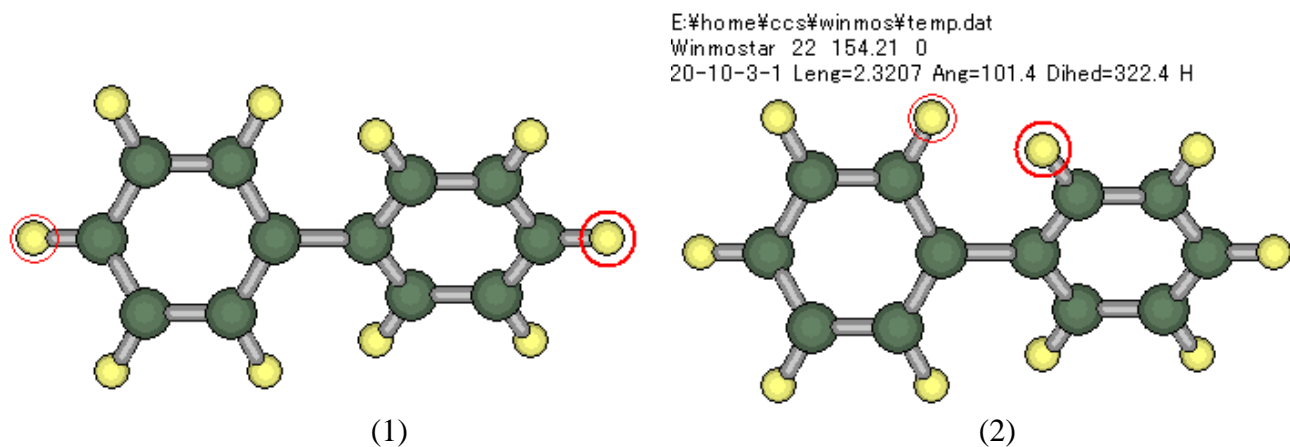
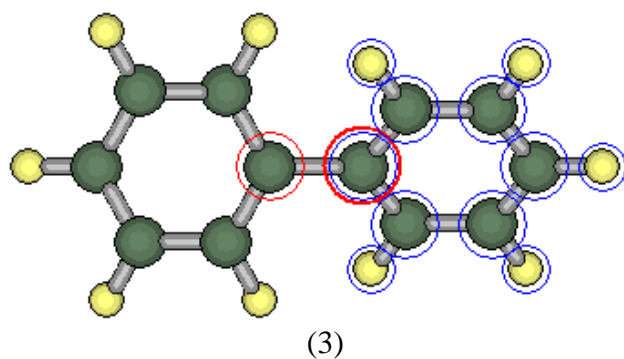


演習 6.2

初期画面で部品[-C6H5]が選択されている状態で[Rep]を2回押すと、ビフェニルができます(1)。結合距離、結合角度、二面角の情報は、画面上部の分子情報に表示されています(2)。



二原子を指定して編集 / 部分回転でねじれ角を変更した後、*o*-水素原子間距離を確認します(3)。



biphenyl_am1_rot.datを使用して、演習4.3と同様な方法でビフェニルの回転障壁が計算できます。