

# 基礎量子化学

2016年4月～8月

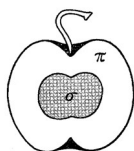
7月29日 第15回

11章 分子構造

分子軌道法

11・6 ヒュッケル近似

担当教員:  
 福井大学大学院工学研究科生物応用化学専攻  
 前田史郎  
 E-mail: smaeda@u-fukui.ac.jp  
 URL: http://acbio2.acbio.u-fukui.ac.jp/phychem/maeda/kougi  
 教科書:  
 アトキンス物理化学(第8版)、東京化学同人  
 10章 原子構造と原子スペクトル  
 11章 分子構造



1

7月22日

下の図は、アニリンとベンズアルデヒドの各原子上のπ電子密度をヒュッケル分子軌道法で計算したものである。アニリンとベンズアルデヒドの共鳴構造式を描いて、求電子置換反応について説明せよ。

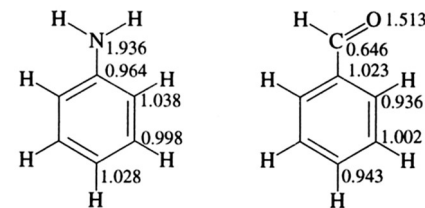
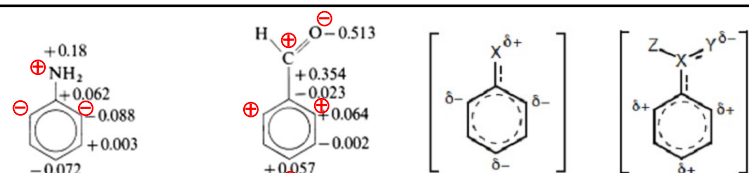


図 6.29 アニリンとベンズアルデヒドのπ電子密度



Total charge on ring carbons: -0.180

+0.158

VII

VIII

アニリンとベンズアルデヒドのπ電子密度

Keith Yates, "Hückel Molecular Orbital Theory", Elsevier (1978), pp221.

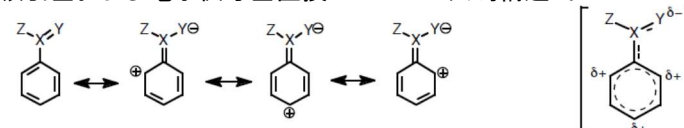
上の図は、ヒュッケル分子軌道法で計算したアニリンとベンズアルデヒドのπ電子密度を過剰(-)または不足(+))電荷で表したものであり、共鳴構造式で表したときのδ-およびδ+と良く対応している。

電子供与基はベンゼン環炭素の電子密度を高めるので求電子置換反応を活性化する。オルト位とパラ位の電子密度が高く、反応はオルト位とパラ位で起こる。電子吸引基は環炭素の電子密度を低め、特にオルト位とパラ位を正に荷電させるので、求電子置換反応を起こりにくくする。反応が起こるとしたら相対的に電子密度の高いメタ位で起こる。

共鳴構造式: 電子供与基のオルト・パラ配向性

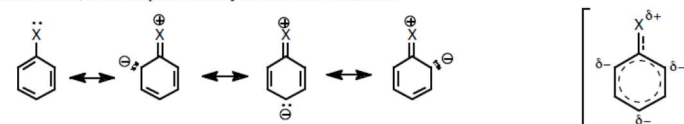
共鳴構造式: 電子吸引基のメタ配向性

電子吸引基および電子供与基置換ベンゼンの共鳴構造式



Z-X=Y: -O-N+=O, R-C=O, HO-C=O, RO-C=O, H<sub>2</sub>N-C=O, RNH-C=O, R<sub>2</sub>N-C=O, Cl-C=O, C=N, N=N+

Figure 19.12 The resonance effects of an electron-withdrawing substituent on benzene are to decrease the overall electron density of the ring and to accumulate positive charge at the positions *ortho* and *para* to the substituent. These substituents deactivate the ring towards electrophilic aromatic substitution and when substitution occurs, it occurs preferentially *meta* to the substituent.



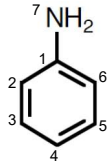
X: OH, OR, OCOR, NH<sub>2</sub>, NHR, NR<sub>2</sub>, NHCOR, NRCOR, F, Cl, Br, I, SH, SR

Figure 19.13 The resonance effects of an electron-releasing substituent on benzene are to increase the overall electron density of the ring and to accumulate negative charge at the positions *ortho* and *para* to the substituent. These substituents usually activate the ring towards electrophilic aromatic substitution and when substitution occurs, it occurs preferentially *ortho* and *para* to the substituent.

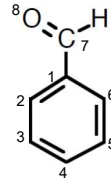
ウイスコンシン大CHEM323 <http://www.uwec.edu/lewisd/chem323/aromatics.pdf>

アニリンとベンズアルデヒドの永年行列式

アニリン



$$\begin{array}{ccccccc|c}
 \text{C1} & \text{C2} & \text{C3} & \text{C4} & \text{C5} & \text{C6} & \text{N} & \\
 \hline
 x & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0.8 & \\
 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & \\
 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & \\
 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 0 & \\
 \hline
 0.8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x+1.5 & \\
 \hline
 \end{array} = 0$$



$$\begin{array}{ccccccc|c}
 \text{C1} & \text{C2} & \text{C3} & \text{C4} & \text{C5} & \text{C6} & \text{C7} & \text{O} \\
 \hline
 x & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & x & 1 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & x & 0 & 0 \\
 \hline
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & x+1 \\
 \hline
 \end{array} = 0$$

Simple Huckel Method Calculation

アニリンのHuckel MO計算

出力例

Aniline

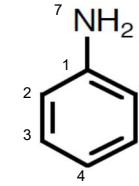
File of Result Data = Aniline

Number of Pi-orbitals = 7

Number of Electrons = 8

Lower Triangle of Huckel Secular Equation

$$\begin{array}{ccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\
 1: & 0.00 & & & & & & \\
 2: & 1.00 & 0.00 & & & & & \\
 3: & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & & & \\
 4: & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & & \\
 5: & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & \\
 6: & 1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & \\
 7: & 0.80 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.50
 \end{array}$$



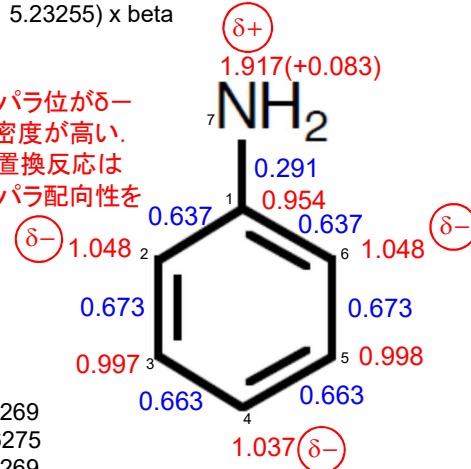
Total Pi-Electron Energy = ( 7 ) x alpha + ( 11.23255 ) x beta

Resonance Energy = ( 5.23255 ) x beta

Electron Population on atom

atom	Population
1	0.95378
2	1.04843
3	0.99773
4	1.03666
5	0.99773
6	1.04843
7	1.91724
合計	8.00000

オルト・パラ位がδ-  
で電子密度が高い。  
求電子置換反応は  
オルト・パラ配向性を  
示す。



π電子密度と結合次数

Bond-Order Matrix

2-1	0.63725	3-2	0.67269
4-3	0.66275	5-4	0.66275
6-1	0.63725	6-5	0.67269
7-1	0.29121		

Simple Huckel Method Calculation

ベンズアルデヒドのHuckel MO計算

出力例

Benzaldehyde

File of Result Data = benzaldehyde.txt

Number of Pi-orbitals = 8

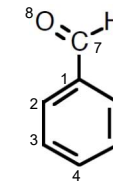
Number of Electrons = 8

Lower Triangle of Huckel Secular Equation

$$\begin{array}{cccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\
 1: & 0.00 & & & & & & & \\
 2: & 1.00 & 0.00 & & & & & & \\
 3: & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & & & & \\
 4: & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & & & \\
 5: & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & & \\
 6: & 1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & & \\
 7: & 1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 & \\
 8: & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 1.00
 \end{array}$$

Orbital Energies and Molecular Orbitals

-x	1	2	3	4	5	6	7	8
2.18291	1.66735	1.00000	1.00000	-0.38589	-1.00000	-1.34168	-2.12269	
2.00	2.00	2.00	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
1	-0.50638	0.07163	-0.50000	0.00000	0.20538	0.00000	-0.43126	0.51018
2	-0.36340	-0.15235	-0.25000	-0.50000	-0.34555	0.50000	0.05355	-0.39995
3	-0.28688	-0.32564	0.25000	-0.50000	-0.07203	-0.50000	0.35941	0.33880
4	-0.26285	-0.39061	0.50000	0.00000	0.37334	0.00000	-0.53577	-0.31922
5	-0.28688	-0.32564	0.25000	0.50000	-0.07203	0.50000	0.35941	0.33880
6	-0.36340	-0.15235	-0.25000	0.50000	-0.34555	-0.50000	0.05355	-0.39995
7	-0.37859	0.42412	0.00000	0.00000	0.61184	0.00000	0.47151	-0.28304
8	-0.32005	0.63553	0.50000	0.00000	-0.44148	0.00000	-0.20136	0.09064





[3]  $\pi$ 電子エネルギーをクーロン積分および共鳴積分 $\beta$ を使って表せ。

$$\begin{vmatrix} \alpha_0 - E & 0 & 0 & \beta \\ 0 & \alpha_0 - E & 0 & \beta \\ 0 & 0 & \alpha_0 - E & \beta \\ \beta & \beta & \beta & \alpha_N - E \end{vmatrix} = (\alpha_0 - E) \begin{vmatrix} \alpha_0 - E & 0 & \beta \\ 0 & \alpha_0 - E & \beta \\ \beta & \beta & \alpha_N - E \end{vmatrix} - \beta \begin{vmatrix} 0 & \alpha_0 - E & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_0 - E \\ \beta & \beta & \beta \end{vmatrix}$$

$$= (\alpha_0 - E) \{ (\alpha_0 - E)^2 (\alpha_N - E) - \beta^2 (\alpha_0 - E) - \beta^2 (\alpha_0 - E) \} + \beta (\alpha_0 - E)^2 \beta$$

$$= (\alpha_0 - E)^2 \{ (\alpha_0 - E)(\alpha_N - E) - 2\beta^2 - \beta^2 \}$$

$$= (\alpha_0 - E)^2 \{ (\alpha_0 - E)(\alpha_N - E) - 3\beta^2 \}$$

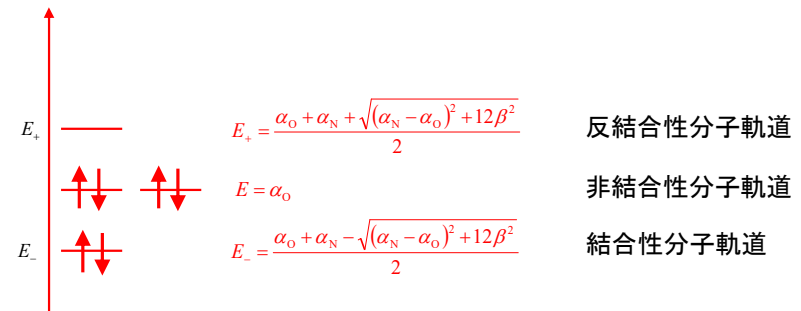
$$\begin{cases} (\alpha_0 - E)^2 = 0 \\ (\alpha_0 - E)(\alpha_N - E) - 3\beta^2 = 0 \\ E^2 - (\alpha_N + \alpha_0)E + \alpha_0\alpha_N - 3\beta^2 = 0 \end{cases}$$

$$E_{\pm} = \frac{\alpha_N + \alpha_0 \pm \sqrt{(\alpha_N + \alpha_0)^2 - 4\alpha_0\alpha_N + 12\beta^2}}{2}$$

$$= \frac{\alpha_N + \alpha_0 \pm \sqrt{(\alpha_N - \alpha_0)^2 + 12\beta^2}}{2}$$

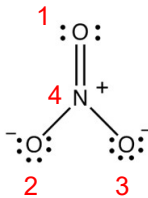
$$\begin{cases} E_+ = \frac{\alpha_0 + \alpha_N + \sqrt{(\alpha_N - \alpha_0)^2 + 12\beta^2}}{2} \\ E = \alpha_0 \text{ (重根)} \\ E_- = \frac{\alpha_0 + \alpha_N - \sqrt{(\alpha_N - \alpha_0)^2 + 12\beta^2}}{2} \end{cases}$$

[4] 分子軌道ダイアグラムを描け。



[5] 硝酸イオンの非局在化エネルギーを求めよ。

局在したN=O結合の $\pi$ エネルギーは、3つの共鳴構造式のうち1つから導かれる。すなわち、局在したN=O二重結合である。永年方程式は次式で与えられる。



$$\begin{vmatrix} \alpha_0 - E & \beta \\ \beta & \alpha_N - E \end{vmatrix} = 0$$

$$(\alpha_0 - E)(\alpha_N - E) - \beta^2 = 0$$

$$E_{\pm} = \frac{\alpha_N + \alpha_0 \pm \sqrt{(\alpha_N + \alpha_0)^2 - 4\alpha_0\alpha_N + 4\beta^2}}{2}$$

$$E^2 - (\alpha_N + \alpha_0)E + \alpha_0\alpha_N - \beta^2 = 0$$

$$= \frac{\alpha_N + \alpha_0 \pm \sqrt{(\alpha_N - \alpha_0)^2 + 4\beta^2}}{2}$$

非局在化エネルギーは、共鳴構造のときのエネルギーと局在したN=O二重結合のエネルギーの差である。

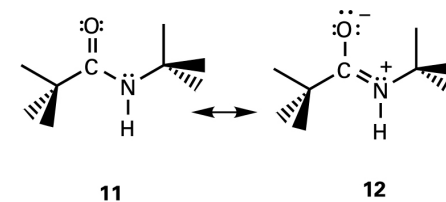
$$Deloc.E. = \sqrt{(\alpha_0 - \alpha_N)^2 + 12\beta^2} - \sqrt{(\alpha_0 - \alpha_N)^2 + 4\beta^2}$$

11章の章末問題 応用問題:天文学と生物学

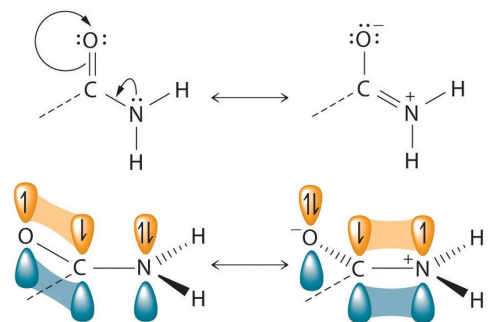
11・26 星間物質である $H_3^+$ に関する問題

11・28 タンパク質中のアミノ酸を結びつけるペプチド基の平面構造に関する問題

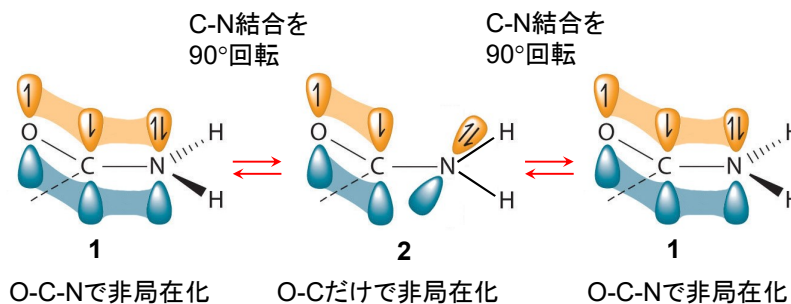
原子価結合法は、このペプチド基の平面配座を、酸素、炭素、窒素原子の間の $\pi$ 結合の非局在化で説明する。



タンパク質中のペプチド基の平面配座のモデル化合物としてホルムアルデヒドを用いることができる。ホルムアルデヒドの酸素、炭素、窒素原子の平面に垂直な2pオービタルのLCAO-MOを作り、分子軌道法によってそのエネルギーと立体配座を議論することができる。



Bruce Averill and Patricia Eldredge, General Chemistry: Principles, Patterns, and Applications, v. 1.0



O-C-Nで非局在化 O-Cだけで非局在化 O-C-Nで非局在化

O-C-Nで非局在化した安定な状態から、C-N結合を90°回転させるとC-N間の共役がなくなりO-Cだけで非局在化したエネルギーの高い状態となる。1と2のエネルギー差をC-N結合の回転障壁と考えることができる。1と2のエネルギーをヒュッケル分子軌道法を用いて計算して、この回転障壁の大きさを見積もることができる。

## 8. 分子軌道 (molecular orbital)

(いままで、化学結合を、原子軌道を通して理解してきた。ここで、化学結合の現代的考え方である分子軌道の概略を説明する。分子軌道による化学現象の考え方を分子軌道法 (molecular orbital method) という)。

- 現在の分子科学の考え方では、原子・分子・イオン・ラジカルなどのような系でもSchrödinger 方程式を解くことで、その系の全ての情報が得られる。
- Schrödinger 方程式はどのような系でも同じ形式、 $E\psi = H\psi$  の形式を有する。 $\psi$  は一般に波動関数とよばれ、ここでは原子軌道や分子軌道に相当する。 $\psi$  は電子の“波としての特質”と“電子の分布”を表す数学的関数である。
- $E$  は原子軌道や分子軌道のエネルギー値である。 $H$  はハミルトニアンとよばれ、 $\psi$  を“微分する”などの演算を施す。 $H$  の内容は扱う系によって異なる。
- Schrödinger 方程式を解く方法は、2つある。一つは代数的に解く方法である。
- 代数学方法では、水素原子等非常に単純な系についてのSchrödinger方程式以外は解くことはできない。しかし、この方法で解いた結果が、我々が学んだ1s, 2s, 2p, …等の原子軌道の概念である。

(備考)市川紘(原山胡人)氏の授業資料を使わせていただいています。

- Schrödinger 方程式を解くもう一つ方法はLCAO法とよばれるものである。LCAOはLinear Combination of Atomic Orbitals (原子軌道の一次結合)の頭文字である。

$$\psi = c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + c_3\chi_3 + c_4\chi_4 \dots$$

- LCAO法の考え方:分子などの複雑な系の波動関数( $\psi$ )はその中に含まれる原子の原子軌道に係数( $\chi_i$ )を付け、それらを組み合わせることで表現できる。係数は $\psi$ に対する原子軌道の寄与を表す。(なお、 $\psi$  および $\chi$  はギリシャ文字でそれぞれプサイ、カイと読む)
- このように原子軌道の組み合わせで近似した $\psi$ をSchrödinger 方程式( $E\psi = H\psi$ )に代入して、“波”として存在できる(これを定在波または定常波という)ような $\psi$ とそれに対応する $E$ を決める(係数 $\chi_1, \chi_2, \dots$ の値によって $\psi$ が波として存在可能であったり、干渉によって消滅したりする)。このようにして $\psi$ の原子軌道の係数( $\chi_i$ )と $E$ を求めるというのがLCAO法である。
- 以上のようにして得た複数列をエネルギー準位の低い順( $(\psi_1, E_1)$ ,  $(\psi_2, E_2)$ ,  $(\psi_3, E_3)$ , ...)に並べ、その分子の分子軌道とする。
- 電子は準位の低い軌道の順に、Hund則に従って入る。
- LCAO法の利点は2つあり、一つは大きな系(例えば1000原子にものぼるタンパク質や核酸)についても計算可能であること、もう一つは化学結合を、原子軌道を通して理解することができる。



### 9. 分子軌道の具体例

二つの水素原子(A, Bとする)が結合した水素分子(H<sub>2</sub>)の分子軌道について説明する。

- 原子Aの1s原子軌道を $\chi_A$ , 原子Bの原子軌道を $\chi_B$ とする。
- 分子軌道を,

$$\psi = a\chi_A + b\chi_B$$

であらわす。

- これをSchrödinger 方程式( $E\psi = H\psi$ )に代入して原子軌道に対する係数 $a, b$ の値を決める。
- 結果は, 2つの原子軌道が合わさり新たにエネルギー準位の異なる2つの分子軌道が形成される。Hund則にしたがって, エネルギー準位の低い分子軌道に2つの電子が入る(図2-19)。
- 生成するエネルギー準位の低い分子軌道は $a\chi_A + b\chi_B$ , 高い分子軌道は $b\chi_A - a\chi_B$ である( $a$ と $b$ が逆になる)。ここで,  $a, b$ は $a^2 + b^2 = 1$ を満たし, 原子軌道 $\chi_A$ および $\chi_B$ が分子軌道へ寄与する割合を表す定数である。
- 正確には,  $a^2$ が原子軌道 $\chi_A$ が分子軌道に寄与する割合,  $b^2$ が原子軌道 $\chi_B$ が分子軌道に寄与する割合である( $a$ ではなく $a^2$ が寄与の割合を示す理由は省略)。  $a, b$ は数学的に決定される。

- 3原子以上の場合も分子軌道は各原子の原子軌道の組み合わせから成り, 化学結合だけでなく分子の全ての性質は分子軌道で決まる。
- 共有結合と配位結合では, 結合のとき分子軌道が形成されるが(図2-19), イオン結合(図2-20)では分子軌道の形成はない(分子軌道 $a\chi_A + b\chi_B$ の $a=0$ の状態のことをいう)。結合電子対は原子Bの原子軌道 $\chi_B$ に支配される。

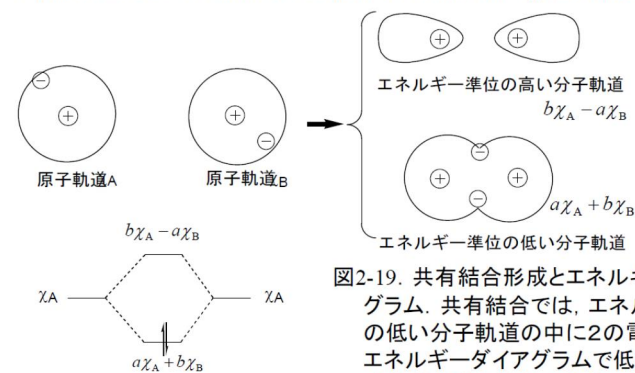


図2-19. 共有結合形成とエネルギーダイアグラム。共有結合では, エネルギー準位の低い分子軌道の中に2の電子が入る。エネルギーダイアグラムで低い方の分子軌道を結合性分子軌道, 高い方を反結合性の分子軌道という。

分子軌道の形成を上のようなエネルギーダイアグラム(模式図)で表す

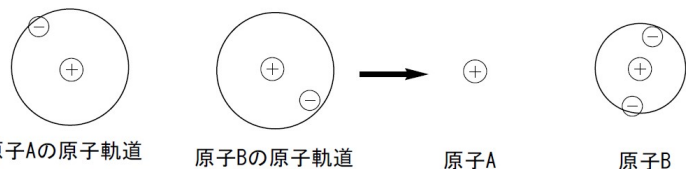


図2-20. イオン結合形成。イオン結合では, 一方の原子の原子軌道に2つの電子が入り, “結合電子対”はなく, 分子軌道は形成されない。

### 9. 分子軌道の化学結合考え方と原子軌道との関係

- 分子軌道から原子核と原子核の間に分布する電子の濃度(電子密度(electron density)という)を求めることができる。この原子間に存在する電子密度の大小が結合の強弱を決めると考える。
- 原子軌道を用いた共有結合の表現, たとえば $sp^2-sp$ , は正しくは分子軌道で表されるべきであるが, その分子軌道をよく見ると, そのような特定な結合に関係する原子軌道の係数( $c_i$ )が大きな値を持ち, それらの原子軌道が結合に大きく関与することがわかる。 $sp^2-sp$ 等の表現は分子軌道の結合に関係する部分のみを表すと考えてよい。

### 10. ヒュッケル分子軌道(Hückel molecular orbital)

- ベンゼンの異常な安定性を説明するため E. Hückelによって提唱された(1931年)。
- 手計算を可能とするため以下の近似を行う。
- $\pi$  電子系のみを考える。
- $\pi$  電子系の分子軌道( $\psi$ )は2p原子軌道のLCAOで表す。
- 原子軌道のエネルギーを $\alpha$ ,  $\pi$ 結合エネルギーを $\beta$ と近似し, 直接これらの値を求めないで, 分子軌道のエネルギーと結合のエネルギーを $\alpha, \beta$ を単位として求める。なお,  $\alpha, \beta$ は負の値を有する。

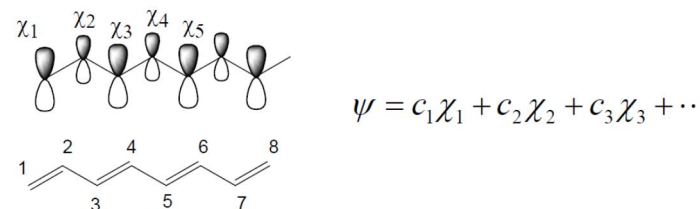
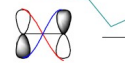


図2-21. ヒュッケル分子軌道法による $\pi$ 分子軌道の計算

□ このようにして定めた $\psi$ を方程式( $E\psi = H\psi$ )に代入し、 $\psi$ が定在波(時間を経ても消滅しない波)として存在できるように、 $c_1, c_2, c_3, \dots$ を数学的に決める。以下にヒュッケル分子軌道の例を示す。

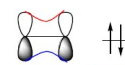
ヒュッケル分子軌道の例  
エチレン(CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub>)

$$E_2 = \alpha - \beta \quad \psi_2 = 0.707\chi_1^{2p} - 0.707\chi_2^{2p}$$

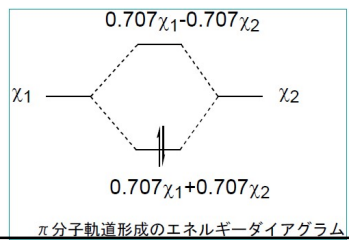


電子の入らない軌道(空軌道)  
エネルギー準位が高い節(位相の逆転)がある

$$E_1 = \alpha + \beta \quad \psi_1 = 0.707\chi_1^{2p} + 0.707\chi_2^{2p}$$



電子の入る軌道(被占軌道)  
エネルギー準位が低い節がない



π分子軌道形成のエネルギーダイアグラム

ブタジエン(CH<sub>2</sub>=CH-CH=CH<sub>2</sub>)

$$\begin{aligned} E_4 &= \alpha - 1.618\beta & \psi_4 &= 0.371\chi_1^{2p} - 0.601\chi_2^{2p} + 0.601\chi_3^{2p} - 0.371\chi_4^{2p} \\ E_3 &= \alpha - 0.618\beta & \psi_3 &= 0.601\chi_1^{2p} - 0.371\chi_2^{2p} - 0.371\chi_3^{2p} + 0.601\chi_4^{2p} \\ E_2 &= \alpha + 0.618\beta & \psi_2 &= 0.601\chi_1^{2p} + 0.371\chi_2^{2p} - 0.371\chi_3^{2p} - 0.601\chi_4^{2p} \\ E_1 &= \alpha + 1.618\beta & \psi_1 &= 0.371\chi_1^{2p} + 0.601\chi_2^{2p} + 0.601\chi_3^{2p} + 0.371\chi_4^{2p} \end{aligned}$$

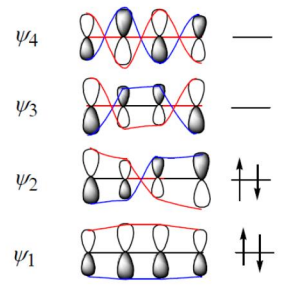


図2-23. ブタジエンのπ電子のヒュッケル分子軌道

11. 最高被占軌道(HOMO)と最低空軌道(LUMO)

- 電子は分子軌道をエネルギー準位の低い順にHund則にしたがって占める。
- その結果、電子の入った軌道と入らない軌道がある。電子の占めた軌道を被占軌道(occupied orbital)、電子入っていない軌道を空軌道(unoccupied orbital)とよぶ。
- 被占軌道のうちもっともエネルギー準位の高い軌道を最高被占軌道(HOMO)、空軌道のうちもっともエネルギー準位の低い軌道を最低空軌道(LUMO)とよぶ。
- 化学反応は、電子の授受をとまなう。分子から他の分子へ電子を与えるとき、電子は主としてHOMOから流出し、電子を受け入れるときはLUMOに入る。

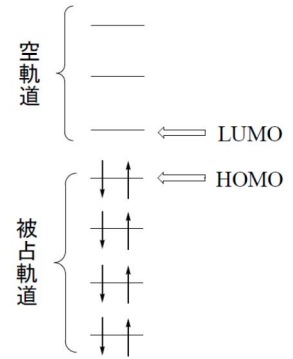
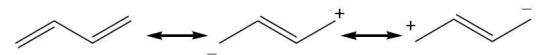


図2-25. 最高被占軌道(HOMO)と最低空軌道(LUMO)

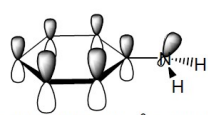
12. 共鳴・共役

- 電子は、距離的に近かつ平行にある2p原子軌道間を行き来できる。従って、2つの二重結合間の隣接する炭素原子の2p原子軌道が平行であれば、隣り合っている二重結合のp電子は互に行き来する。この現象を共役あるいは共鳴という。
- 孤立電子対は原則として混成軌道に入るが、共役する場合、p軌道に入り、隣りの二重結合と共鳴・共役する。
- 共鳴(共役)した電子構造を、極限構造間を“ $\longleftrightarrow$ ”でつないで表現する。

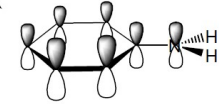
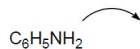


共鳴した電子構造を極限構造を両方向の矢印でつないで表現する

図2-26. 共役可能なブタジエンと共役(共鳴)の表現



アミノ基のN原子は $sp^3$ をとると、  
孤立電子対の電子はベンゼンの中  
にうまく入れない



実際のアニリンのアミノ基のN原子は $sp^2$ をとり、  
孤立電子対の電子は $p$ 軌道にあり、効率よく環の中に入ら  
うまく入れない

図2-27. アニリンの共役. アニリンのN原子は効率よく共役するため、 $sp^2$ 混成を  
とり、非結合電子対は $p$ 軌道に入る.

7月29日, 学生番号, 氏名

(1) ペプチド結合のC-N回転障壁の大きさをヒュッケル分子軌道法を用いて見積もりなさい。ヘテロ原子(酸素原子と窒素原子)のクーロン積分および共鳴積分パラメータはストライトウィーザーがまとめた値を用いる。 $\beta = -2.7\text{eV} = -260\text{kJ/mol}$ とする。

(2) 「基礎量子化学」について感想等を書いて下さい。

(3) 本日の授業についての質問, 意見, 感想, 苦情, 改善提案などを書いてください。