

今回の到達目標

- 分子の立体構造を解析する・予測する考え方を簡単に説明することができる
 - ▶ VSEPR則 とは？
 - ▶ 混成軌道 とは？
 - ▶ 計算化学 とは？
- VSEPR則 と 混成軌道 に基づいて、分子の立体的な構造を論理的に説明 したり、大まかに予測 することができる

分子の **構造** を予測する

演習：分子をつくろう

演習：分子をつくろう

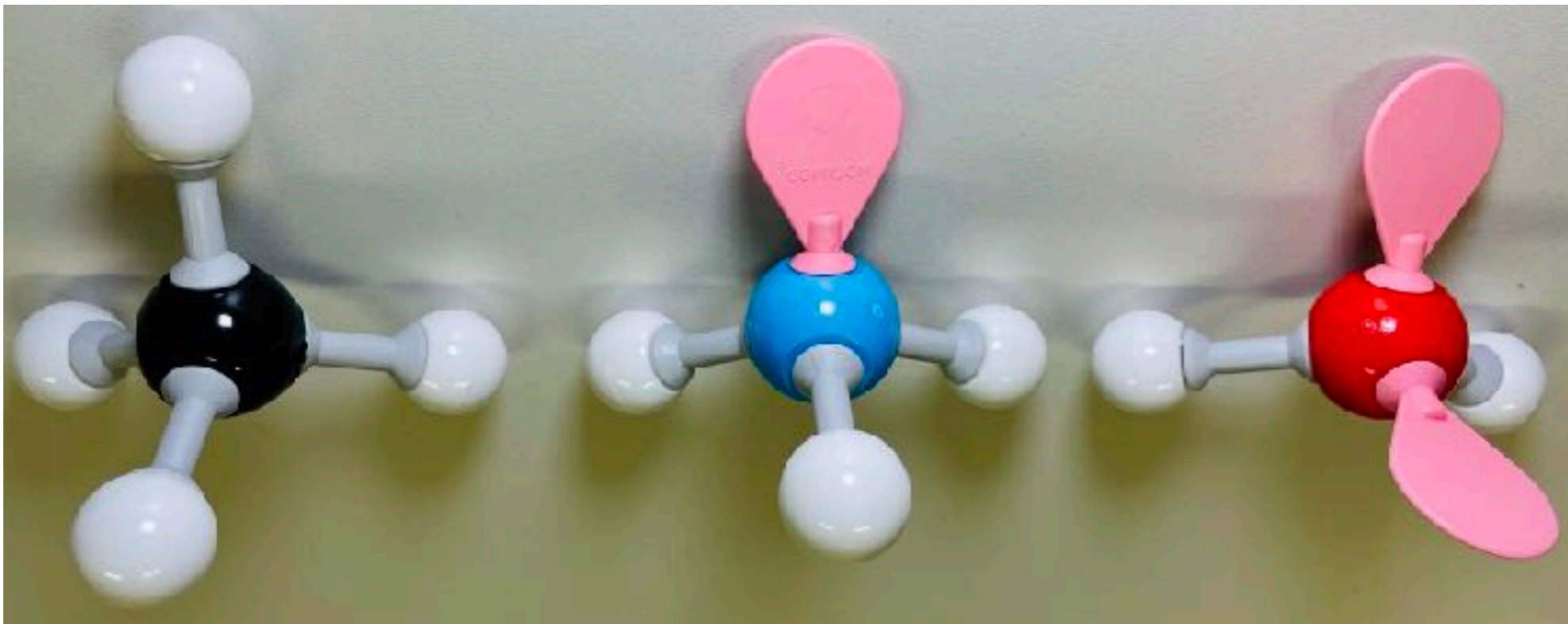
- 分子模型セットには、次の原子が入っています

- ▶ 水素（白）：10 個
- ▶ 炭素（黒）：2 個
- ▶ 窒素（青）：1 個
- ▶ 酸素（赤）：2 個
- ▶ 単結合（短）：10 本
- ▶ 多重結合（長）：5 本
- ▶ 不対電子対（ピンク）：5 枚
- ▶ リムーバー：1 個



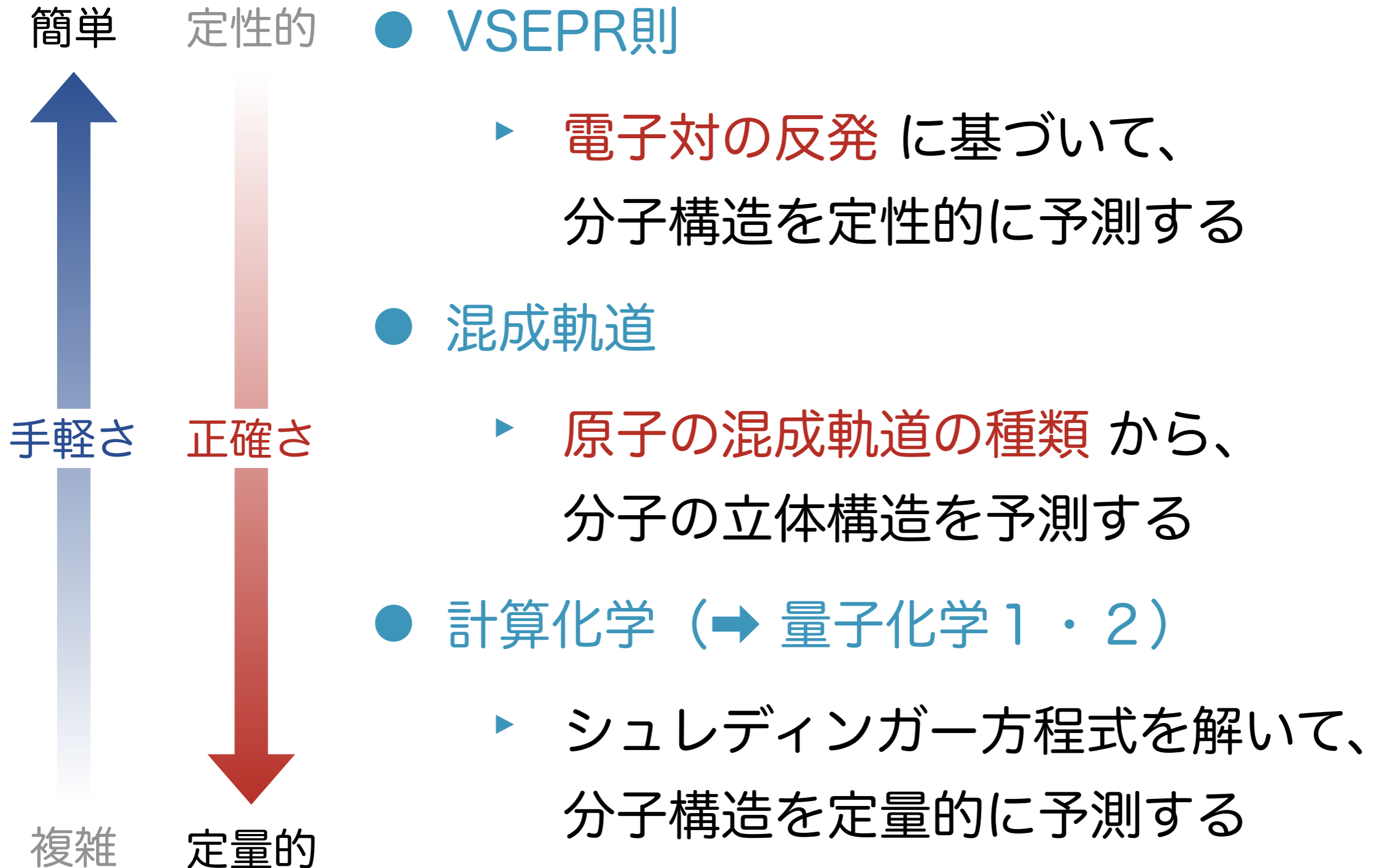
演習：分子をつくろう

- 下記の分子について、分子模型を組み立てる
 - ▶ メタン： CH_4
 - ▶ アンモニア： NH_3
 - ▶ 水： H_2O

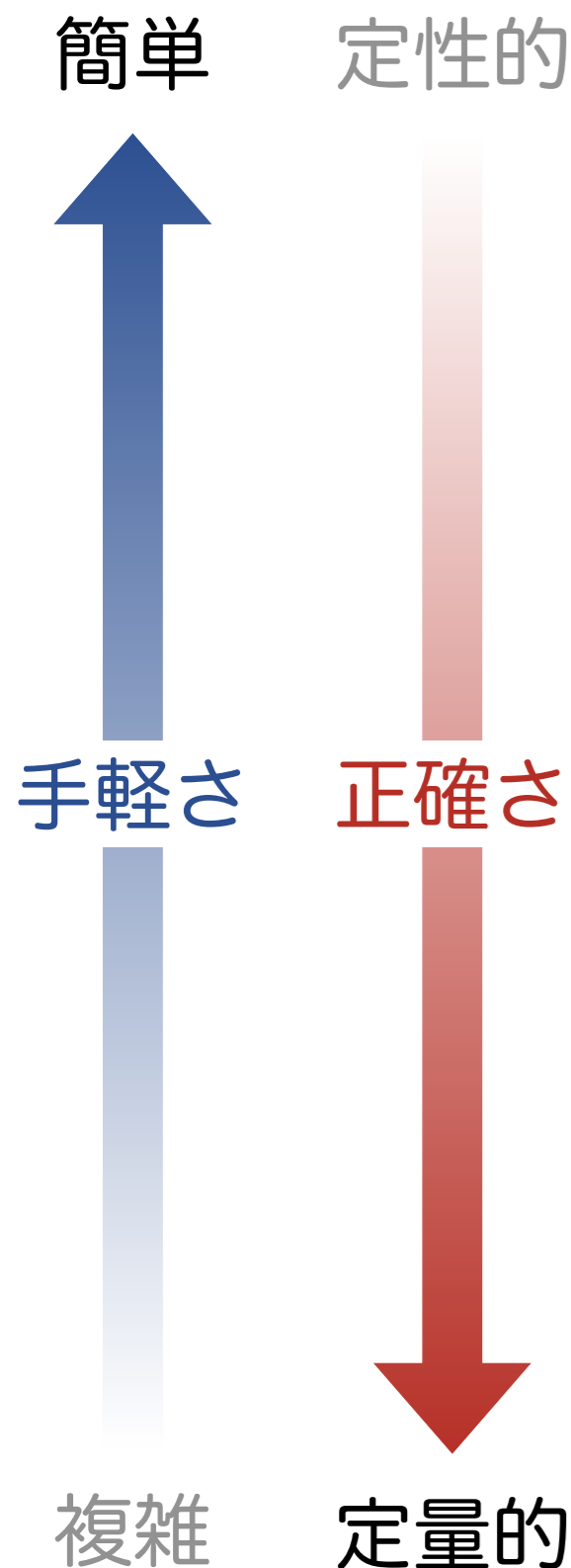


VSEPR則とは？

分子の構造を予測する様々な方法



分子の構造を予測する様々な方法



● VSEPR則

- ▶ 電子対の反発に基づいて、分子構造を定性的に予測する

● 混成軌道

- ▶ 原子の混成軌道の種類から、分子の立体構造を予測する

● 計算化学 (→ 量子化学1・2)

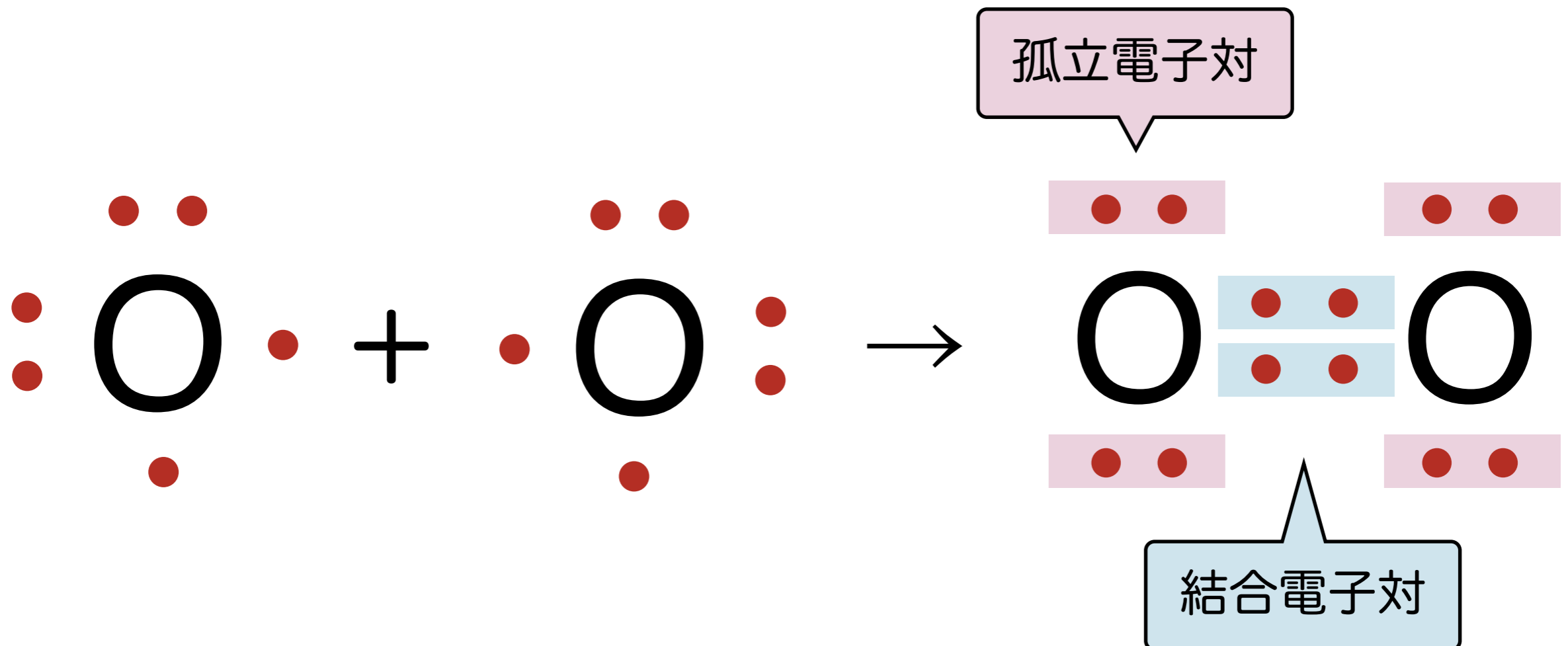
- ▶ シュレディンガー方程式を解いて、分子構造を定量的に予測する

Q) 電子対 とは？

A) 結合電子対：化学結合に「関与する」電子対

→ 単結合 (:), 二重結合 (::), 三重結合 (:::)

孤立電子対：化学結合に「関与しない」電子対



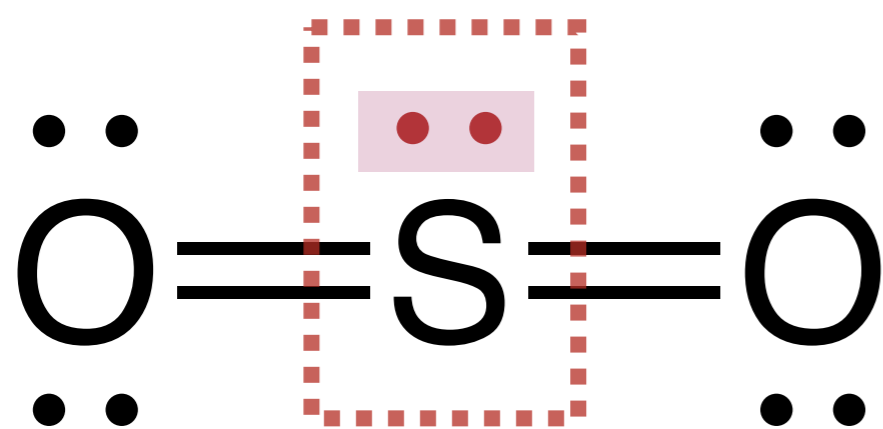
Q) VSEPR則とは？

A) 電子対が「互いに反発する」傾向を考慮して、分子の立体構造をロジカルに予測・説明する方法

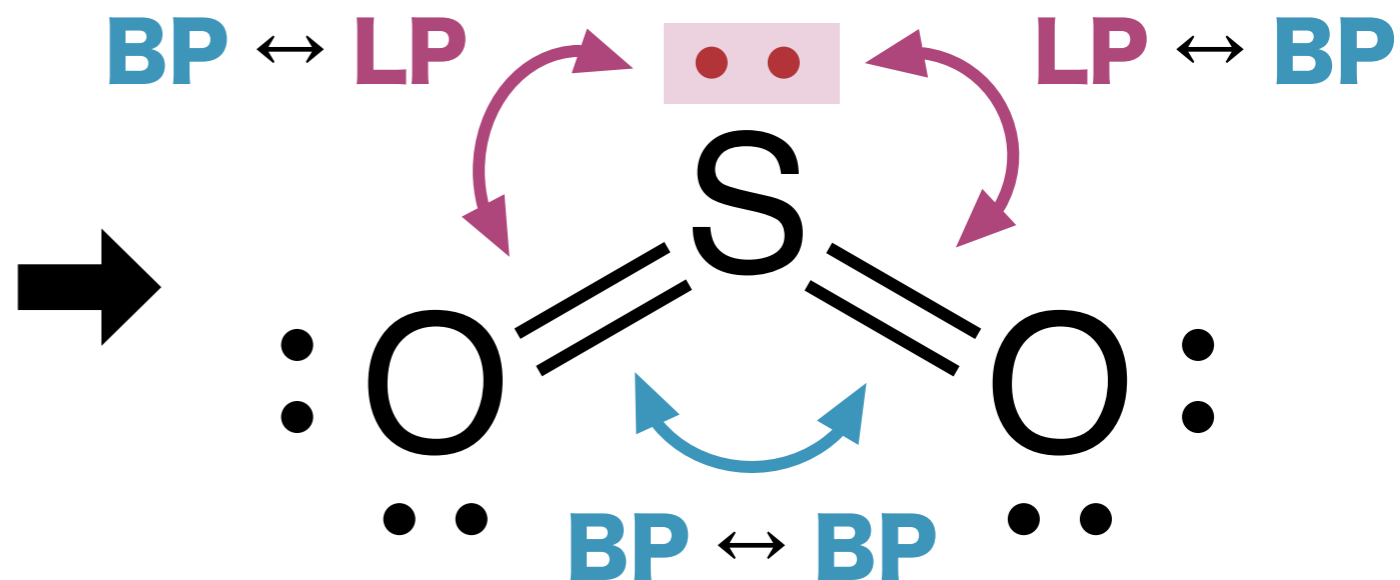
Lone Pair

Bond Pair

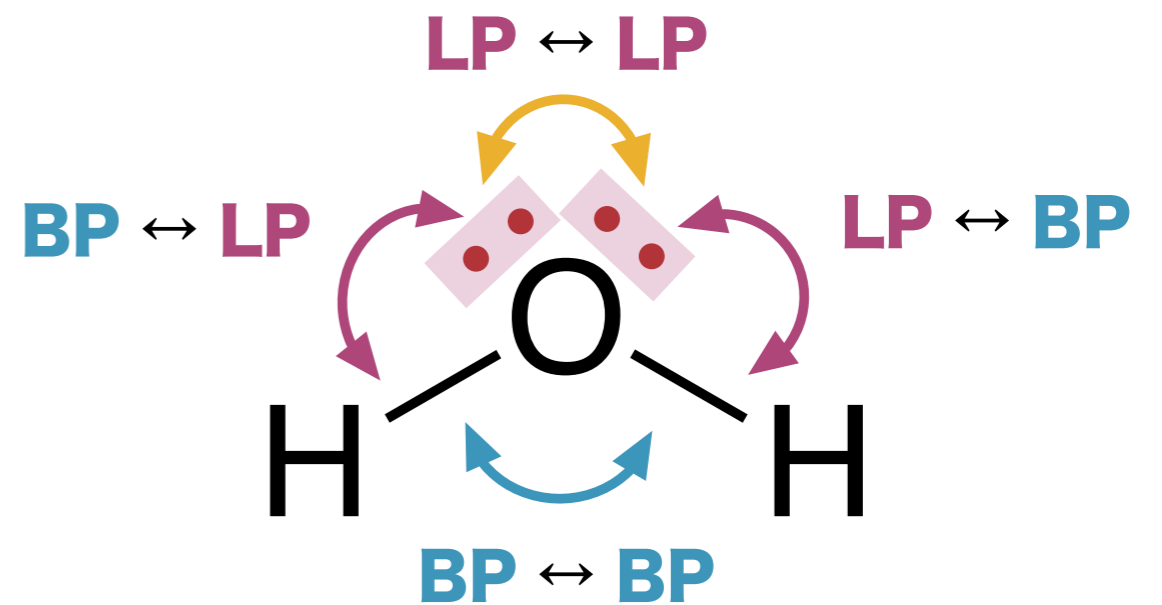
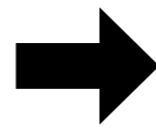
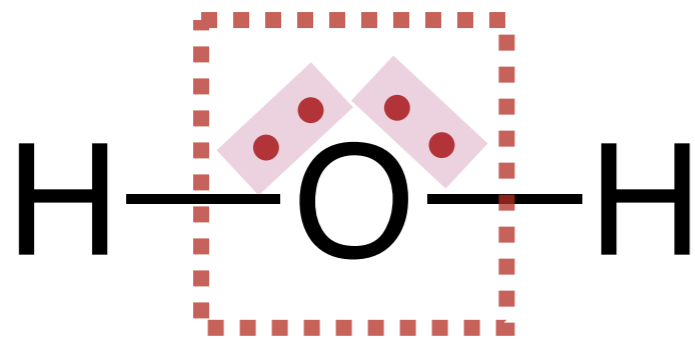
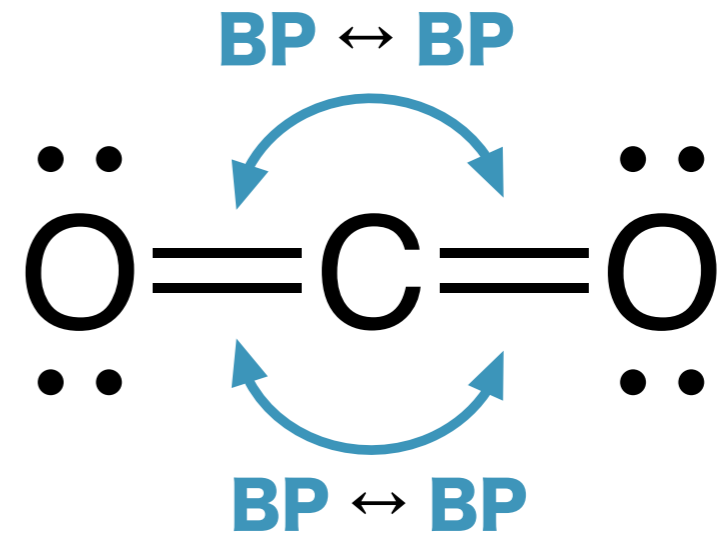
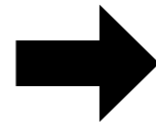
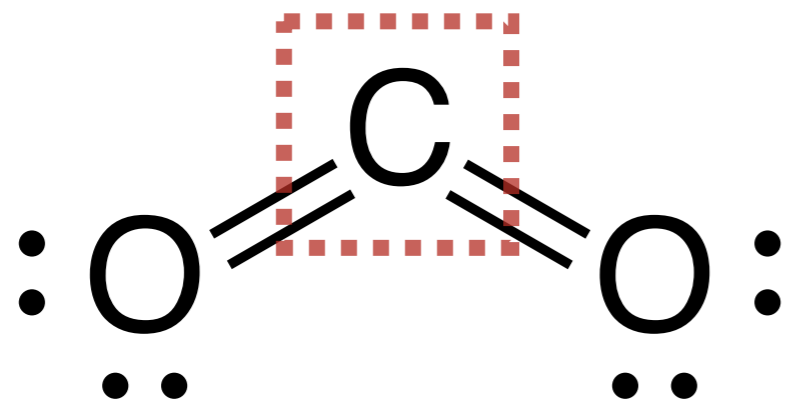
孤立電子対 (LP) と 結合電子対 (BP) の反発の強さ



中心の原子に注目する



Q) 3原子分子の立体構造は？



小テスト：VSEPR則について

小テストについて

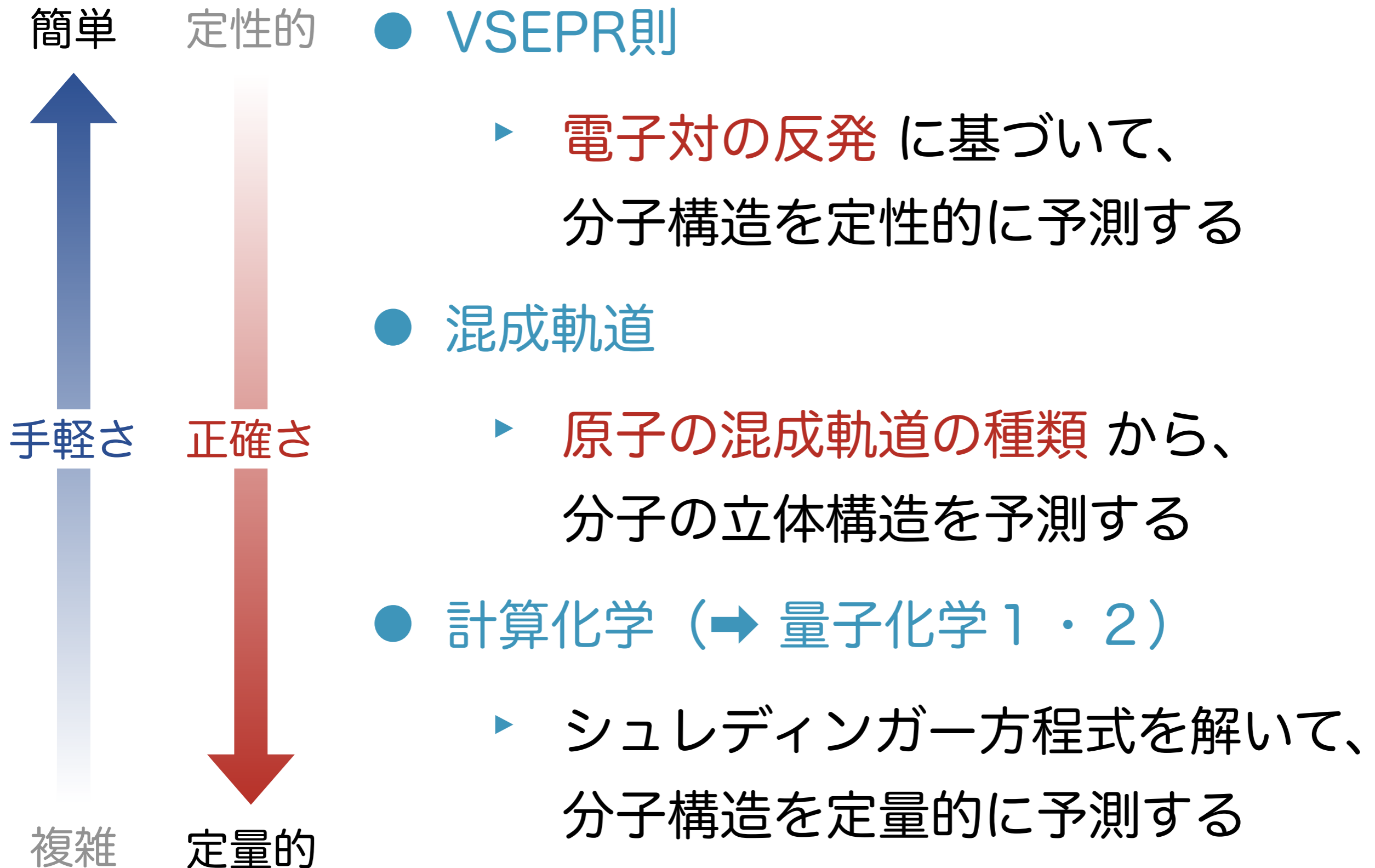
- 授業中に manaba で 小テスト を実施します
- 小テストを受講するときに、
下記の資料を参考にすることができます
 - ▶ 実験テキスト
 - ▶ 自分の 実験ノート
 - ▶ 授業中に作った 分子模型
- 他の人の回答を見たり、他の人の実験ノートや
予習レポートを見たりすることはできません

小テスト：5分

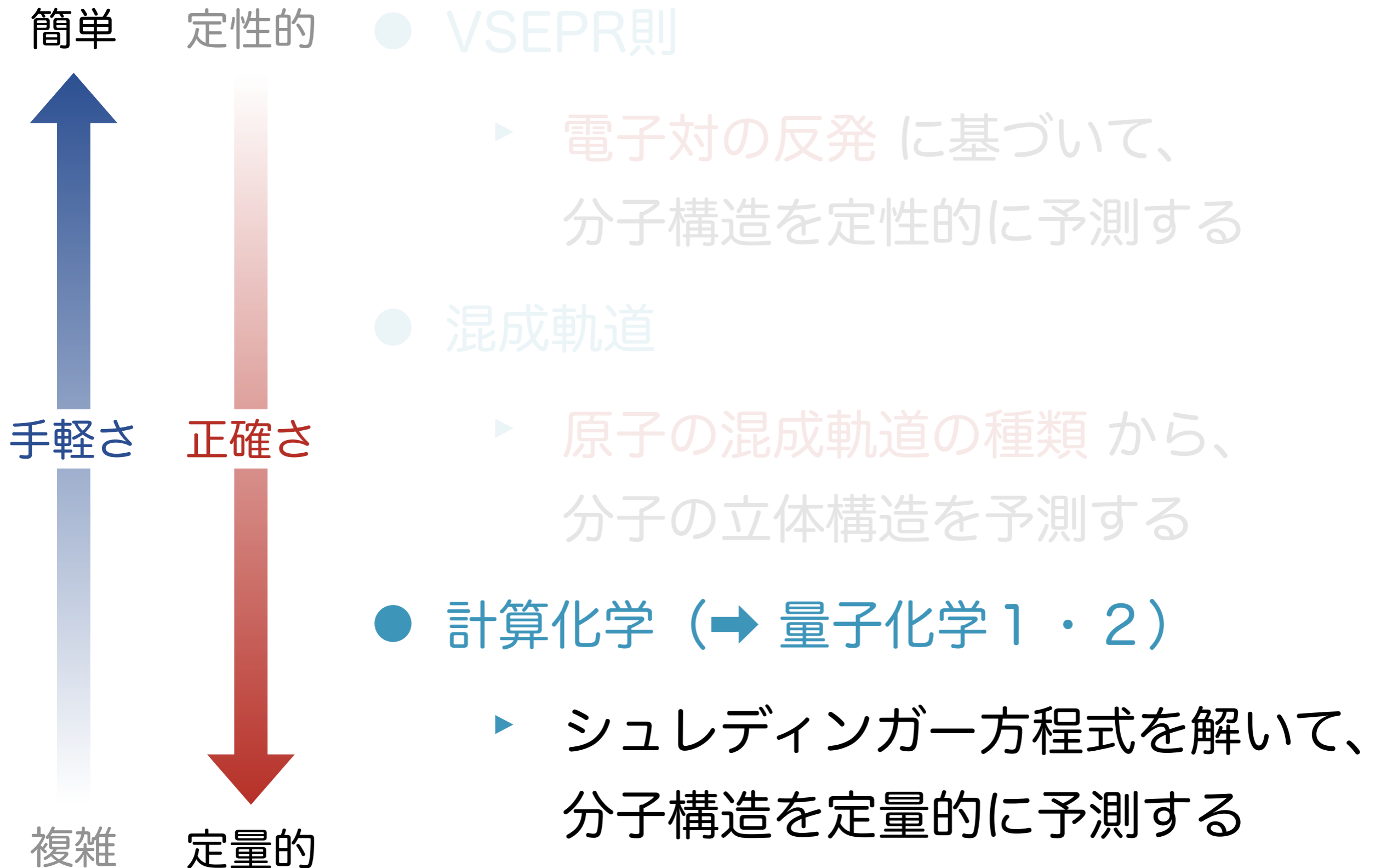
休憩時間：5 分

計算化学 とは？

分子の構造を予測する様々な方法

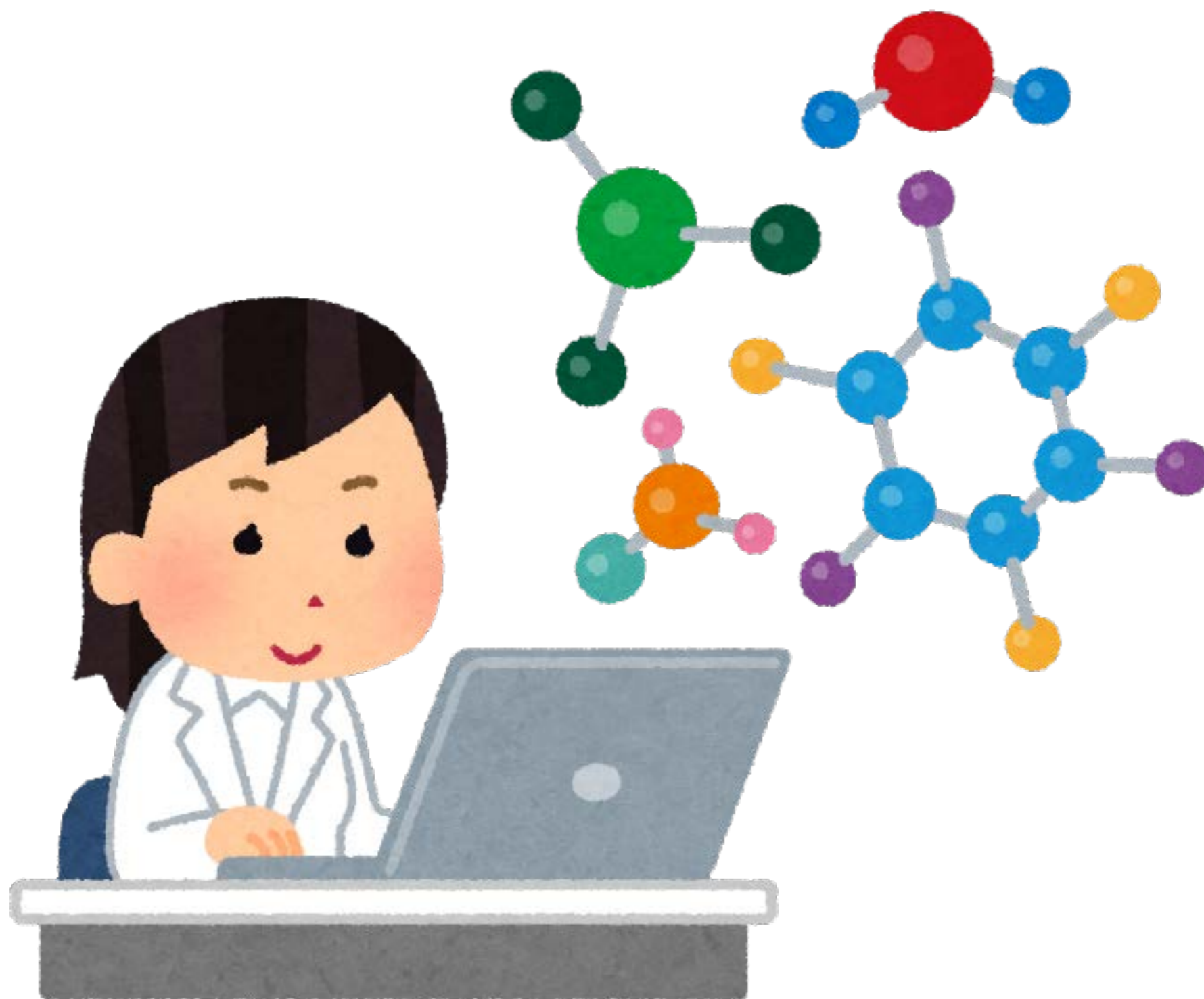


分子の構造を予測する様々な方法



Q) 計算化学とは？

A) コンピュータを用いて化学の問題解決を行う方法





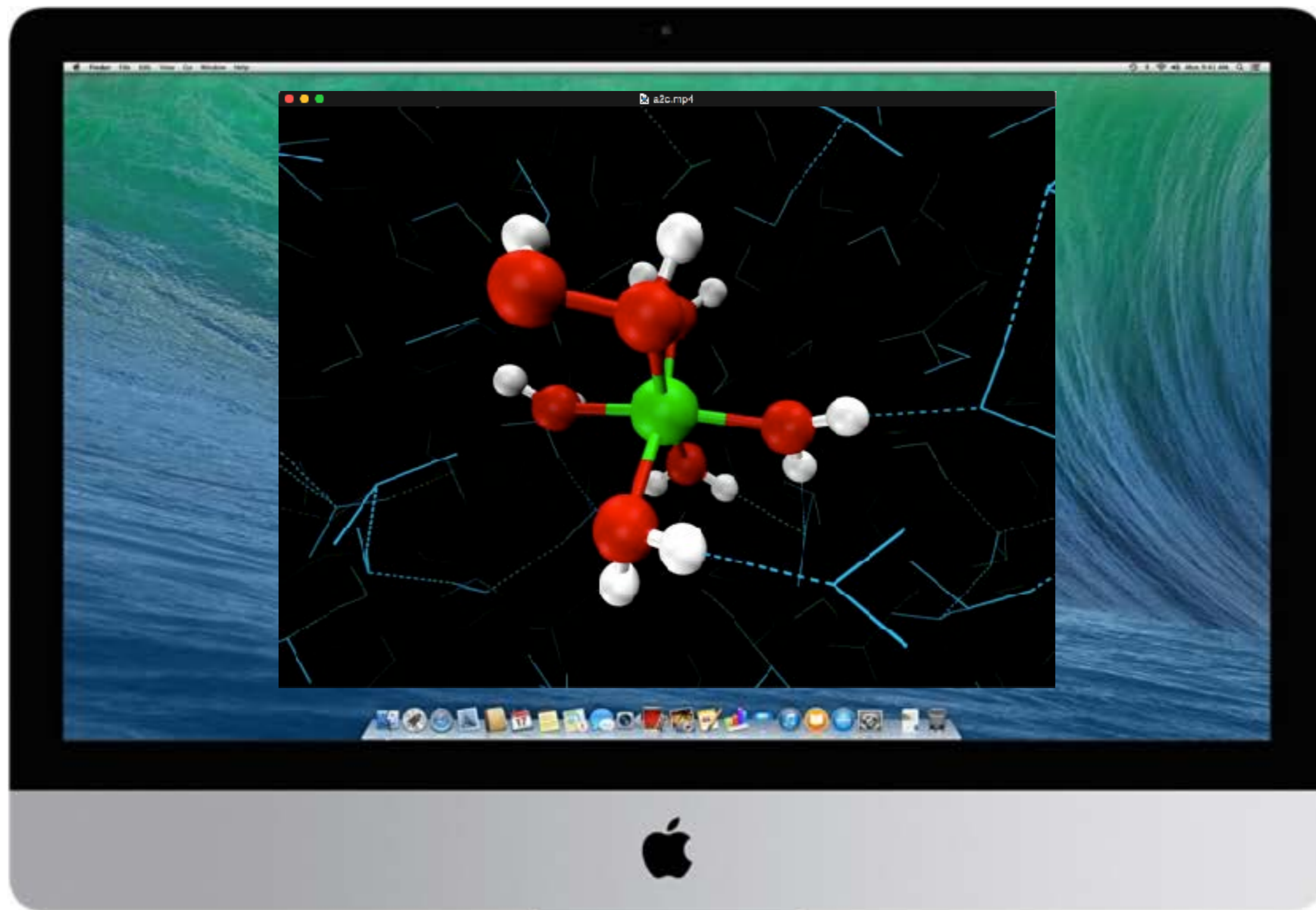
計算化学 (=コンピュータ+化学) を活用すると？

→ 分子の世界を見る ことができます



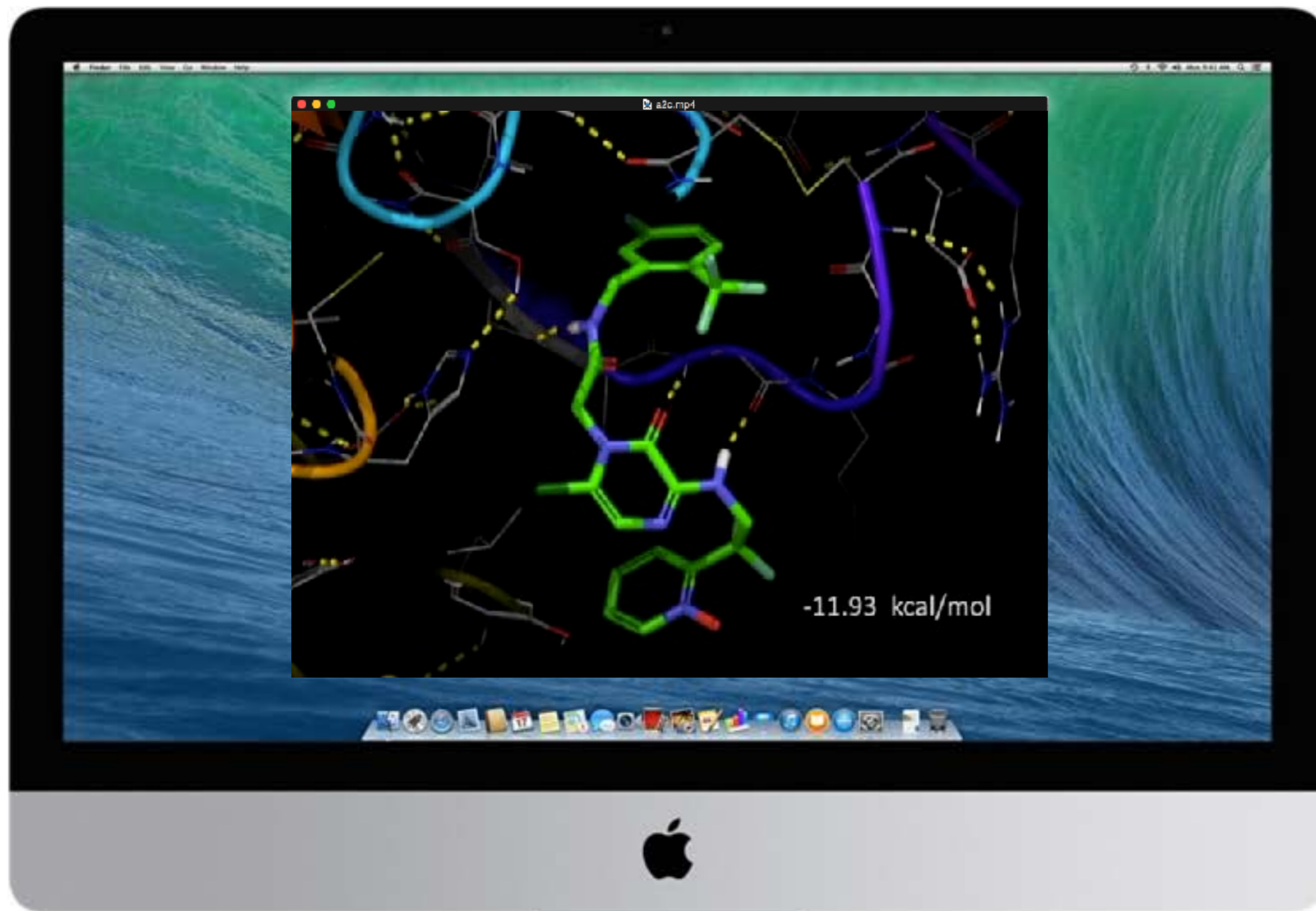
計算化学 (=コンピュータ+化学) を活用すると？

→ 化学反応を見る ことができます



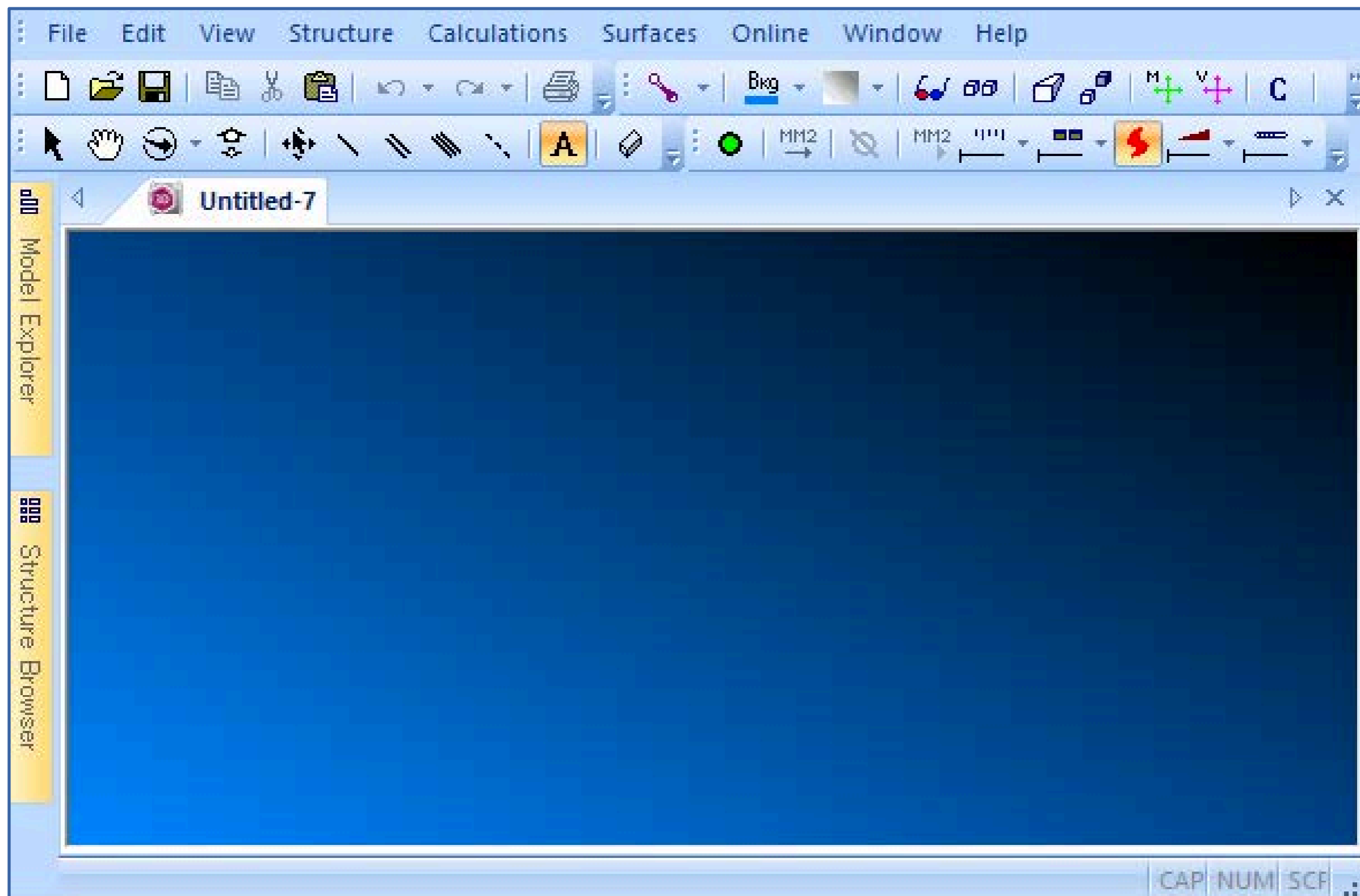
計算化学 (=コンピュータ+化学) を活用すると？

➔ 新しい薬をデザインする ことができます

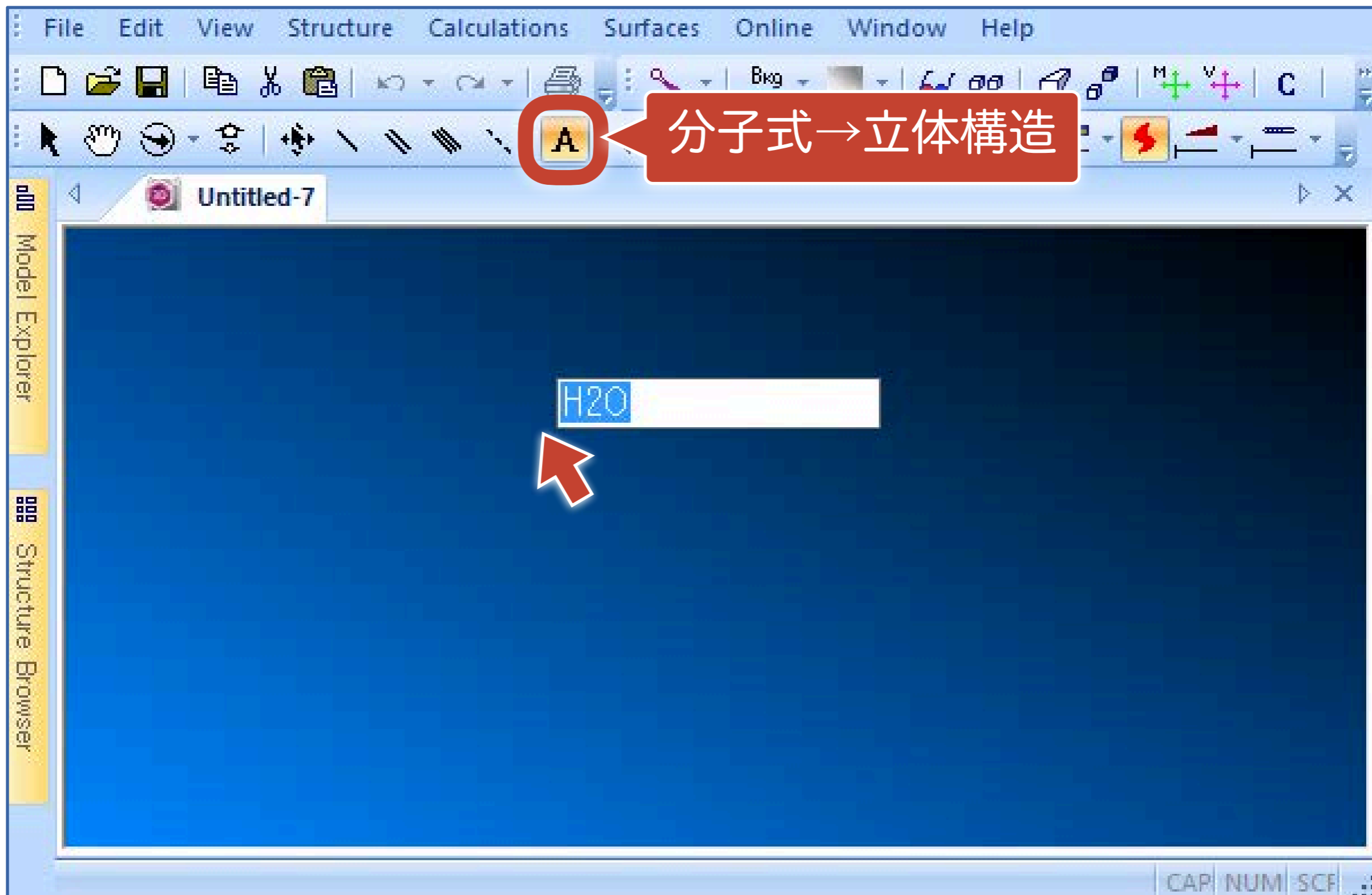


演習：計算化学 を 実行する

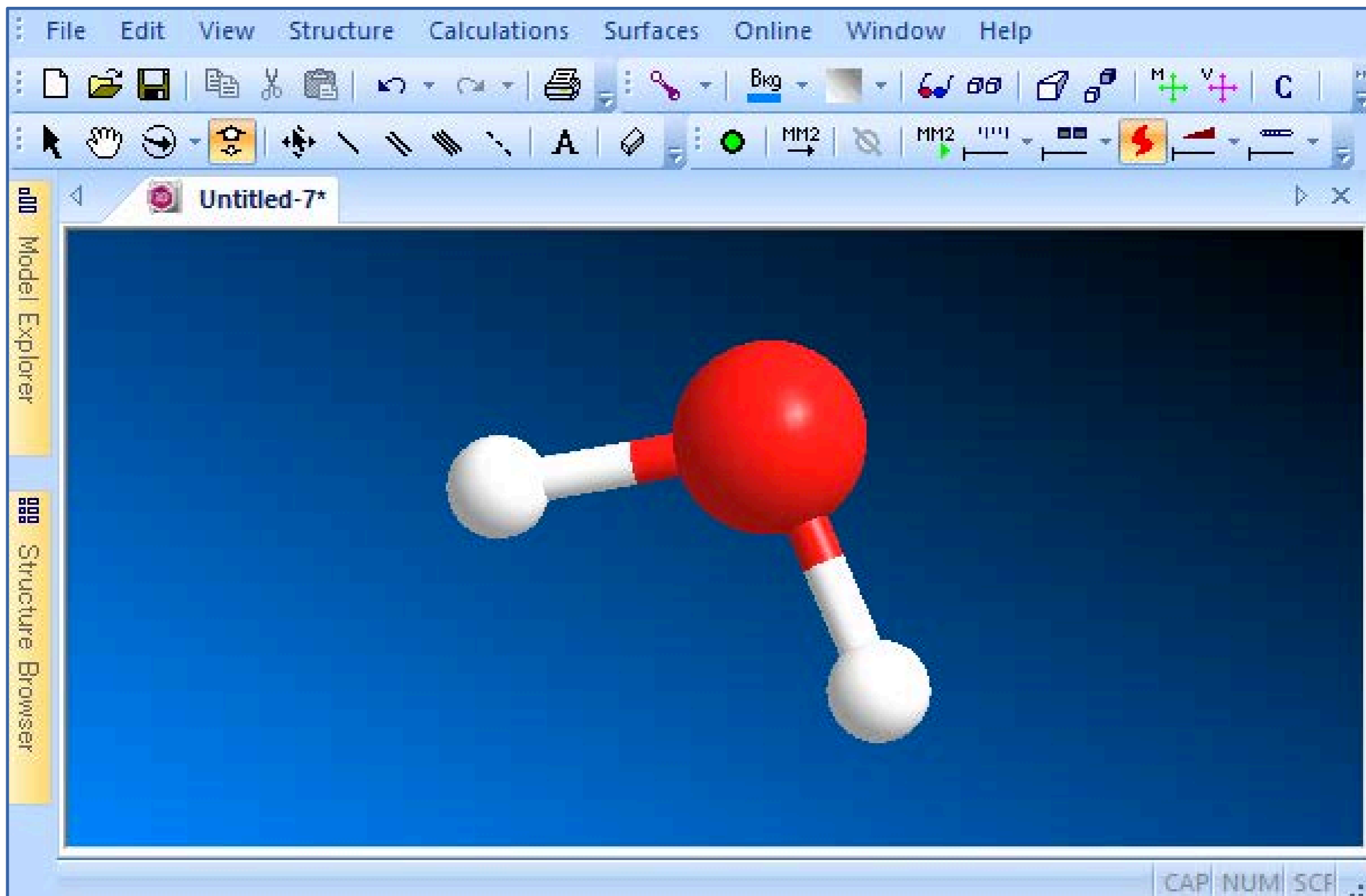
Chem3D (ChemOffice) を起動する



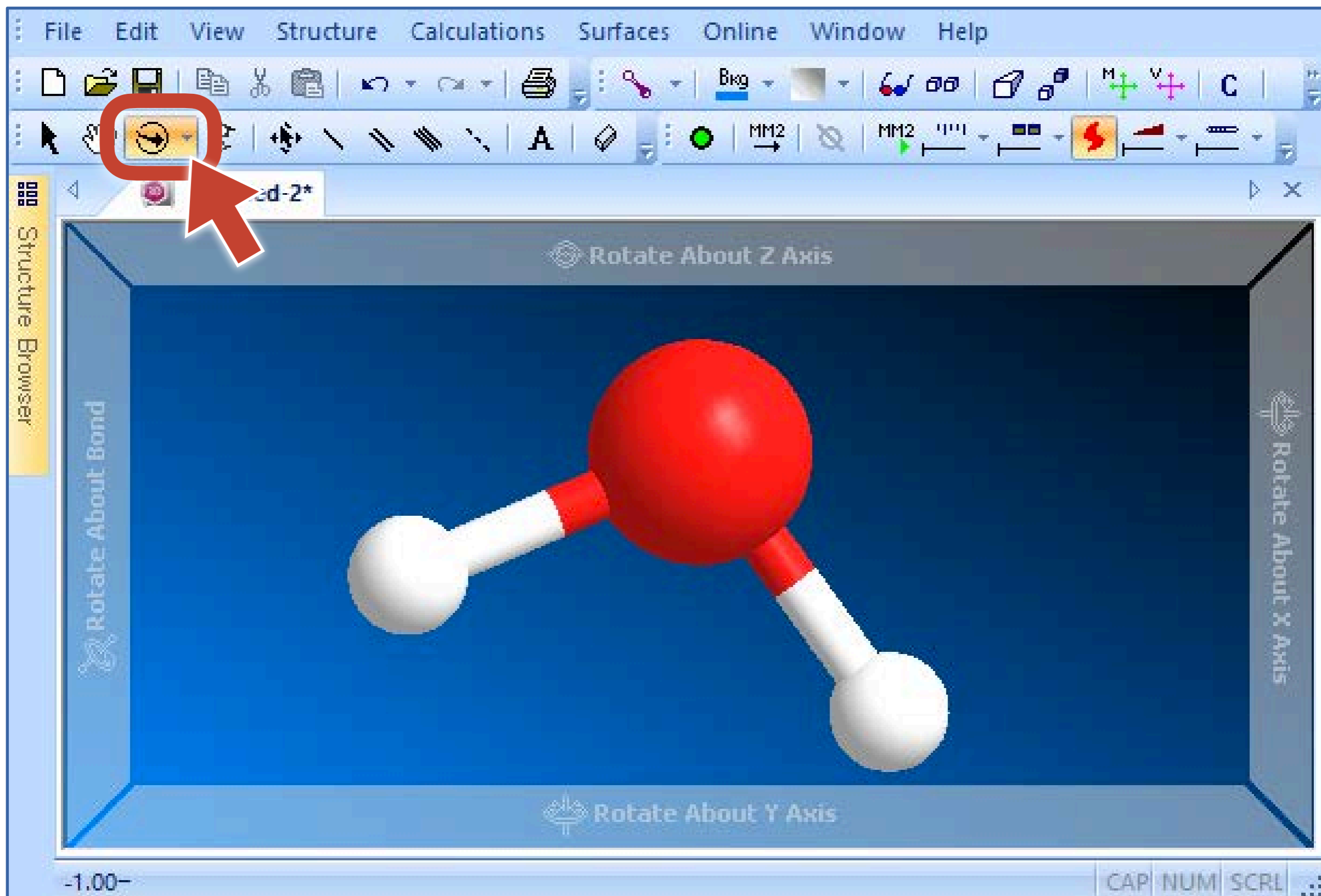
分子式 を入力する



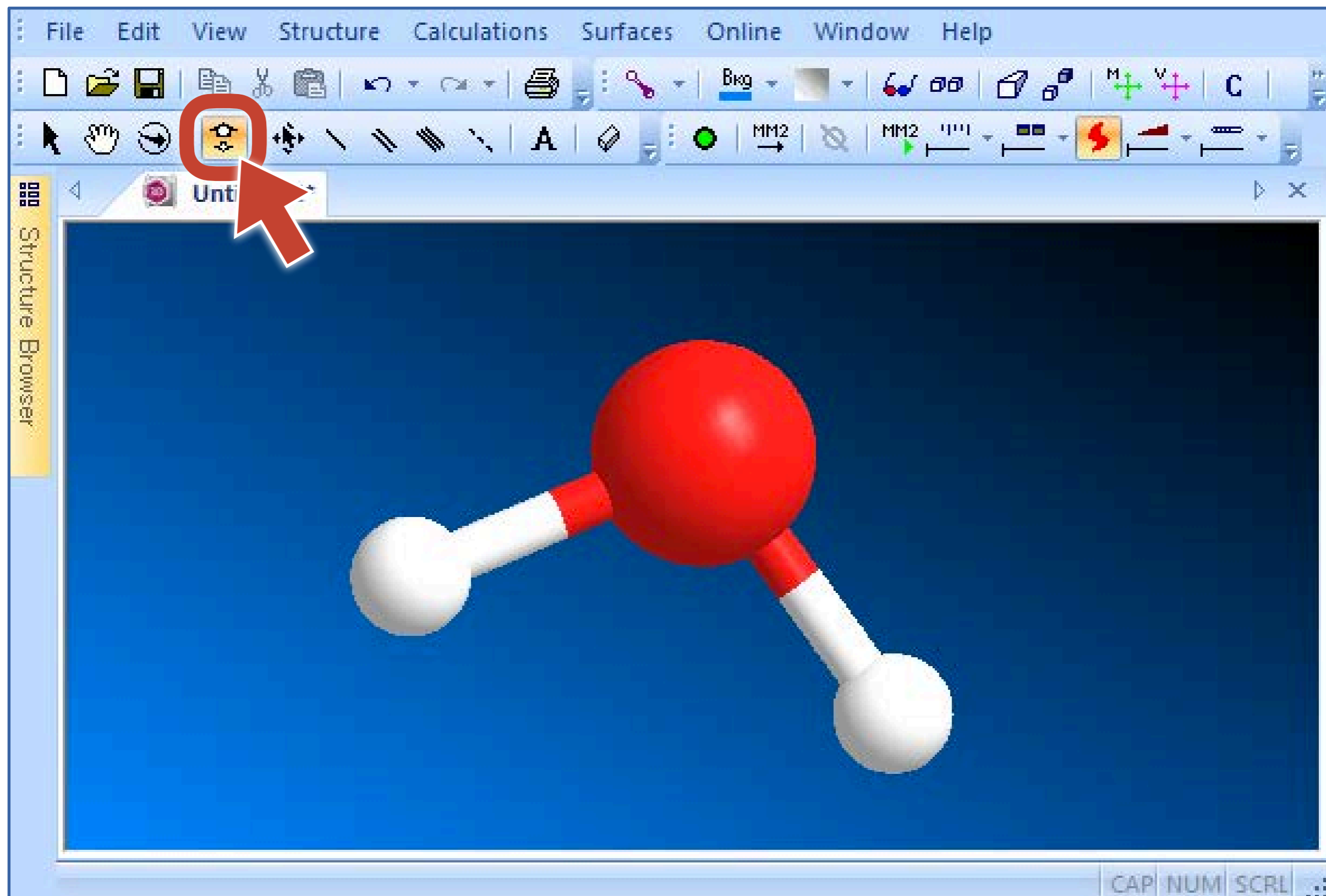
分子式 → 立体構造



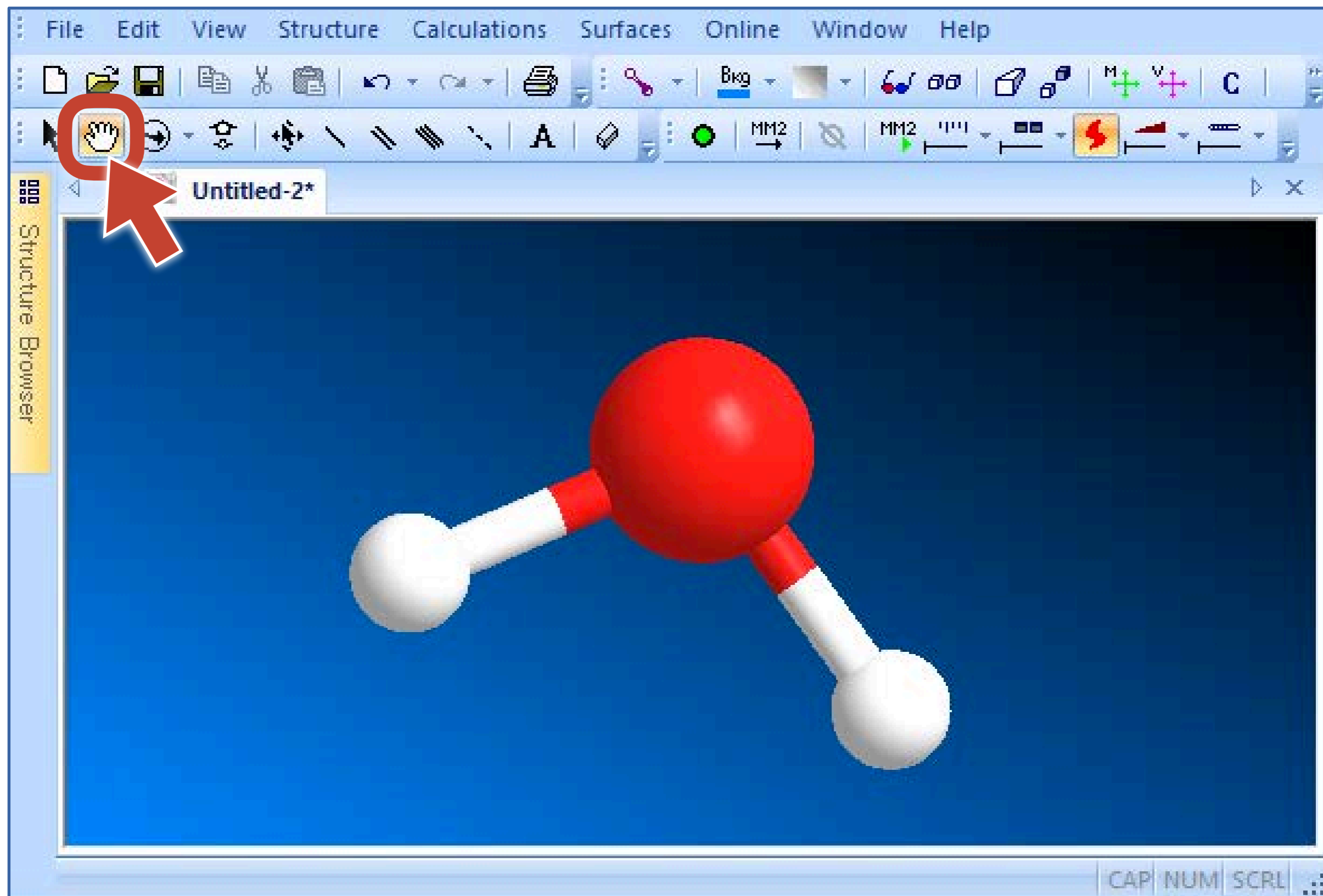
分子を 回転 させる



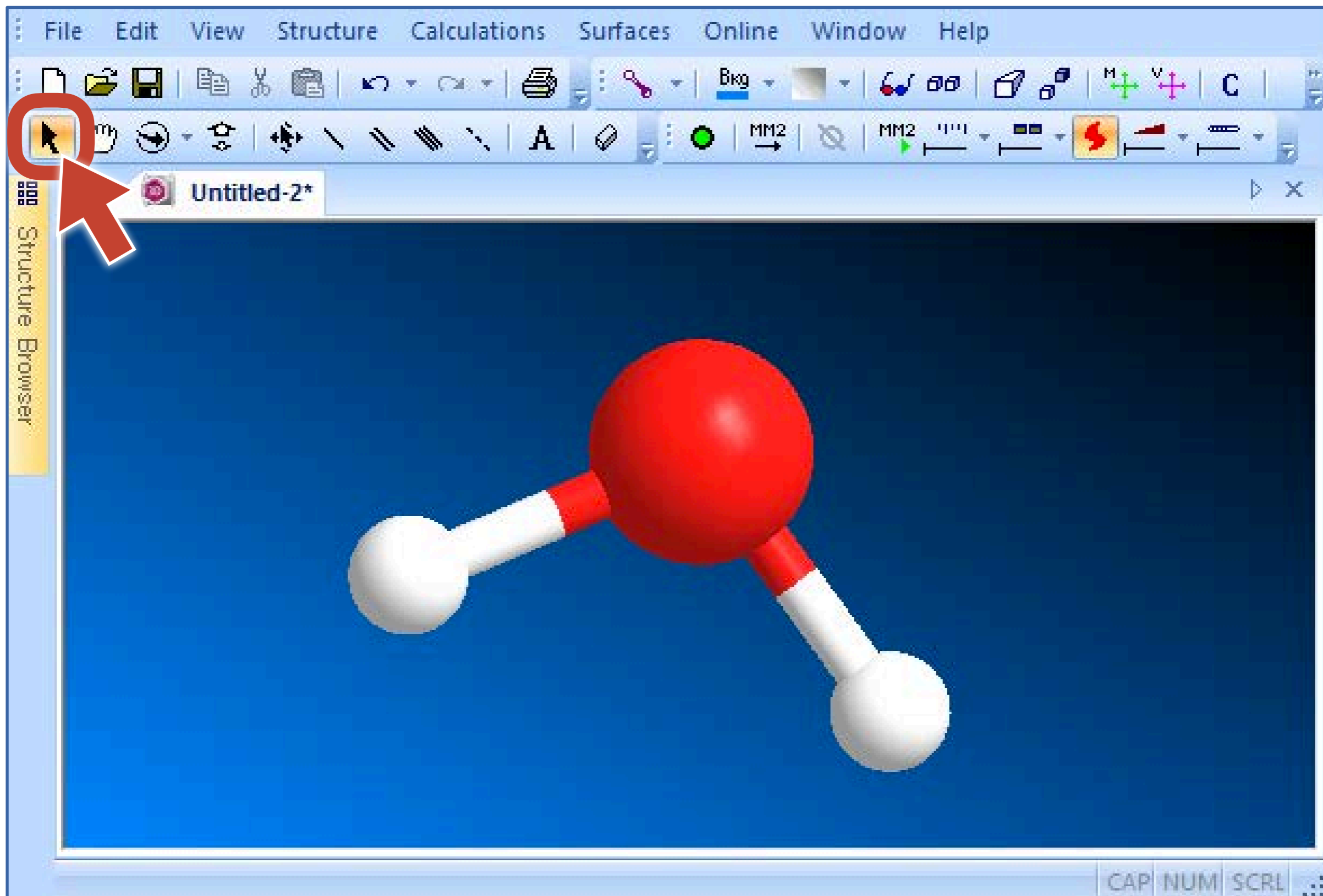
分子の 表示サイズ を変える



分子を 平行移動 させる



分子（の一部）を 選択 する

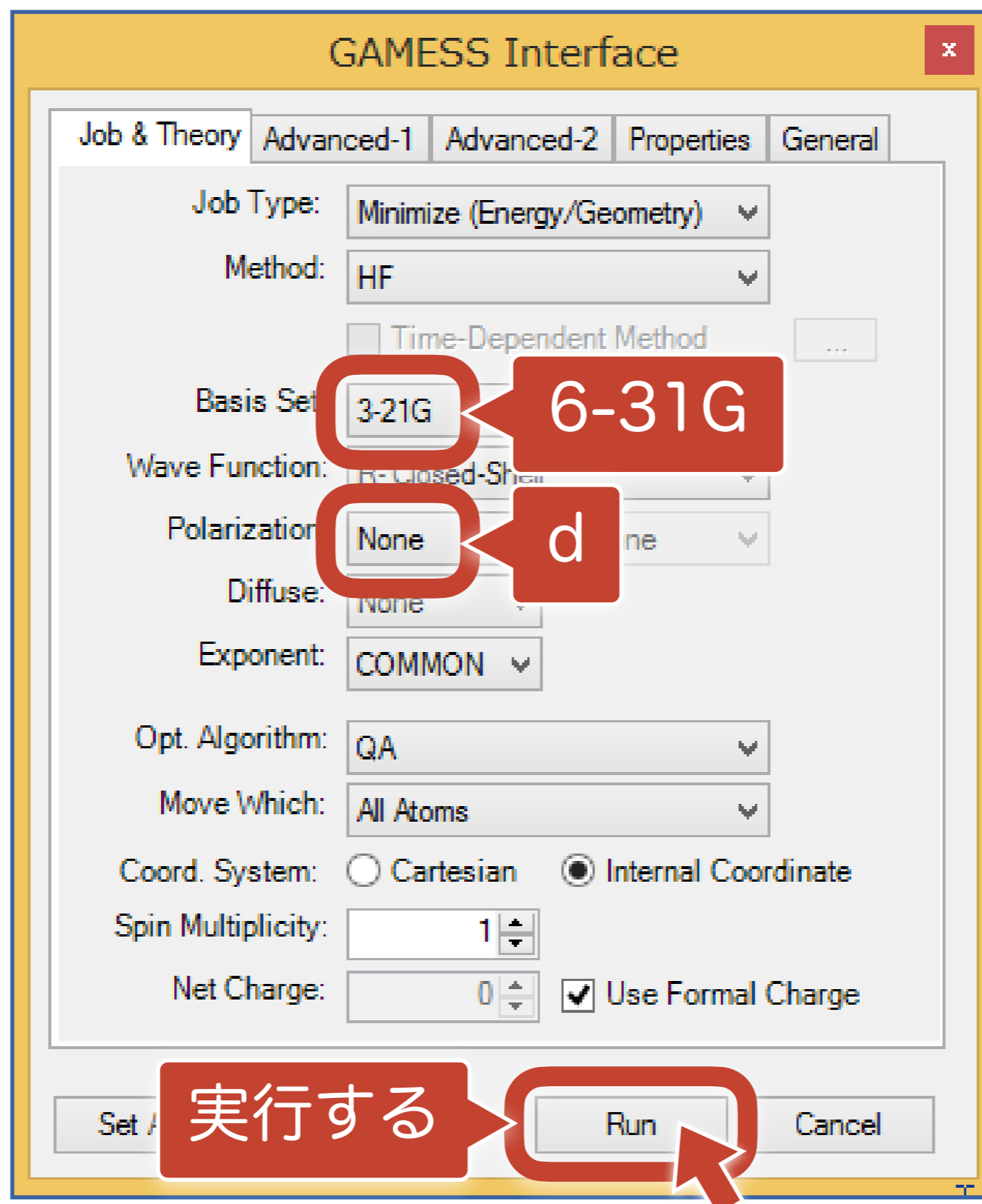


最も安定な立体構造を予測する

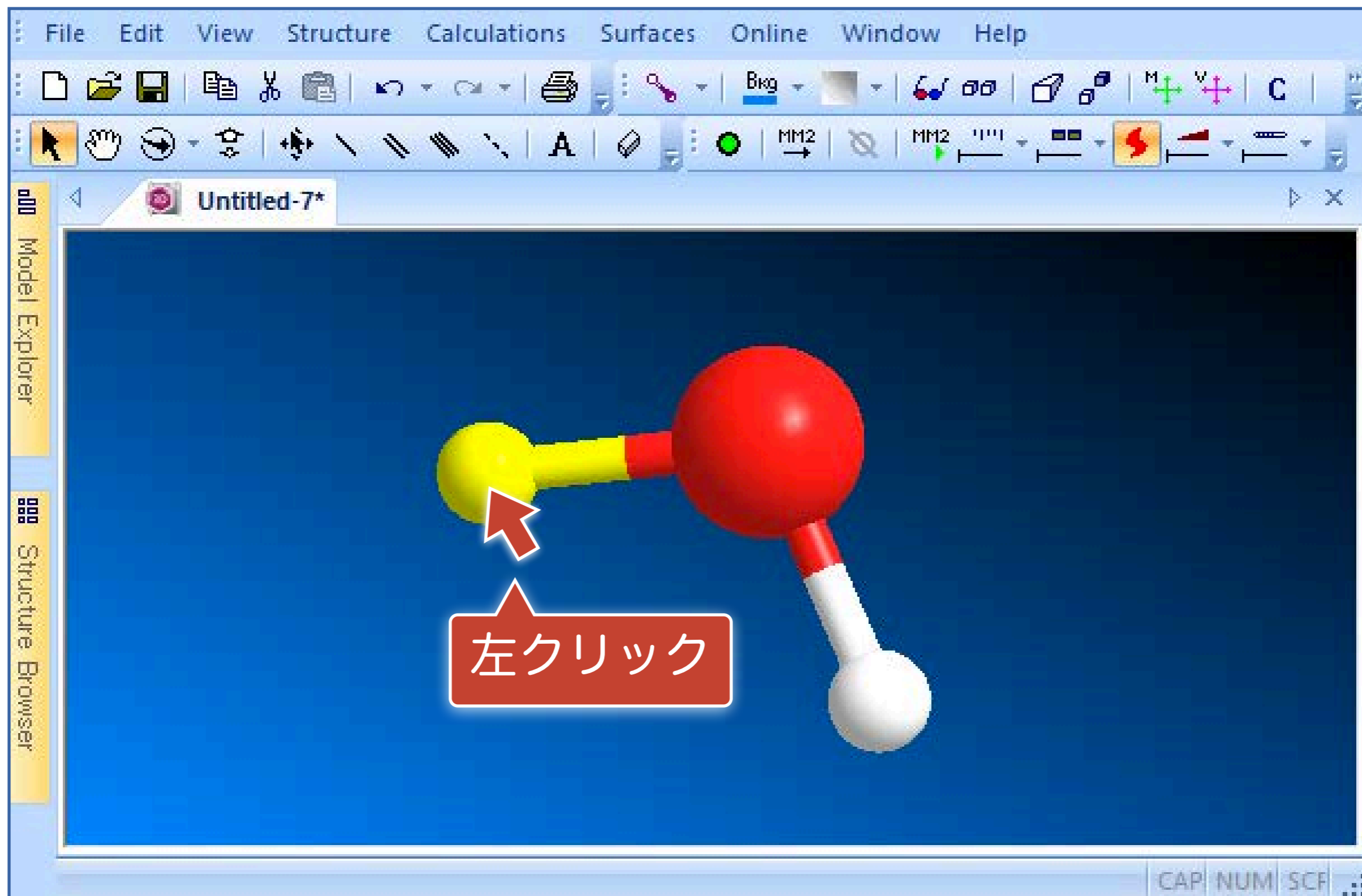
The screenshot shows the Chem3D software interface. The 'Calculations' menu is open, and the 'Gaussian Interface' option is highlighted. A red callout box labeled 'Gaussian' points to this option. The 'Minimize (Energy/Geometry)' option is also highlighted, with a red callout box labeled 'エネルギー最小化' (Energy Minimization) pointing to it. The background shows a 3D molecular model of water with a bond length of 1.0 Å.

	Atoms	Actual
1	H(3)-O(1)	0.967
2	H(2)-O(1)-H(3)	107.734

最も安定な立体構造を予測する



結合長 を調べる



結合長 を調べる

The screenshot shows a software window titled "Untitled-7*" with a menu bar (File, Edit, View, Structure, Calculations, Surfaces, Online, Window, Help) and a toolbar. The main view displays a ball-and-stick model of a molecule with yellow and white spheres. A red arrow points to a bond in the model, and a red callout box contains the text "Shift キー + 左クリック". The left sidebar shows "Model Explorer" and "Structure Browser". The bottom status bar displays "CAP NUM SCF".

Shift キー + 左クリック

結合長を調べる

結合長を表示する

The screenshot shows a software interface with a menu open. The menu is titled 'Measurements' and contains the following items:

- Model Position
- Reflect Model
- Set Internal Coordinates
- Detect Stereochemistry
- Invert
- Deviation From Plane
- Add Centroid
- Rectify
- Clean Up
- Bond Proximate
- Lone Pairs
- Overlay
- Align

The 'Measurements' menu is open, and the 'Display Distance Measurement' option is highlighted with a red circle. A red callout box points to this option with the text '結合長を表示する'. The background shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a yellow and white bond.

At the bottom of the window, there is a status bar with the text: 'Add selected distance (composed of two atoms) to measurement table'. On the right side of the status bar, there are labels: 'CAP', 'NUM', 'SCF'.

結合長 を調べる

The screenshot displays a molecular modeling software interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a water molecule (H₂O) with three atoms labeled 1, 2, and 3. A green dimension line is drawn between atoms 1 and 3, with a callout box indicating a bond length of 1.0 Å. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Structure, Calculations, Surfaces, Online, Window, Help), a toolbar with various icons, and a 'Measurement' panel on the left. The 'Measurement' panel contains a table with the following data:

	Atoms	Distance (Å)	Optimal (Å)
1	H(3)-O(1)	0.967	0.942

Red callout boxes with the text '結合長' (Bond Length) point to the 'Distance (Å)' column in the table and the '1.0 Å' value in the 3D model. The status bar at the bottom right shows 'CAP NUM SCF ..'.

結合角 を調べる

The screenshot shows a software interface with a menu bar (File, Edit, View, Structure, Calculations, Surfaces, Online, Window, Help) and a toolbar. A 'Measurement' window is open, displaying a table with the following data:

	Atoms	Actual	Optimal (°)
1	H(3)-O(1)	0.967	0.942

The main window shows a 3D ball-and-stick model of a water molecule (H₂O) with atoms labeled 1, 2, and 3. A green dimension line above the model indicates a distance of 1.0 Å. A red callout box with a white border and arrow points to atom 2, containing the text 'Shift キー + 左クリック'. The interface also includes a 'Model Explorer' and 'Structure Browser' on the left side.

結合角 を調べる

結合角を表示する

The screenshot shows a software interface with a menu open. The menu is titled 'Measurements' and contains several options. The option 'Display Bond Angle Measurement' is highlighted with a red oval. A red callout bubble with the text '結合角を表示する' points to this option. The background shows a 3D molecular model with yellow atoms and a blue bond. The status bar at the bottom reads 'Add selected bond angle (composed of 3 bonded atoms) to measurement table'.

Measurement	
Atoms	
1	H(3)-O(1)

File Edit View Structure Calculations Surfaces Online... Help

Measurements

- Display Distance Measurement
- Display Bond Angle Measurement**
- Display Dihedral Measurement
- Generate All Bond Lengths
- Generate All Bond Angles
- Generate All Dihedral Angles
- Generate All Close Contacts
- Clear

Model Explorer

Structure Browser

Cap Num Scf

結合角 を調べる

The screenshot displays the GAMESS software interface with the following components:

- Measurement Table:**

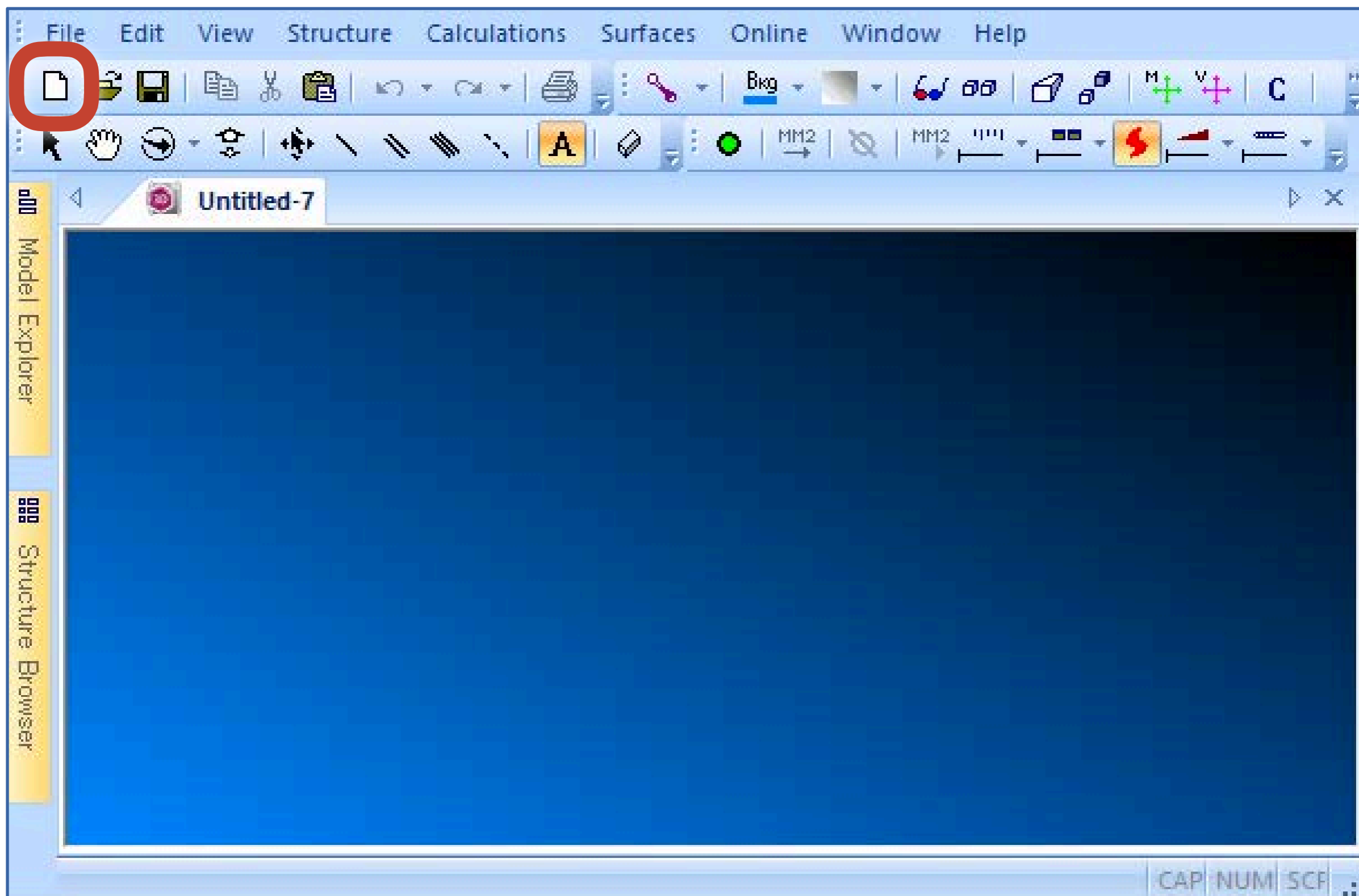
	Atoms	Actual	Optimal (°)
1	H(3)-O(1)	0.942	
2	H(2)-O(1)-H(3)	107.729	103.700
- 3D Model:** A ball-and-stick model of a water molecule with atoms labeled 1 (red), 2 (white), and 3 (white). A green arc indicates the bond angle between atoms 1, 2, and 3, which is labeled as 107.7°.
- Output Window:**

```
GAMESS Job: M... (geometry) RHF/3-21G
Finish @ energy = -47430.86647 Kcal/Mol (-75.58596 Hartrees)
```

Two red callout boxes with the text "結合角" (Bond Angle) point to the "Actual" value in the table and the angle in the 3D model.

The status bar at the bottom indicates: "The calculation started by the GAMESS Interface has ended".

新しいページ (タブ) を開く



演習：分子の 構造 を予測する

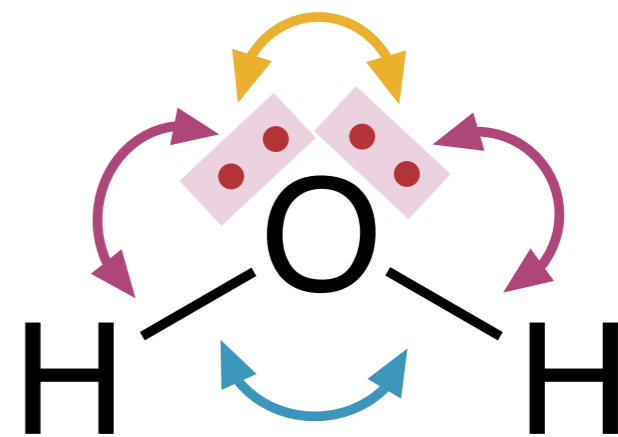
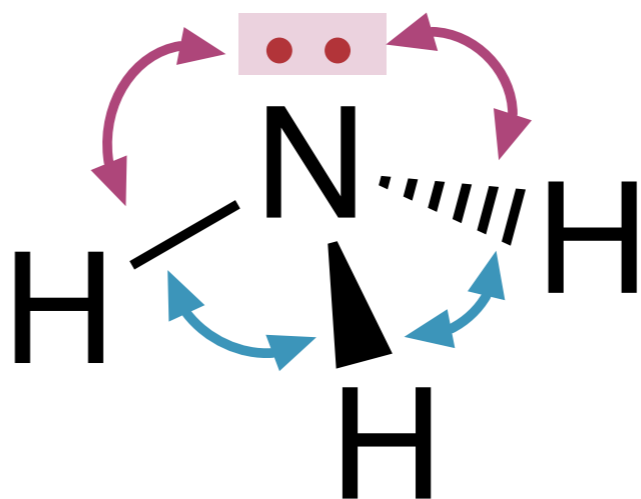
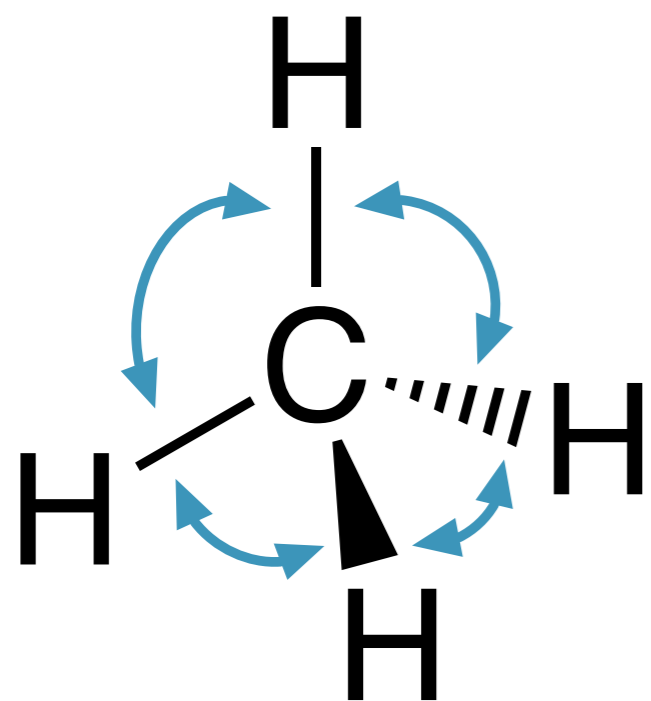
演習レポートについて

- 授業中に完成させて、最終版を提出します
 - ▶ 実験ノートに下書きをすることをお勧めします
- 教員やTAのサポートやアドバイスを受けながら取り組むことができます
- 他の受講生と相談することもできます
 - ▶ お互いに助け合う（ピア・サポート）の態度をプラスに評価します
- ただし、他の人のレポートを書き写すだけということはありません（※教員・TAが注意します）

課題 1

メタン (CH_4)、アンモニア (NH_3)、水 (H_2O) の 3 種類について、Chem3D を用いて立体構造を調べて、**結合角の値** を記入せよ。

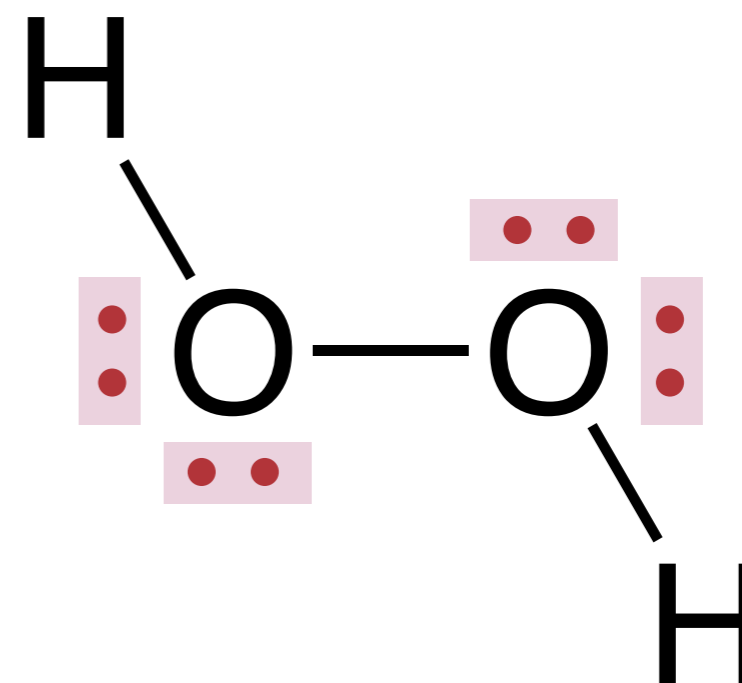
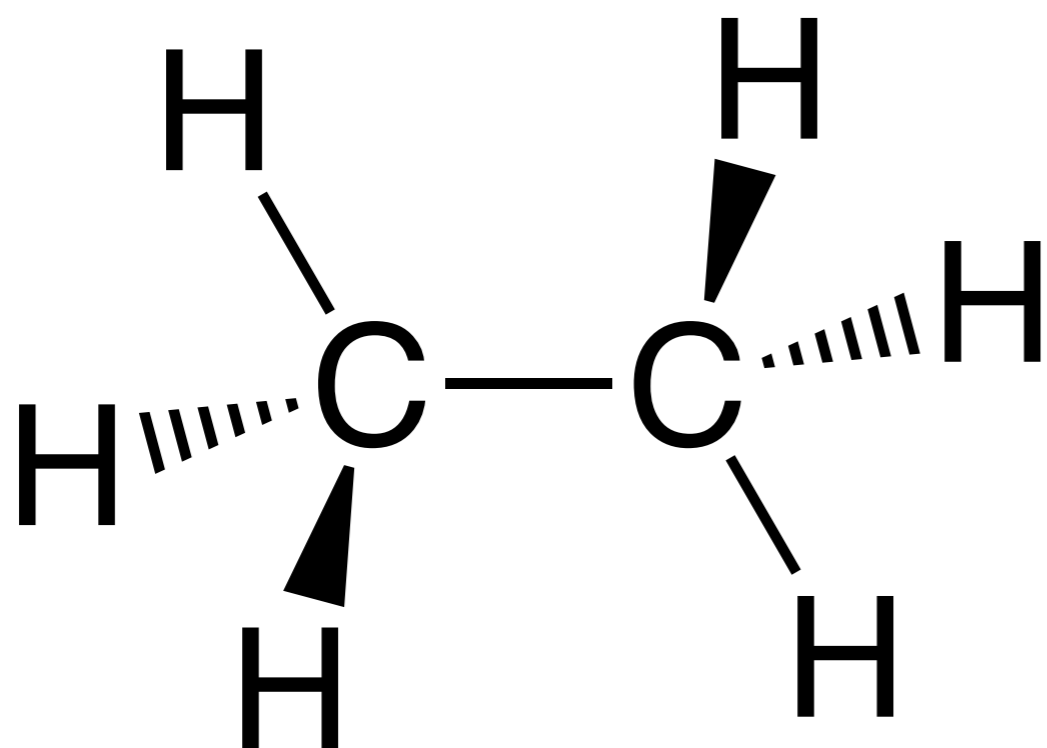
考察：**VSEPR 則** に基づいて、3 種類の立体構造の **結合角の違い** を「論理的」に説明せよ。



課題 2

エタン (C_2H_6) と 過酸化水素 (H_2O_2) の
2種類について、Chem3D を用いて立体構造を調べて、
結合角の値 を記入せよ。

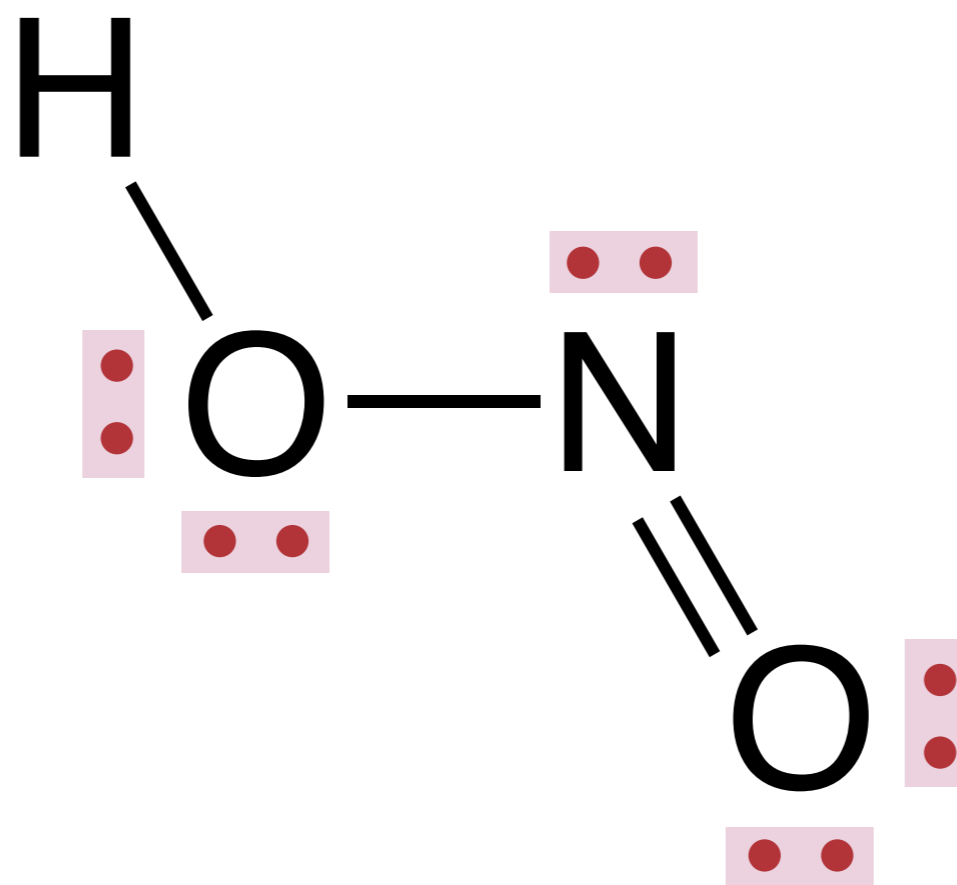
考察：**VSEPR 則** に基づいて、2種類の立体構造の
結合角の違い を「論理的」に説明せよ。



課題 3

亜硝酸 (HNO_2) について、Chem3D を用いて立体構造を調べて、結合角 H-O-N と O-N-O の値を記入せよ。

考察：VSEPR 則に基づいて、亜硝酸の立体構造の2つの結合角の違いを「論理的」に説明せよ。



休憩時間：5 分

混成軌道 とは？ (→ 松澤先生)