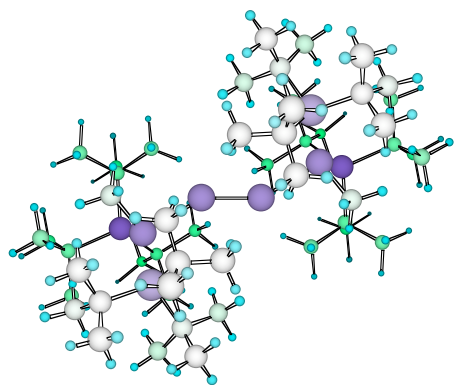
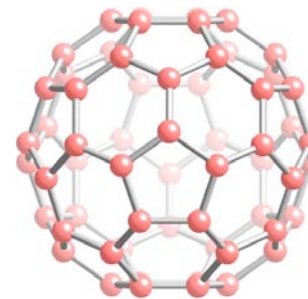


体験研究紹介

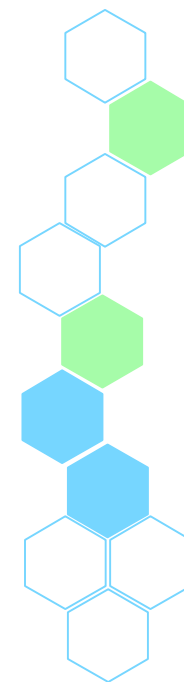
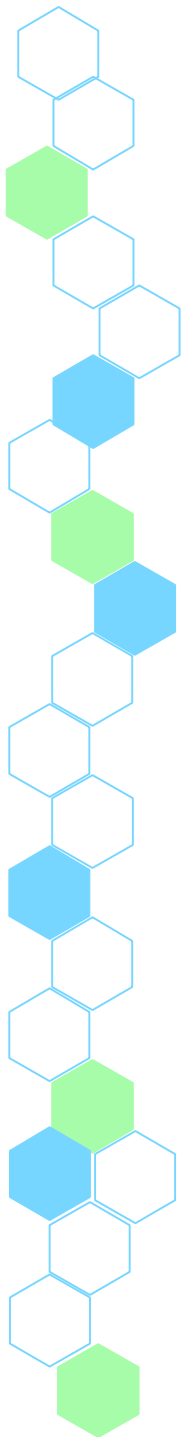


永瀬グループ

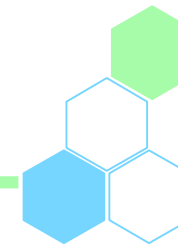


* * * * (* * 大)

* * * * (* * * 大)

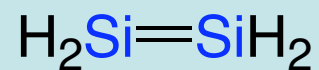
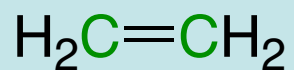


体験プログラム



目的：量子化学計算を用いて、分子の構造や性質を明らかにする

<課題>

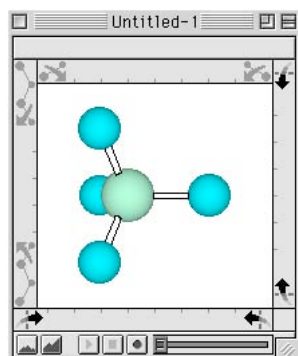


分子構造
安定性
分子軌道

手順



分子構造の作成



Gaussian03インプットファイルの作成 (UNIX)



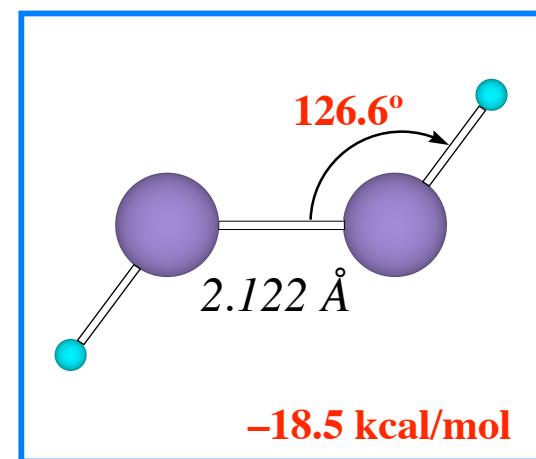
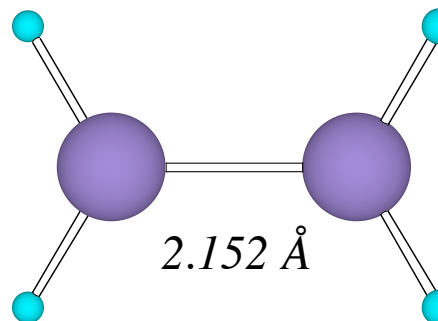
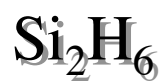
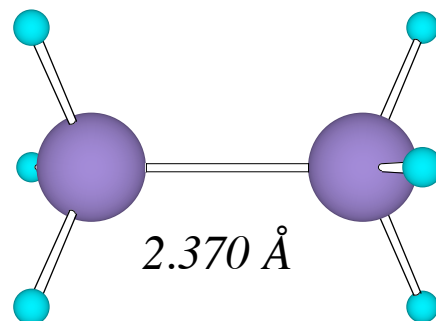
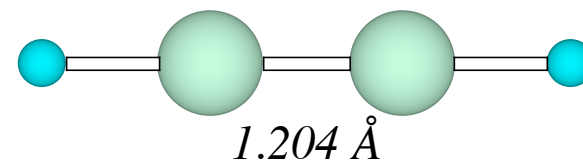
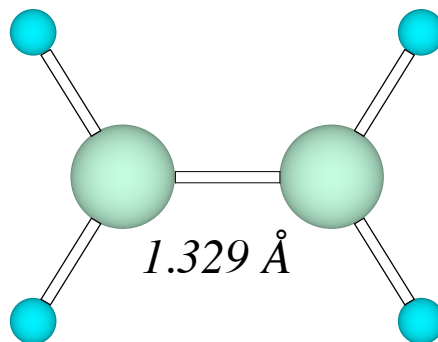
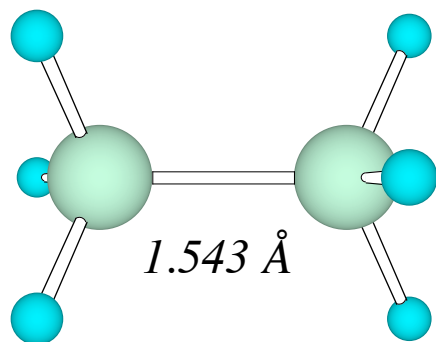
```
pcb - M3
Last login: Fri Aug 5 01:25:44 on tty03
Welcome to Darwin!
g03tao~masaki@pc3:~$ ssh graduate@132.42.100.214
Trying 132.42.100.214...
Connected to enlpc3-132-42-100-214.
Escape character is '^]'
Password:
Login successful

enlpc3 login: graduate
Password:
Last login: Fri Aug 5 00:13:50 from g03tao-132-42-100-214
Have a lot of fun...

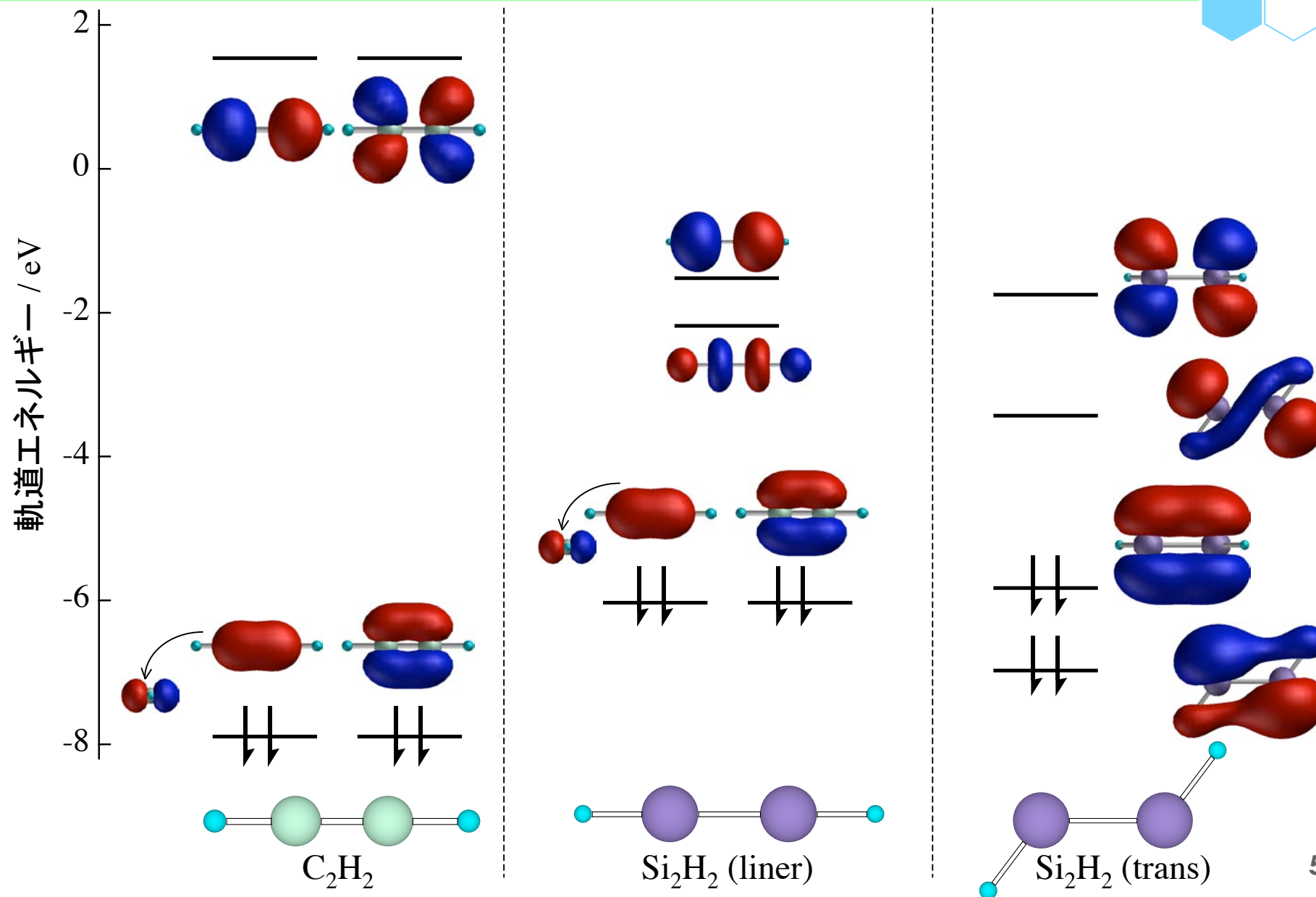
Welcome to Darwin!
Fri Aug 5 00:14:04:2005
g03tao~masaki@pc3:~$ cd /home/graduate
graduate~enlpc3$
graduate~enlpc3$
```

計算の実行・結果の解析

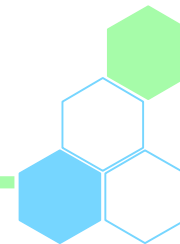
最適化構造



分子軌道の比較



まとめ



Si_2H_2 では直線型よりも、トランス型のほうが安定であることが分かった。

分子軌道の解析により、ケイ素原子は隣接していないほうの水素原子と弱い結合を形成していることがわかった。

炭素原子では多重結合になるにつれて結合長が短くなったが、ケイ素のトランス型の三重結合と二重結合では結合長にほとんど違いが見られなかった。