

学生番号： \_\_\_\_\_ 氏名： \_\_\_\_\_

① ブタジエン (butadiene) を計算する

- 入力ファイル (butadiene.gjf) をフォルダに保存した
- 構造最適化の計算を実行した
- 出力ファイル (butadiene.chk) がフォルダにあることを確認した
- ログファイル (butadiene.log) がフォルダにあることを確認した
- 分子構造の画像 (butadiene\_geom.tif) をフォルダに保存した
- 原子間距離 (???? Å) を実験ノートに記録した
- 全エネルギーの値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 電荷分布の画像 (butadiene\_charge.tif) をフォルダに保存した
- 電荷分布の値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 分子軌道 (HOMO) の図 (butadiene\_homo.tif) をフォルダに保存した
- 分子軌道 (LUMO) の図 (butadiene\_lumo.tif) をフォルダに保存した

② エチレン (ethylene) を計算する

- 入力ファイル (ethylene.gjf) をフォルダに保存した
- 構造最適化の計算を実行した
- 出力ファイル (ethylene.chk) がフォルダにあることを確認した
- ログファイル (ethylene.log) がフォルダにあることを確認した
- 分子構造の画像 (ethylene\_geom.tif) をフォルダに保存した
- 原子間距離 (???? Å) を実験ノートに記録した
- 全エネルギーの値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 電荷分布の画像 (ethylene\_charge.tif) をフォルダに保存した
- 電荷分布の値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 分子軌道 (HOMO) の図 (ethylene\_homo.tif) をフォルダに保存した
- 分子軌道 (LUMO) の図 (ethylene\_lumo.tif) をフォルダに保存した

### ③ 遷移状態 (TS) を計算する

- 構造最適化の計算を実行した
- 出力ファイル (TS.chk) がフォルダにあることを確認した
- ログファイル (TS.log) がフォルダにあることを確認した
- 分子構造の画像 (TS\_geom.tif) をフォルダに保存した
- 原子間距離 (???? Å) を実験ノートに記録した
- 全エネルギーの値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 電荷分布の画像 (TS\_charge.tif) をフォルダに保存した
- 電荷分布の値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 分子軌道 (HOMO) の図 (TS\_homo.tif) をフォルダに保存した
- 分子軌道 (LUMO) の図 (TS\_lumo.tif) をフォルダに保存した

### ④ シクロヘキセン (cyclohexene) を計算する

- 構造最適化の計算を実行した
- 出力ファイル (cyclohexene.chk) がフォルダにあることを確認した
- ログファイル (cyclohexene.log) がフォルダにあることを確認した
- 分子構造の画像 (cyclohexene\_geom.tif) をフォルダに保存した
- 原子間距離の値 (???? Å) を実験ノートに記録した
- 全エネルギーの値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 電荷分布の画像 (cyclohexene\_charge.tif) をフォルダに保存した
- 電荷分布の値 (???? a.u.) を実験ノートに記録した
- 分子軌道 (HOMO) の図 (cyclohexene\_homo.tif) をフォルダに保存した
- 分子軌道 (LUMO) の図 (cyclohexene\_lumo.tif) をフォルダに保存した

### ⑤ 反応経路 (IRC) を解析する

- 反応経路のムービーを確認した
- エネルギー変化の図 (IRC\_energy.jpg) をフォルダに保存した

### ⑥ 計算結果をまとめる

- 活性化エネルギーの値 (???? kcal/mol) を実験ノートに記録した
- 反応エンタルピーの値 (???? kcal/mol) を実験ノートに記録した