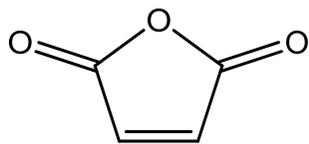


Spartanワークショップ演習

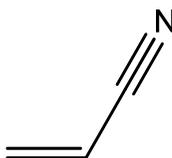
平衡構造



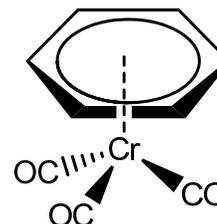
無水マレイン酸



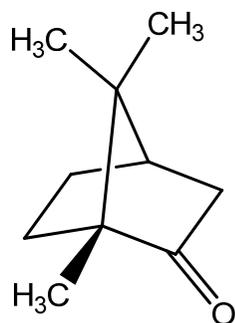
チオフエン



アクリロニトリル

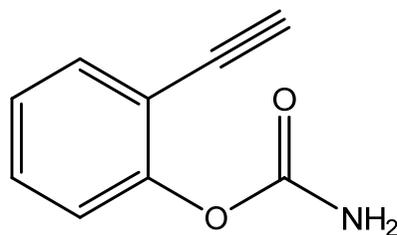


ベンゼンクロミウムトリカルボニル

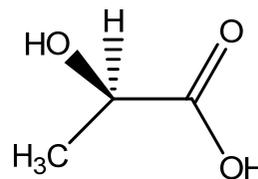


ショウノウ

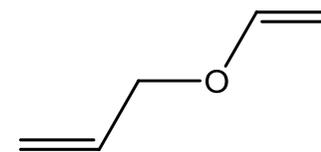
配座解析



エチナメート

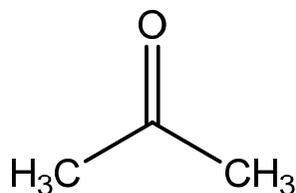


乳酸

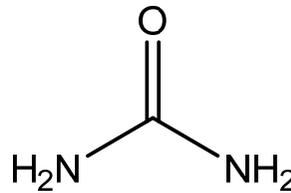


アリルビニルエーテル

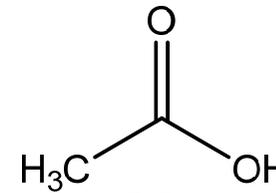
IR 振動計算



アセトン



尿素

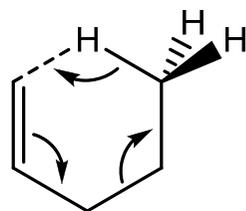


酢酸

遷移構造

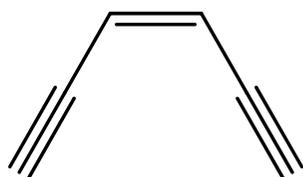


エチレンとブタジエンの
Diels-Alder 反応

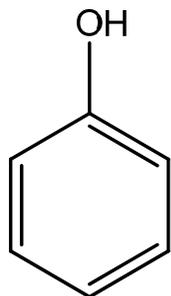


1-ペンテンのエン反応

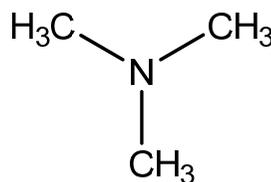
DB検索用フラグメント



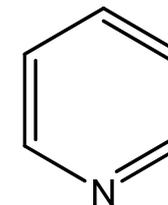
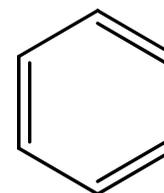
ヘキサ-3エン-1.5ジイン



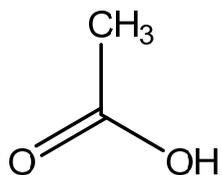
モルヒネの検索
フェノールとトリメチルアミン



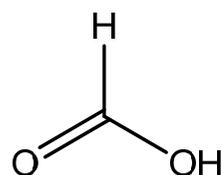
グラフィックス



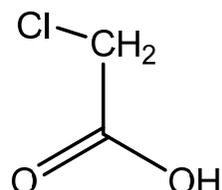
ベンゼンとピリジン



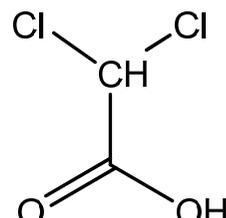
酢酸
pKa:4.75



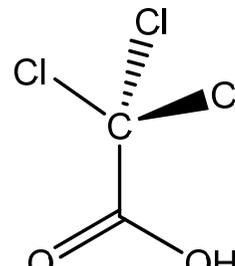
ギ酸
pKa:3.75



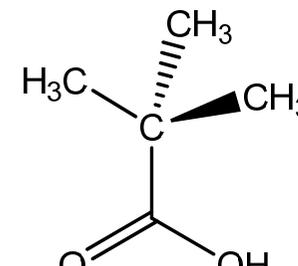
クロロ酢酸
pKa:2.85



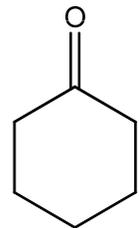
ジクロロ酢酸
pKa:1.48



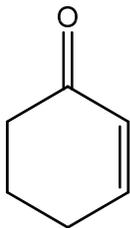
トリクロロ酢酸
pKa:0.7



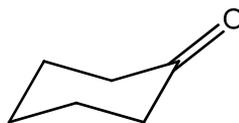
ピバル酸
pKa:5.03



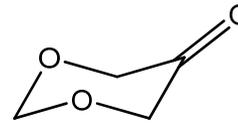
シクロヘキサノン



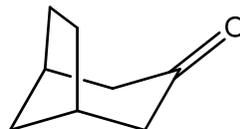
2-シクロヘキサノン



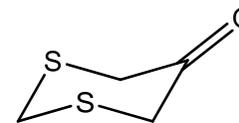
シクロヘキサノン



1,3-ジオキサン-5-オン

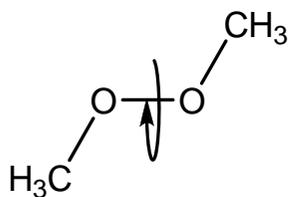


バイシクロ[3.2.1]オクタン-3-オン

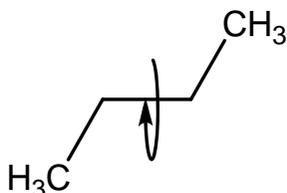


1,3-ジチアン-5-オン

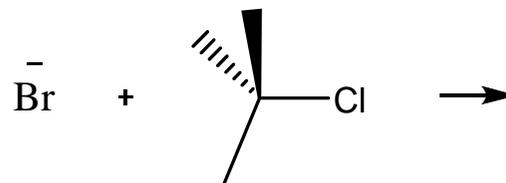
プロフィール



ジメチルパーオキサイド

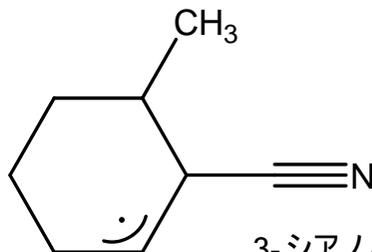


n-ブタン



塩化メチルと臭化物イオンの S_N2

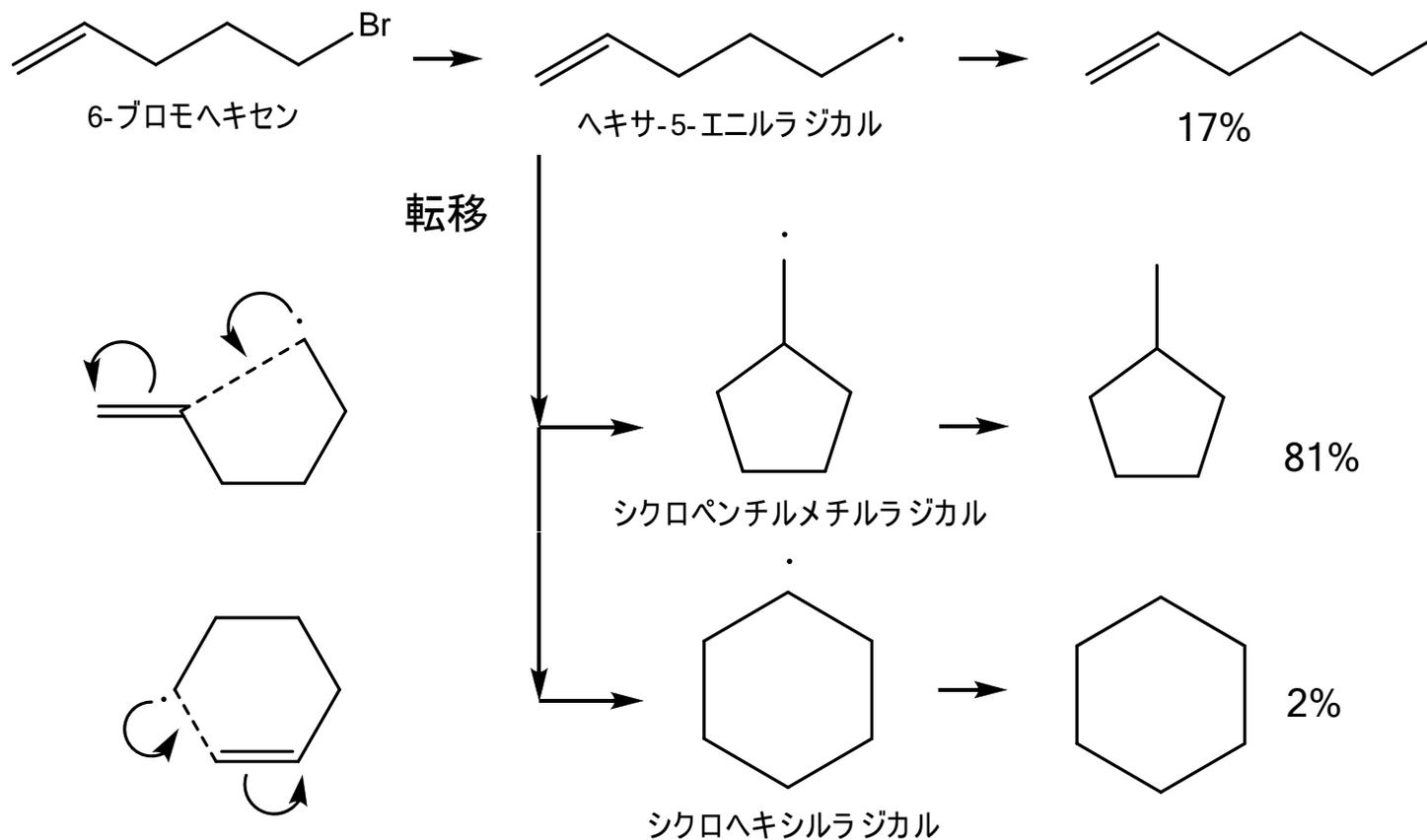
複合した 計算の設定



3-シアノ-4-メチルシクロヘクシニルラジカル

MMFFによる配座解析
AM1構造最適化
HFエネルギー

総合演習



生成物のエネルギー差から、熱力学支配の可能性
遷移状態のエネルギーから速度論支配の可能性を
検討してください