

生命環境化学専門実験Ⅰ

実験 3D「計算化学の基礎」 当日課題用ワークシート

班番号	氏 名	教員チェック
学籍番号		

※ 実験時または実験完了後、テキストの当日課題に従ってこのワークシートに結果・考察等を記入し、必ず教員・指導員(TAは不可)のチェックを受けること。不備や未完成などの場合は終了としない。また班の全員がチェックを受け完了となるまで実験は終了しない。
終了後は、このシート(右上にチェック済の印かサインを受ける)、およびレポート表紙を受け取り、後片づけ用チェックリストに従って器具等を整理し、実験を終了して下さい。またこのシートはレポート提出のときに一緒に提出すること。

課題1 指定した4つの各化合物の「化合物名(和名)」を、それぞれ答えよ。

【左から順に】

_____	_____
_____	_____

課題2 3つの各化合物における以下の各パラメータを、Gamessによる計算で求めよ。

(1) 全ての原子の電荷 (MULL. CHARGE)

(2) 全ての原子間結合の結合次数 (BOND ORDER)

なお結果は、レポート用紙等に図示するか、PC上で描画するなどのわかりやすい表示形式にすること【別紙を用いてよい】。以下は一例である。計算結果をそのままプリントしただけでは実験完了ではない。まとめられた計算結果と、各原子の番号が付記された分子モデルが必須である。

課題2の続き(これは、後の課題3で用いる) 指定した4つの各化合物分子の「極性の大きさ (Debye)」を、今回の計算結果よりそれぞれ答えよ。

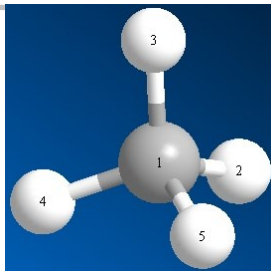
BOND ORDER AND VALENCE ANALYSIS BOND ORDER THRESHOLD=0.050

ATOM PAIR	DIST	BOND ORDER	ATOM PAIR	DIST	BOND ORDER	ATOM PAIR	DIST	BOND ORDER
1 2	1.093	0.936	1 3	1.093	0.936	1 4	1.093	0.936
1 5	1.094	0.936						

ATOM	TOTAL VALENCE	BONDED VALENCE	FREE VALENCE
1 C	3.743	3.743	0.000
2 H	0.923	0.923	0.000
3 H	0.923	0.923	0.000
4 H	0.923	0.923	0.000
5 H	0.923	0.923	0.000

ELECTROSTATIC MOMENTS

POINT	1	X	Y	Z (BOHR)	CHARGE
		0.000616	-0.000009	0.000049	0.00 (A.U.)
		DY	DZ	/D/ (DEBYE)	
		0.000012	0.000009	0.000064	0.000066



《参考》
メタン(CH₄)の例

↑

分子の極性の値は、
この値を用いる。