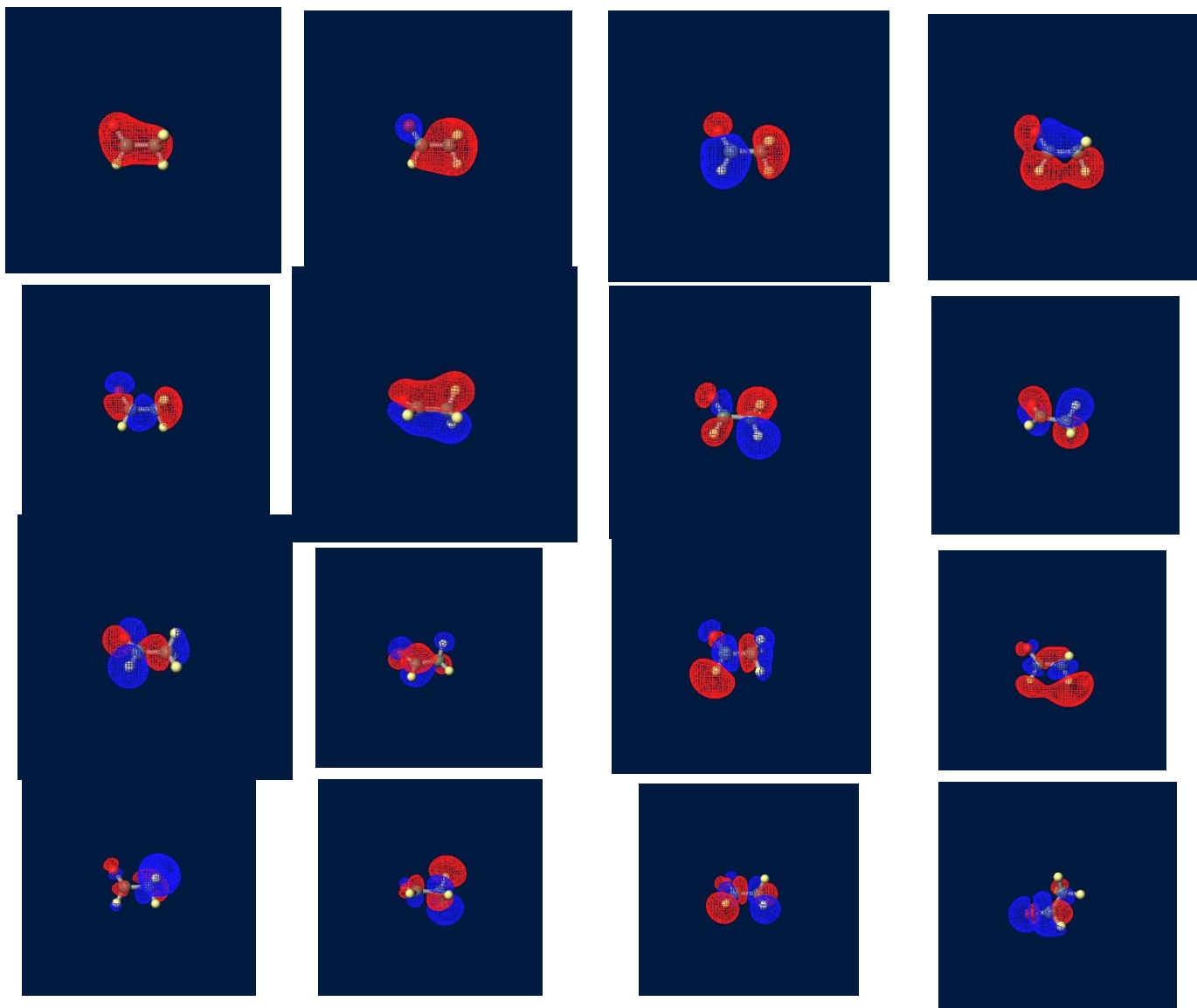


塩化メチルの分子軌道

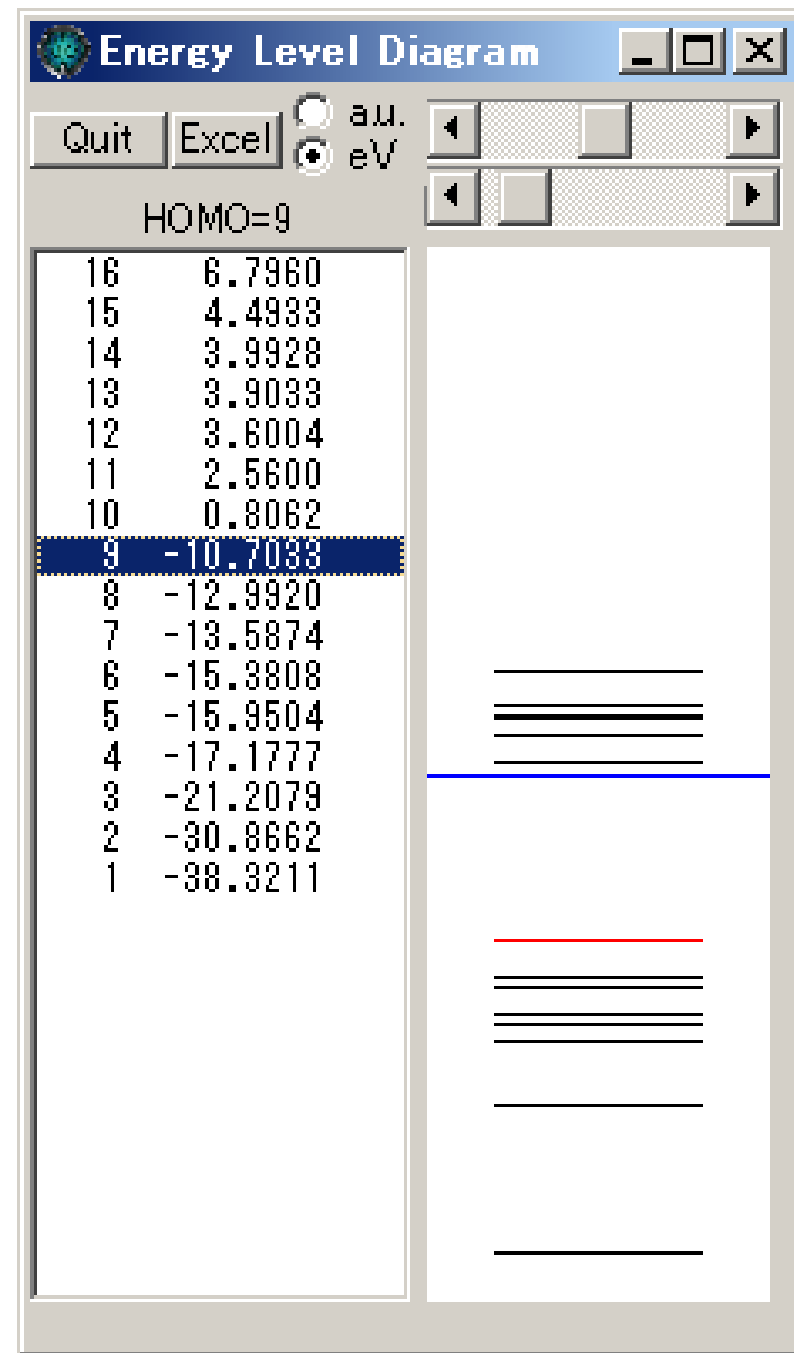


Winmostar (Free) V5.006を用いて半経験的分子軌道法(PM3)にて計算

アセトアルデヒドの分子軌道



Winmostar (Free) V5.006を用いて計算





Copyright © Kazuaki Kudo 2015. All rights reserved. All content is licensed under a [Creative Commons License \(Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/).

Use of this content constitutes your acceptance of the noted license and the terms and conditions of use.

The following attribution may be used when reusing material:
Kazuaki Kudo, Organic Chemistry 1. License: Creative Commons BY-NC-SA 3.0