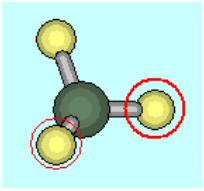
ヘテロ原子の導入　－　N-メチルアセトアミド

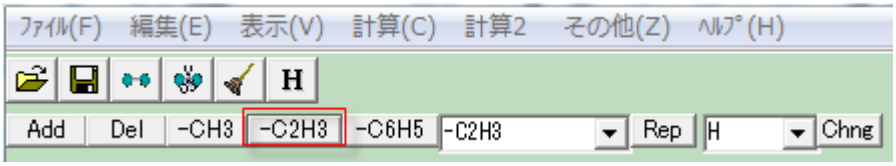
1.　N-メチルアセトアミドの構造の作成

i.　ファイルメニューから、「新規」を選択する。

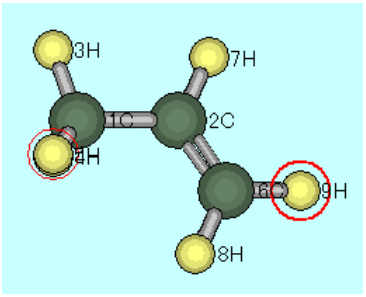
ii.　（－CH3 ボタンをクリックし、）画面中央の炭素（暗緑色の部分）を右クリックすると、CH_4 が表示される。



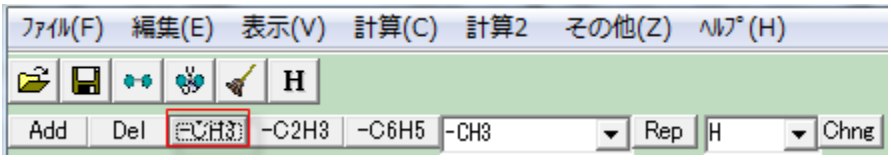
iii. －C2H3 ボタンをクリックする。



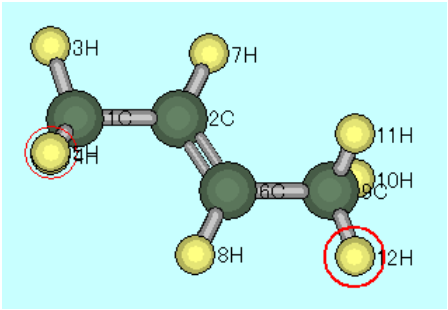
iv. 水素を右クリックすると、プロペンが表示される。



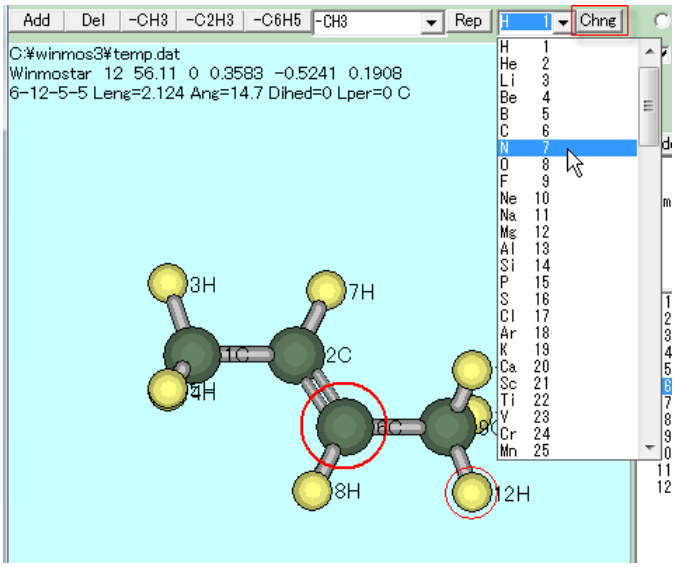
v.　－C2H3 ボタンをクリックする。



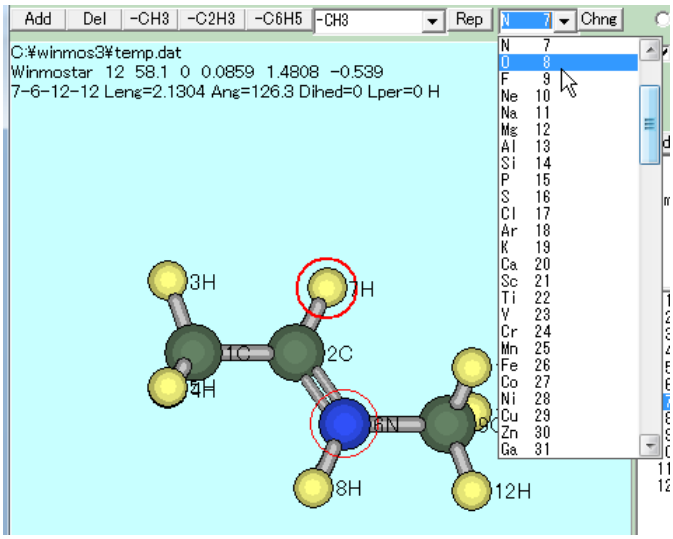
vi. 9H の水素を右クリックすると、trans-2-ブテンが表示される。



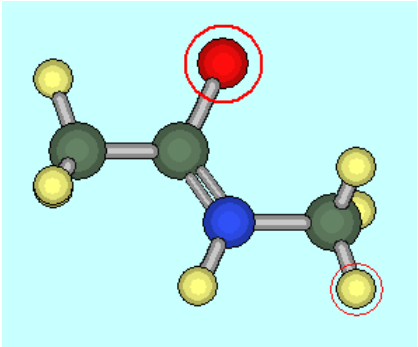
vii. 6 C 炭素をクリックして選択する。元素プルダウンメニューから N（窒素）を選んだ後 **Chng**.ボタンをクリックする。



viii. 7 H 水素をクリックして選択する。元素プルダウンメニューから O（酸素）を選んだ後、Chng.ボタンをクリックする。



ix.　N-メチルアセトアミドの構造が作成された。



2.　Z-Matrix の編集

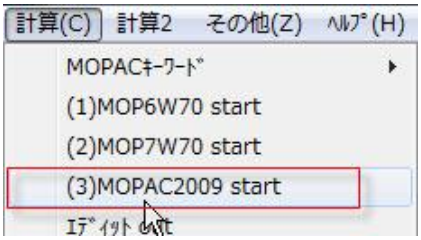
i. MOPAC 計算のキーワードのテキストエリアの 1 行目を「PM3 EF PRECISE MMOK」とする。（この分子はアミド結合を有するので、 キーワード「MMOK」を追加する。）

ii. コメント行（3 行目）にタイトル等を入力する。

x. ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択し、「N-MeAcetoamide.dat」という名前を付けて保存する。

3.　計算の実行

i. 計算メニューから、「(3)MOPAC 2009 start」を選択し、計算を開始する。



xi.　計算が終了すると、計算結果を書き出したファイル「N-MeAcetoamide.out」が開かれる。

（木原　寛）