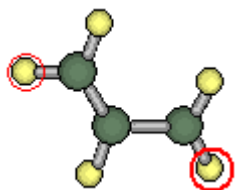
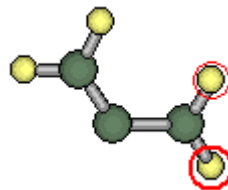


## 演習 6 . 4

初期画面で部品 [-C2H3] を選択して置換します。部品 [-CH2] を選択して置換します(1)。余分な水素を1個削除します(2)。

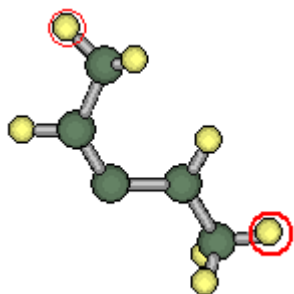


(1)

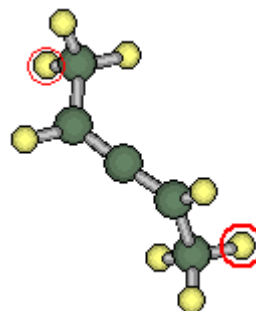


(2)

[-CH3] で水素の 2 個を置換します(3)。クリーンで整形します(4)。

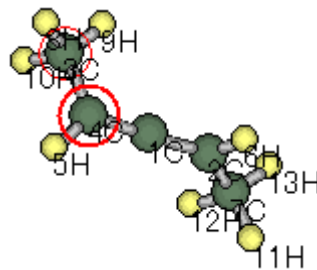
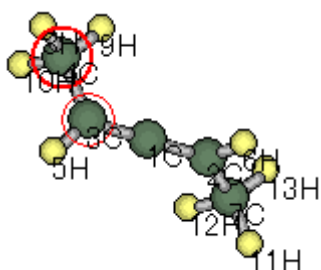


(3)



(4)

(4) の構造でMOPAC計算を行うと、  
ATOMS 3, 1, AND 2 ARE WITHIN .0030 ANGSTROMS OF A STRAIGHT LINE  
のようなエラーが出ることがあります。これは、3番原子が1, 2番原子に対して直線になってZ座標での指定ができなくなるためです。これを回避するために、3番原子と4番原子を指定して、番号交換をします。



編集 / その他 / 座標反転でエナンチオマーができることを確認します。  
編集 / 元に戻す、で元に戻すことができます。



表示 / 3Dで、3D画面が立ち上がります。

View / PreferencesでEnantiomerにチェックすると、真ん中に鏡を置いたような表示になります。

