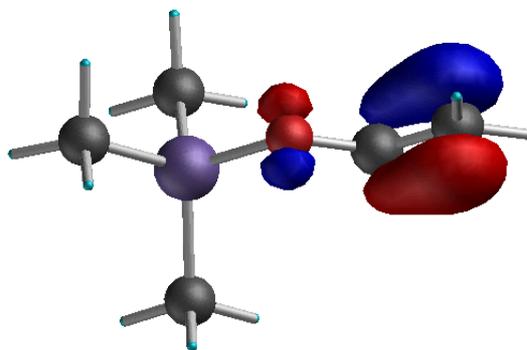


【1】 trimethylsilyl vinyl ether (CH₃)₃Si-O-CH=CH₂ の半経験的分子軌道計算の結果の一例として、MOPAC97 (Stewart & Fujitsu, 1997) からの計算結果出力の一部を添付した。構造は計算により最適化し、分子の対称性は計算により予測されたものである。右下図は HOMO surface を描いたものである。

- 問1 計算に使用された原子軌道の数はいくつか。配置すべき電子の数はいくつか。根拠とともに記せ。
- 問2 HOMO と LUMO のエネルギーを Eigenvalues の中から選び、答えよ (単位を補え)。
- 問3 出力中の X の部分はわざと伏せてある。入れるべき数字を答えよ。
- 問4 出力中にある用語のうち、PM3, SCF, Heat of formation, Total energy, Molecular dimensions を説明せよ。
- 問5 Cs はどのような対称要素を持つ点群か。
- 問6 (1) 双極子モーメントはいくらか (単位を補え)。
(2) 分子の中で、どのような電荷の偏りがこれをもたらしたのかを調べるには、出力のどのデータを見たらよいか (抜粋には含まれていないがフルテキストの中には含まれる)。
- 問7 右図から、この物質の反応性についてどのようなことが予想されるか。



(参考書：計算化学ガイドブック、大沢ら訳、丸善；分子軌道法 MOPAC ガイドブック、平野ら著、海文堂)

----- trimethylsilyl vinyl ether の 計算結果の抜粋 -----

PM3 CALCULATION

MOPAC 97.00
2003/ 5/21

```
FINAL HEAT OF FORMATION =      -97.24836 KCAL =    -406.88713 KJ
VAN DER WAALS AREA      =          78.62 SQUARE ANGSTROMS
TOTAL ENERGY           =      XXXX.XXXX EV
ELECTRONIC ENERGY     =    -1077.16969 EV  POINT GROUP:      Cs
CORE-CORE REPULSION    =    -68.65497 EV
DIELECTRIC ENERGY     =    -0.26767 EV
IONIZATION POTENTIAL   =          X.XXXXX
NO. OF FILLED LEVELS   =          XX
MOLECULAR WEIGHT       =    116.235
```

MOLECULAR DIMENSIONS (Angstroms)

Atom	Atom	Distance
H 11	H 9	7.08861
H 15	H 19	4.91349
H 18	H 10	3.97198

SCF CALCULATIONS = 11
COMPUTATION TIME = 9.000 SECONDS

EIGENVALUES

-37.83382	-30.18651	-30.07086	-28.06896	-28.00916	-20.56828	-18.18266	-16.06866
-14.73553	-14.24422	-13.89931	-13.77412	-13.57378	-13.12308	-13.07508	-12.94867
-12.52749	-11.45079	-10.58411	-10.53298	-9.34988	0.76383	0.95443	1.23157
1.43243	1.67350	3.46186	4.21466	4.45361	4.63476	4.74771	4.75212
4.77084	4.78092	4.79587	4.82402	4.82589	4.84129	5.71352	6.20215

EIGENVECTORS (略)

DIPOLE	X	Y	Z	TOTAL
POINT-CHG.	-3.542	0.510	-0.001	3.579
HYBRID	0.128	0.241	0.001	0.273
SUM	-3.414	0.751	-0.001	3.496

----- trimethylsilyl vinyl ether の 計算結果の抜粋ここまで -----

【2】(この課題【2】は、この前期授業終了(9月いっぱい)を期限とする。成績評価に対して重視する) MOPAC (ないしはそれに準ずる半経験的分子軌道計算プログラム)を走らせてみよう。

テーマは各自の自由とする。ヒントとして、例えば教科書(主として有機化学)の中の、反応、構造、物性などの記載について、これを計算によりサポートする(あるいは反論する)、というものはいかがだろうか。また、いくつかの分子について検討し比較して論じるというのはわかりやすい実験戦略である、ということも付け加えておこう。

以下の5点でレポートを評価する：

- (1)((問題設定能力)) 計算機実験のテーマを自分で考えること。しかし、あまりに平易な内容のものは好ましくない(平易すぎるテーマの例：ベンゼンは正六角形だった、など)。
- (2)((研究計画能力)) そのテーマに解答を与えるには、どのような対象分子の選択が最適かを考えること。
- (3)((実験遂行能力)) 計算機実験の再現性のために何を報告すべきかを理解した上で、計算機実験を実施する。レポートには必要かつ最小限のデータを記すこと。
- (4)((解答発見能力)) 結果を示すだけでなく、結果に考察を加えること。設定した問題に対して答えを与えられたかどうか。
- (5)((報告の能力)) 日本語が正しく書かれていること。レポート(報告書)としての体裁を保ち、文章が、論理性、客観性、一貫性の点で読みごたえがあること。出力図を貼っただけでは全然だめである。

研究ではなく、勉強のための drill だから、内容の新規性、先端性は問わない。しかし、ふだん自分の研究室で取り扱っている化合物には愛着があるだろうから、それを利用することはまったく構わない。プログラムは、研究室に備わっているものがあれば、それを使えばよるしい。もし手に入らない場合には、近隣の研究室を訪ねるか、石田まで申し出られれば、こちらのパソコンを快くお貸しする。