

触媒懇談会ニュース

触媒学会シニア懇談会

1. 化学反応とは

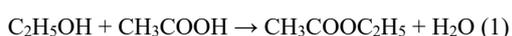
ルモックス技研 志賀昭信

すべての物質は分子でできています。分子は原子が結合したものです。人間は長い歴史の間に分子は原子でできていることを明らかにしてきました。分子を構成する原子の元素記号で表示したものが化学式です。

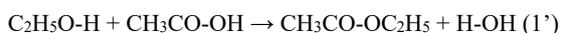
分子と分子の互いの構成原子間の結合を組み換えると、新しい分子ができます。この分子と分子の互いの結合の組み換えを化学反応といいます。

私たちは化学反応を使って有用な物質（分子）を作ってきました。

例えばエチルアルコールと酢酸が反応（化学反応）すると酢酸エチルができます。化学式で書くと(1)式です。



化学反応を起こす結合を強調して(1)式を書き直すと(1')式となります。



分子の構成原子間の結合とは何でしょうか？ それは原子間の電子の相互作用でできる分子軌道です。すなわち、分子の構成原子は互いの原子間の電子の相互作用（分子軌道）で結合しているのです。

ところで、分子の結合を棒で表すことをだれが始めたのでしょうか。エタンのC-C結合を一本の棒で、エチレンのそれは二本の棒で、アセチレンのそれは三本の棒で表わします。それぞれの結合の特徴が簡明に表現されています。我々は簡便さのゆえに原子同士を無意識に棒で繋いで分子を描いていますが、そもそも分子は原子間で電子が相互作用し分

子軌道を作ることのできるのですから、一本の棒には分子をつくる電子のふるまいがこもっているとと言えるでしょう。結合を作る電子のふるまいを観察できれば我々の化学の理解がさらに深まるでしょう。

一つ問題があります。分子軌道は分子全体に広がっているので分子軌道を求めても分子の特定の原子間の結合を表現する軌道はありません。分子軌道を変換して原子間の結合に変換する必要があります。

藤本は分子軌道を分子の結合に変換する方法を“相互作用軌道対 (PIO)”法として発表しています。⁽¹⁾ この方法を使うと分子の構成原子間の結合を電子のふるまいとして観察することができます。

分子軌道による化学反応機構の記述 (PIOによる反応機構の記述)

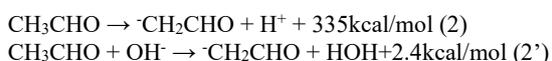
化学反応の過程を想像してみます。その過程は「反応物の反応点が互いに接近しながら登坂を上り、峠を越えて、今度は次第に下り坂を下って生成物になる」と例えることができます。この化学反応の過程を化学反応経路といいます。

ポイントは反応物の接近の仕方、反応物の反応点が互いにその位置と姿勢を結合が生成しやすいよう次第に変えてゆく点にあり、そのために、ほとんどの化学反応では触媒が用いられます。

反応点の位置と姿勢の変化につれて分子軌道の相互作用が始まります、反応に与る結合は弛み、結合に局在化していた電子（束縛されていた電子）は結合から開放されて反応領

域へ非局在化(拡がり)し始めます。この間、系は不安定になり、系のエネルギーは次第に高くなります。非局在化する電子の量は次第に増加し、それに伴って系のエネルギーも高くなり、峠(遷移状態)で非局在化電子量が最大に、系のエネルギーも最高になります。峠(遷移状態)を越えると電子は再び新しい結合生成部位へと局在化し、生成物へと形を変えるにつれてエネルギーが低下、生成物に至って反応が終了します。したがって、分子の変形に伴う系のエネルギーのより少ない上昇で、反応領域への電子のより多い非局在化を達成することで反応はより容易になると予測できるでしょう。

ここで触媒の効果の例を見ておきましょう。アルドール縮合の第一段階である α -メチルプロトンの引抜き反応に対するOH⁻アニオン触媒を例にとります。触媒なしの場合を(2)式に、触媒ありの場合を(2')式に示します。



触媒の存在で引抜き反応のエネルギーが非常に小さくなるのが分かります。

以上述べたように、分子軌道を使って化学反応(分子の結合の組み換え)機構を理解することは化学の基礎となる大切な事項です。

化学反応のエネルギーダイアグラム

反応経路に沿った系のエネルギー変化を記述したものがエネルギーダイアグラムです。

コンピュータと分子軌道法の発達で反応のエネルギーダイアグラムを描くことが非常に容易になりました。多くの触媒反応の活性化エネルギーが求められおり、反応速度を予測することが容易になりました。

活性化エネルギーさえ分ればそれで十分、基礎になっている軌道の相互作用は知らなくともよい、これも一理あるかもしれませんが。しかし化学反応のおおもとを省略してしまつては化学自体に対する興味も失うことにつながるのではないのでしょうか。

化学反応の機構を記述する方法として現在

広く用いられているのが、巻矢印 \curvearrowright を用いて電子の移動を表現する有機電子論に基づく方法です。便利な方法ですが、経験を要し、反応に要するエネルギーも分かりません。分子軌道に基づく反応機構の記述方法が望まれます。

PIO による反応機構の記述

ところが、分子軌道に基づく反応機構の記述がなかなか広まりません。そのわけは分子全体に拡がっている分子軌道を反応に与る軌道に変換するよい方法が分からなかったからでしょう。反応は分子の反応点間の電子の授受ですからそれに与る電子の軌道ができています。藤本らは分子が反応に際して電子の授受を行う軌道を相互に生み出すことを明らかにし、反応軌道と名付けて、“Paired Interacting Orbitals”(PIO)を用いる反応の解析法を提唱しました。⁽¹⁾

(1) H. Fujimoto, T. Yamasaki, H. Mizutani and N. Koga: J. Am. Chem. Soc. 107, 6157 (1985) 反応経路に沿って反応軌道を見てゆくことで反応に伴う電子の拡がり(非局在化)の様子を視覚的に観察することができます。

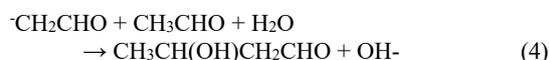
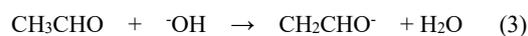
2. 化学反応のPIO による描画, 各論

いろいろな化学反応のPIO を見てゆきましょう。PIO の計算方法はAPPENDIX に示しました。

1 アセトアルデヒドのアルドール反応

アルドール反応は α 位に水素をもつアルデヒドまたはケトンと反応して β -ヒドロキシカルボニル化合物が生成する反応で、アセトアルデヒド同士の反応では1,4-ヒドロキシブタナールが生成します。反応は酸、あるいは塩基触媒の存在下、エノール中間体を生成する第一段階と、そのエノールがアセトアルデヒドに求核付加して1,4-ヒドロキシブタナールが生成する第二段階とからなっています。

塩基触媒の場合の反応式を(3)式と(4)式に示します。



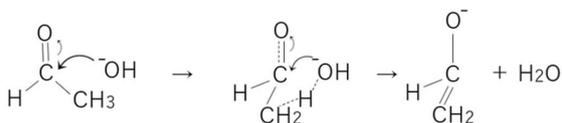
1.1 有機電子論による反応機構

アセトアルデヒドのアルドール反応機構を有機電子論による巻矢印で記述すると

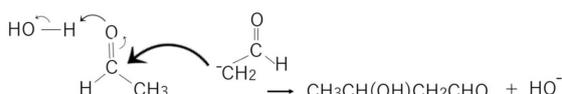
(3)式,

(4)式が以下ようになります.

(3)式



(4)式



1.2 PIO による反応機構

PIO を用いてアセトアルデヒドのアルドール反応機構 ((3)式と(4)式) を記述します.

1.2.1 エノラートイオンの生成経路

1) 反応物[CH₃CHO]と触媒[-OH]の初期状態 : state 1

CH₃CHO - [OH]のR: C - OH = 5.0Å ∠COH = 144.8° R: C - H = 1.1Å

∠CCO = 80°として初期状態としました. 初期状態の構造, 全エネルギー, およびPIO を Fig. 1 に示しました. CH₃CHO と -OH の反応軌道はCH₃CHO と -OH のそれぞれに局在しており, 両者間への非局在化は認められません. 全エネルギーは -224.996270a.u. です.

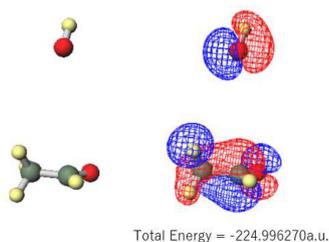


Fig. 1 初期状態の構造, 全エネルギー, およびPIO

2) [CH₃CHO]と[-OH]の中間状態-1 : state 2

CH₃CHO - [OH]のR: C - OH = 3.0Å ∠COH = 144.8° R: C - H = 1.1Å

∠CCO = 75°, 初期状態の C - OH = 5.0Å を 3.0Å, ∠CCO = 80°を75°として

[-OH]を[CH₃CHO]に近づけ, 中間状態-1 としました. 中間状態-1 の構造, 全エネルギー,

およびPIO を Fig. 2 に示しました. OH のO とCH₃CHO のC との間に赤色 (同色) の反応軌道の重なりが認められ, 両者間に引力の働いていることが分かります. 全エネルギーは -225.005673a.u. で系はわずかに安定化しています.

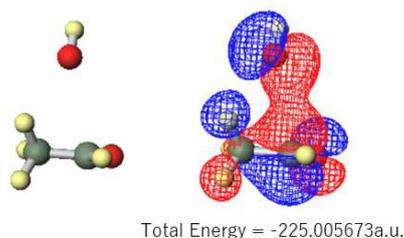


Fig. 2 中間状態-1 の構造, 全エネルギー, およびPIO

3) [CH₃CHO]と[-OH]の中間状態 2 : state 3

中間状態-1 のR: C - OH = 2.7Åを2.5Å, ∠CCO = 75°を70°, R: C - H = 1.5Å

として中間状態 2 としました. [-OH]を[CH₃CHO]に近づけ, CH₃CHO のCH₃のCHを少し伸ばしました. ∠COH = 144.8°は中間状態-1 と同じです. 中間状態-2 の構造, 全エネルギー, およびPIO を Fig. 3 に示しました. OH のO とCH₃CHO の二つのC との間に赤色 (同色) の反応軌道の重なりが増加し, OH とCH₃CHO との間の引力が大きくなっていることが分かります. また, CH₃のHとOHのOとの間にも青色 (同色) の反応軌道が広がっておりH とO の間の引力も大きくなっていることが分かります. さらに, CH₃のCとH との間の反応軌道は赤色と青色 (異色同士) で, CとHの間に斥力の働いていることが分かります. 全エネルギーは -224.943598a.u. で系は不安定化しています.

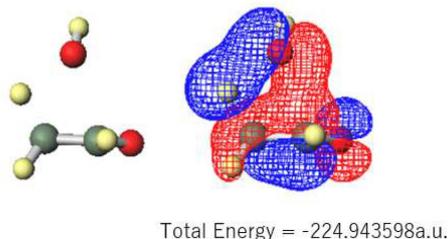


Fig. 3 中間状態-2 の構造, 全エネルギー, およびPIO

4) [CH₃CHO]と[-OH]の中間状態 3 : state 4

中間状態-2のR: C-H = 1.5Åを2.4Åとして, CH₃のC-Hを大きく伸ばし中間状態-3としました. R: C-OH = 2.7Å ∠COH = 144.8° ∠CCO = 70°は中間状態-2と同じです. 中間状態-3の構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 4に示しました. OHのOとCH₃CHOの二つのCとの間に赤色(同色)の反応軌道の重なりが減少し, OHとCH₃CHOとの間の引力が小さくなっています. 一方, CH₃のHとOHのOとの間の青色(同色)の反応軌道の重なりは大きくなっており, HとOの間の引力は大きくなっています. さらに, CH₃のCとHとの間の赤色と青色(異色同士)の反応軌道の相互作用は大きくなっており, CとHとの間の斥力は大きくなっています. 全エネルギーは-24.779203a.u.と系はさらに不安定化しています.

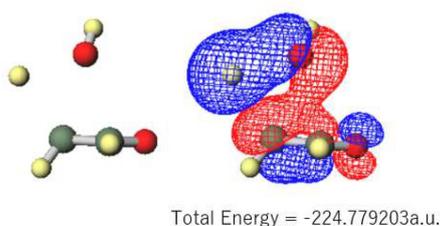


Fig. 4 中間状態-3の構造, 全エネルギー, およびPIO

5) [CH₃CHO]と[-OH]の中間状態-4 : state 5

中間状態3の[CH₃CHO]のCH₃Cの∠CCH = 99°として, CH₃のHを[-OH]のOに近づけ中間状態-4としました. 他のパラメータは中間状態3と同じです. 中間状態-4の全エネルギーとPIOをFig. 5に示しました. CH₃のHとOHのOの間の反応軌道は青色(同色)でほぼ水のそれに近いことが分かります. さらに, OHのOとCH₃CHOの二つのCとの間の反応軌道は青色と赤色(異色同士)で, OHとCH₃CHOとの間は斥力に変わっています. 全エネルギーは-225.019014a.u.と系は大きく安定化していますが, これはほぼ水に近い分子と-CH₂CHOとの生成によるものと思われ.

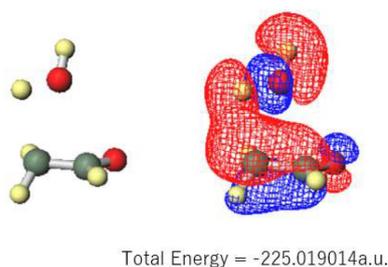


Fig. 5 中間状態-4の構造, 全エネルギー, およびPIO

6) [CH₃CHO]と[-OH]の生成状態 : state 6

中間状態-4の構造最適化を行ったところ, 反応物[CH₃CHO]と触媒[-OH]の生成状態が得られました. その構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 6に示しました. 生成状態の反応軌道は中間状態-3のそれとほとんど同じです. すなわち, CH₃のHとOHのOの間の反応軌道は青色(同色)でほぼ水のそれに近いことが分かります. さらに, OHのOとCH₃CHOの二つのCとの間の反応軌道は青色と赤色(異色同士)で, OHとCH₃CHOとの間は斥力です. 全エネルギーは-225.022438a.u.と中間状態3の-225.019014a.u.とほとんど同じで, 水分子と-CH₂CHO(エノラートイオン)が生成しています.

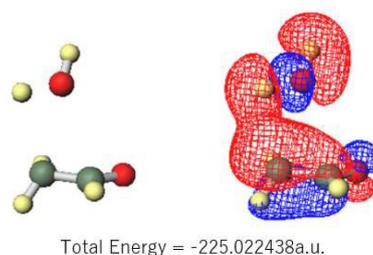


Fig. 6 [CH₃CHO]と[-OH]の生成状態の構造, 全エネルギー, およびPIO

1.2.2 アセトアルデヒドとエノラートイオンの反応:

1, 4-ヒドロキシブタナールの生成経路

7) [CH₃CHO], [-CH₂CHO], [H₂O]の初期状態 : state 7

アセトアルデヒドのCHO基のCとエノラートイオンの-CH₂基のCとの距離:

R1 = 5.0 Å, アセトアルデヒドのCHO基のCとH₂OのOとの距離: R2 = 6.3Å, エノラ

ートイオンの-CH₂基のCとH₂OのOとの距離: R3=3.4Åとして7)の初期状態としました。7)の初期状態の構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 7 に示しました。アセトアルデヒドと, エノラートイオンおよびH₂O の反応軌道はそれぞれに局在しており, 三者間への非局在化は認められません。全エネルギーは -375.966401a.u. です。

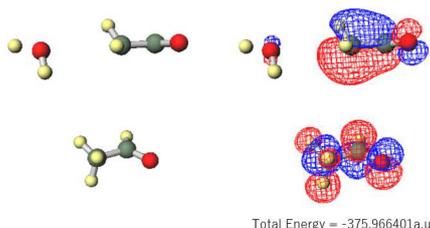


Fig. 7 初期状態の構造, 全エネルギー, およびPIO

8) [CH₃CHO], [-CH₂CHO], [H₂O]の中間状態-1 : state 8

H₂O とエノラートイオン間の距離は変えずにアセトアルデヒドとエノラートイオンの距離を近づけて (R1 = 3.0 Å, R2 = 4.7Å), [CH₃CHO], [-CH₂CHO], [H₂O]の中間状態-1 としました。中間状態-1 の構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 8 に示しました。アセトアルデヒドのCHO 基のC とエノラートイオンの二つのC との間に赤色 (同色) の反応軌道の重なりが認められ, 両者間に引力の働いていることが分かります。H₂O と, アセトアルデヒドおよびエノラートイオンとの間に反応軌道はありません。全エネルギーは -375.971602a.u. で, 系はわずかに安定化しています。

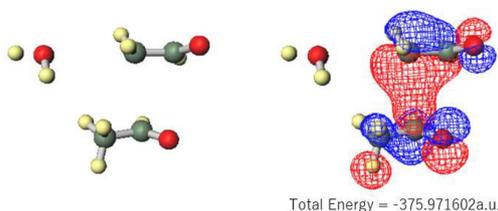


Fig. 8 中間状態-1 の構造, 全エネルギー, およびPIO

9) [CH₃CHO], [-CH₂CHO], [H₂O]の中間状態-2 : state 9

アセトアルデヒドとエノラートイオンの距

離をさらに近づけて (R1 = 2.7Å, R2 = 4.5Å), 中間状態-2 としました。中間状態-2 の構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 9 に示しました。アセトアルデヒドのCHO 基のC とエノラートイオンの二つのC との間の赤色 (同色) の反応軌道の重なりが大きくなり, 両者間の引力が大きくなっています。全エネルギーは -375.973488a.u. で, 系はまたわずかに安定化しています。

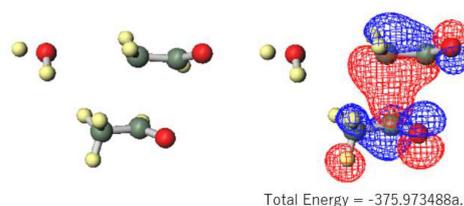


Fig. 9 中間状態-2 の構造, 全エネルギー, およびPIO

10) [CH₃CHO], [-CH₂CHO], [H₂O]の中間状態-3 : state 10

アセトアルデヒドとエノラートイオンの距離をまたさらに近づけて (R1 = 2.4Å, R2 = 4.3Å), 中間状態-3 としました。中間状態-3 の構造, 全エネルギー, およびPIOをFig. 10 に示しました。アセトアルデヒドのCHO 基のC とエノラートイオンの二つのC との間の赤色 (同色) の反応軌道の重なりがさらに大きくなり, 両者間の引力がさらに大きくなっています。全エネルギーは -375.972428a.u. で, 系はわずかに不安定化しています。これはアセトアルデヒドのC-C-O の反応軌道 (青色) のアセトアルデヒドのCHO 基のCとエノラートイオンの二つのC との間の反応領域への拡がりが増え中間状態-2 のそれよりもさらに大きくなり, 青色と赤色 (異色) の相互作用による斥力が生じ中間状態-2 のそれよりも大きくなったことに因ります。

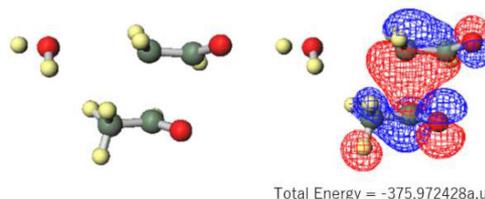


Fig. 10 中間状態-3 の構造, 全エネルギー, およびPIO

11) $[\text{CH}_3\text{CHO}]$, $[-\text{CH}_2\text{CHO}]$, $[\text{H}_2\text{O}]$ の生成状態 : state 11

中間状態-3の構造最適化を行ったところ、 $[\text{CH}_3\text{CHO}]$, $[-\text{CH}_2\text{CHO}]$, $[\text{H}_2\text{O}]$ の生成状態が得られました。その構造、全エネルギー、およびPIOをFig. 11に示しました。アセトアルデヒドのCHOのCとエノラートイオンの CH_2 のCとの間にC-C結合が生じています。PIOを見ると CH_3CHO のOと H_2O のHとの間に赤色(同色)の反応軌道の大きな重なりが認められ、 H_2O が $[\text{CH}_3\text{CHOCH}_2\text{CHO}]$ アニオンの CH_3CHO のO(2-オキシ)に配位していることが分かります。またこれに伴いHとOHとの間の反応軌道は赤色と青色(異色)の相互作用となっており、HとOHが解離状態にあることが分かります。これは中間状態3において H_2O のHが CH_3CHO のOに近づいているためです。全エネルギーは -376.149861a.u. と $[\text{CH}_3\text{CHOCH}_2\text{CHO}]$ アニオンの生成とそれに対する H_2O の配位で、系は大きく安定化しています。

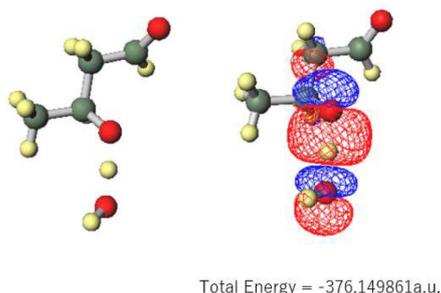


Fig. 11 $[\text{CH}_3\text{CHO}]$, $[-\text{CH}_2\text{CHO}]$, $[\text{H}_2\text{O}]$ 生成状態の構造、全エネルギー、およびPIO

12) 2-ヒドロキシブタナール, $[\text{HOH}]$ の最終生成状態 : state 12

$[(\text{CH}_3\text{CHO})$, $(-\text{CH}_2\text{CHO})$, (H_2O) 生成状態 $\equiv [(\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CHO})$, $(-\text{OH})]$ の(-OH)を+Hで中和し、(O⁻+H 間距離 : $R = 1.0\text{\AA}$)として構造最適化を行なったところ2-ヒドロキシブタナール, $[\text{HOH}]$ の最終生成状態が得られました。その構造、全エネルギー、およびPIOをFig. 12に示しました。2-ヒドロキシブタナールのOH基のHと H_2O のOとの間の距離は 1.715\AA で、両者間には赤色(同色)の反応軌道が広がっています。全エネルギーは -376.912608a.u. と2-ヒドロキシブタナールの生成とそれに対する H_2O の配位で、系は大きく安定化しています。

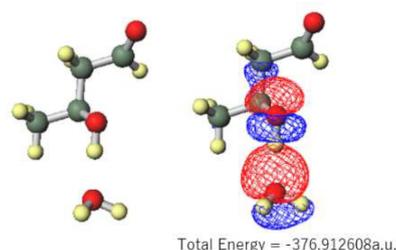
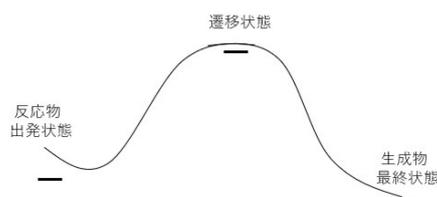


Fig. 12 最終生成状態の構造、全エネルギー、およびPIO

1.3 素反応のネットワークから成る化学反応機構

以上に述べたアルドール反応の反応機構は二つの反応(素反応)のネットワークでできています。素反応の出発状態(反応物)から遷移状態を経て最終状態(生成物)に至る経路を反応経路と云います。その概念図をいかに示しました。



遷移状態のエネルギーと出発状態のエネルギーとの差が反応の活性化エネルギーで、活性化エネルギーを知れば、反応速度を予測することができます。化学反応が進行するには

i) 生成状態が出発状態に比べて安定、すなわち、生成物のエネルギーが反応物のエネルギーに比べて負であること、ii) 活性化エネルギーが小さい(大きすぎない)ことの二つの条件が必要です。水素と酸素が通常条件では反応しないのは活性化エネルギーが非常に大きく反応の障壁を超えるのが困難だからです。そこで白金ブラックのような触媒を用いると反応障壁(活性化エネルギー)が大きく低下して室温でも激しく反応して水を生成します。

このように反応を容易に進行させるために触媒が不可欠です。

Fig. 13(a)にエノラートイオンの生成経路上の CH_3CHO と-OHの配置とPIOを、Fig. 13(b)にアセトアルデヒドとエノラートイオンの反応経路上の CH_3CHO 、エノラートイオ

ンとH₂O の配置とPIO を示しました。 Fig. 13(a)ではCH₃CHO のエネルギーを加えて全反応経路の全エネルギーの整合性を取っています。

Fig. 13(a)で見られるように、CH₃CHOと-OHはstate 1 からstate 2 への軽い吸着状態（物理吸着）を経て、アセトアルデヒドのCH₃ の

H が少し解離したstate 3 からH の大きく解離したstate 4 を経て、ほぼエノラートイオンの生成状態のstate 5 から生成状態のstate 6 へ至る△E がS 字を描く反応経路を得ることができました。遷移状態はstate 3 とstate 4の間にあると推定できます。

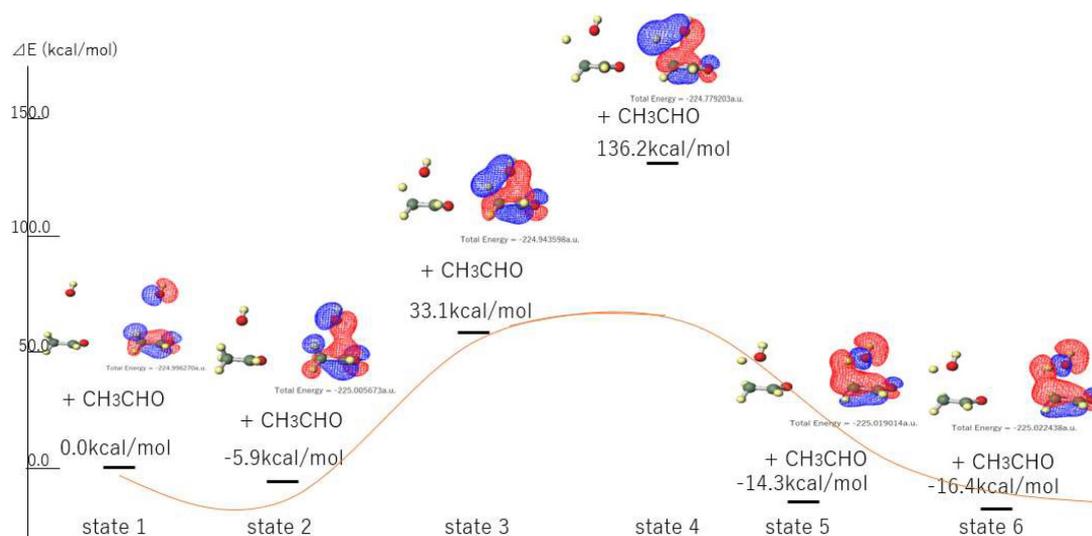


Fig. 13(a) CH₃CHO と-OH の配置とPIO

Fig. 13(b)ではCH₃CHO とエノラートイオンがstate 7から軽い吸着状態のstate 8, state 9の後, state 10 からstate 11 のH₂O の配位した2-オキシブタナールイオンへ至る△E が非常に浅いS 字を描く反応経路を得ることができました。遷移状態はstate 10 とstate 11 の間にあると推定できます。さらにstate 11 にH⁺を付加して構造最適化を行い、

最終生成物の水の配位した2-ヒドロキシブタナールを得ることができました。この最終段階のH⁺による中和反応は反応障壁無しで進行します。

Fig. 13(a)と Fig. 13(b)を通してアルドール反応機構（全反応経路図）をFig. 14 に示します。

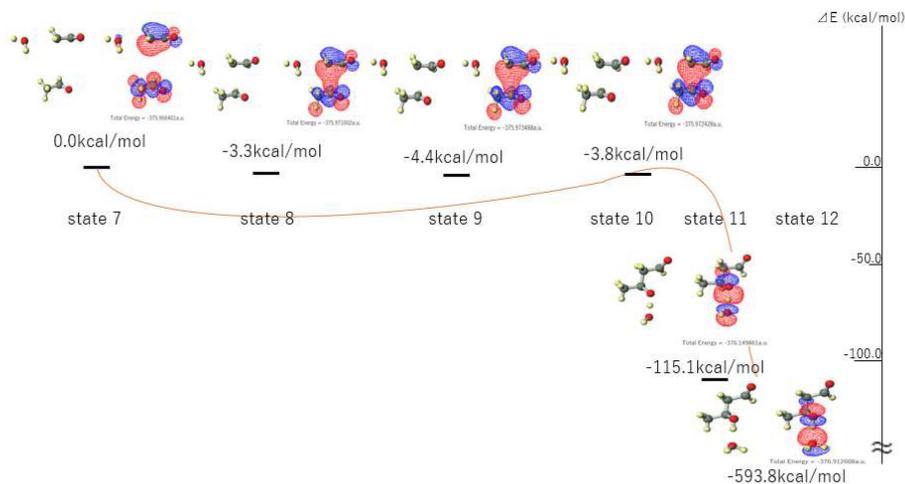


Fig. 13(b) CH₃CHO, エノラートイオンとH₂O の配置とPIO

化学反応機構は素反応のネットワークで構築されています。以上に述べたように、各素反応をポテンシャルエネルギー曲面上での反応経路ネットワークとして表現することで反応にあずかる分子の変形を観察することができ、その分子の変形のPIOを描くことで分子の振舞いを電子の軌道の相互作用として理解できることがお分かりいただけたと思います。

今後の予定

今後、以下の代表的な化学反応について反応機構をPIOで表現していきます。

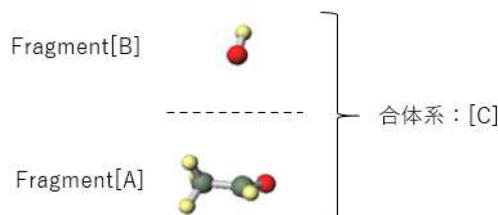
ハロアルカンの求核置換反応(SN-2反応), アルケンへの求電子的付加反応(マルコウニコフ則), クライゼン反応, 芳香族求電子置換反応, アルケンへの求電子的付加反応(酸触媒によるプロピレンの水和), 酸触媒によるエステル交換反応, Robinson環化反応, 等々。

APPENDIX

1) PIOの計算手順

PIOの計算手順

- i) モデル(合体系[C])をFragment [A]とFragment [B]に分割し、C、A及びBの分子軌道を求める。



- ii) Cの分子軌道の被占軌道部分をA及びBの分子軌道(被占軌道群と空軌道群)を用いて展開する。

$$\Phi_f = \sum_{i=1}^m c_{i,f} \phi_i + \sum_{j=1}^{M-m} c_{m+j,f} \phi_{m+j} + \sum_{k=1}^n d_{k,f} \psi_k + \sum_{l=1}^{N-n} d_{n+l,f} \psi_{n+l},$$

$$f = 1, 2, \dots, m+n,$$

- iii)

$$\sum_{i=1}^m c_{i,f}, \quad \sum_{j=1}^{M-m} c_{m+j,f}, \quad \sum_{k=1}^n d_{k,f}, \quad \sum_{l=1}^{N-n} d_{n+l,f}$$

, , , を使って相互作用表現行列:Pをつくる。

$$P = \begin{pmatrix} p_{i,k} & p_{i,n+l} \\ p_{m+j,k} & p_{m+j,n+l} \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} p_{i,k} = n_{t,u} \sum_{f=1}^{m+n} c_{i,j} d_{k,f} \quad i=1 \sim m, k=1 \sim n \\ p_{i,n+l} = n_{t,u} \sum_{f=1}^{m+n} c_{i,j} d_{n+l,f} \quad i=1 \sim m, l=1 \sim N-n \\ p_{m+j,k} = n_{t,u} \sum_{f=1}^{m+n} c_{m+j,j} d_{k,f} \quad j=1 \sim M-m, k=1 \sim n \\ p_{m+j,n+l} = n_{t,u} \sum_{f=1}^{m+n} c_{m+j,j} d_{n+l,f} \quad j=1 \sim M-m, l=1 \sim N-n \end{array}$$

iv) 変換行列 U_A (for A), U_B (for B) と N 個の固有値 v を求め, PIO を求める.

$$\phi'_v = \sum_r^N U^A_{r,v} \phi_r \quad (\text{for A})$$

$$\psi'_v = \sum_s^N U^B_{s,v} \psi_s \quad (\text{for B})$$

これで合体系の $N \times M$ ($N \leq M$) 個の軌道相互作用が N 組の相互作用軌道対に変換される.

2) Winmoster 上での PIO 計算

- i) 合体系[C]をモデリングする.
- ii) 画面上で[C]をFragment[A]とFragment[B]に分割する.
- iii) 画面上部にあるQM ボタン→PIO ボタンをクリック.
- iv) PIO 操作小窓のSet→Save をクリック, multiplicity はいずれも1 のままで[A]と[B]の charge の計を[C]のそれと一致させる.
- v) 小窓のGauss ボタンをクリック.
- vi) 小窓のPIO ボタンをクリック.
- vii) 小窓のMO ボタンをクリック, Gaussian MO Plot の小窓が出る.
- viii) Gaussian MO Plot の小窓の 3D をクリックすると PIO 画面が表示される. _