

Winmostar V11
SoluVision 利用向けマニュアル

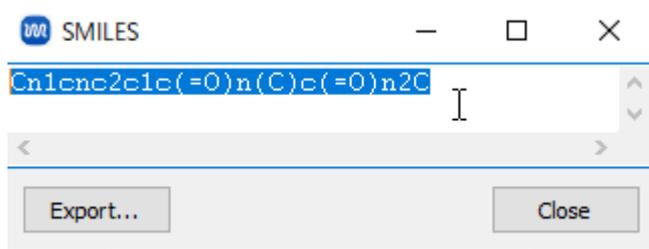
令和 7 年 5 月 12 日
株式会社クロスアビリティ

本書では Winmostar V11.12.0 を用いて、株式会社 Material Doors の SoluVision を利用する手順を示します。

なお、本書の作成において株式会社 Material Doors にご協力頂きました。

1. Winmostar の操作方法

- ① 通常と同様に Winmostar をインストールします。インストール手順は <https://winmostar.com/jp/installation/> に従います。手順 7 以降の実施は不要です。
- ② Winmostar を起動します。
- ③ **ファイル | 新規プロジェクト** をクリックし、**プロジェクト名** を入力し **OK** をクリックします。
- ④ 計算したい分子の構造を作成します。構造の作成方法の例は分子モデリングチュートリアル有機分子編 https://winmostar.com/jp/tutorials/MolecularModeling_tutorial_1_%28OrganicMolecules%29.pdf 詳細はユーザマニュアル https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/operation/createsystem.html で確認できます。ひとまずサンプルデータで計算したい場合は **ファイル | インポート | Samples ファイル | caffeine.dat** をクリックし **破棄して読み込み** をクリックします。
- ⑤ **ファイル | エクスポート | SMILES** をクリックします。「水素原子を補完してから SMILES を生成しますか？」と表示されたら **いいえ** をクリックします。
- ⑥ **SMILES** ウィンドウが開いたら出現した SMILES 文字列を選択し右クリックで **コピー** をクリックします。



2. SoluVision の操作方法

① 通常と同様に SoluVision

<https://app.soluvision.material-doors.com/login/>

にアクセスし、ログインします。

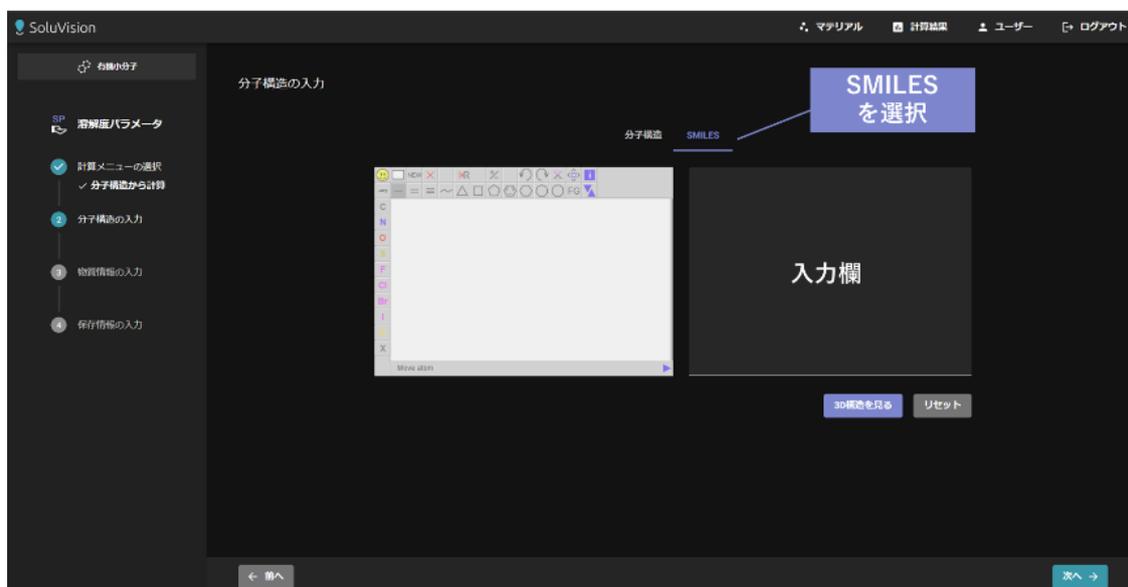
アカウントをお持ちでない方は、**新規登録はこちら**からお進みください。*

※ 2025 年 4 月末現在、溶解度パラメータ推定機能は有料プラン限定の機能となりますが、

新規登録で 2 週間の無料トライアルが可能です。

② 溶解度パラメータの計算

- ・ トップページから、**有機小分子**>**溶解度パラメータ**>**分子構造**とクリックし、構造入力画面を開きます。
- ・ 入力方法で **SMILES** を選択後、入力欄を右クリックし、1. ⑥でコピーした SMILES 文字列を貼り付けます。
- ・ **3D 構造を見る**をクリックし、入力した SMILES が想定した構造であることを確認し、**閉じる**をクリックします。



- ・ **次へ**をクリックし、物質情報の入力を行います。
- ・ **次へ**をクリックし、計算名およびコメントの入力を行います。
- ・ **計算開始**をクリックし、計算を実行します。

なお、詳細は SoluVision ポータルサイトである溶解度パラメータ.com

<https://www.soluvision.material-doors.com/portal/articles/software-calculation/>

で確認できます。

③ 結果の確認

- ・ 計算開始後、**結果画面**へをクリックする、またはトップページ右上の**計算結果**をクリックすることで結果画面へ遷移します。
- ・ 左側の結果一覧から**結果**を選択します。
- ・ 画面右側に計算された溶解度パラメータが表示されます。

The screenshot displays the SoluVision software interface. On the left, a sidebar shows a list of results under the heading '結果一覧' (Result List). A blue callout box points to a result entry with the text '詳細を見たい結果をクリック' (Click the result you want to see in detail). The main area features a 3D plot with axes labeled dH, dD, and dP. A blue callout box points to a data point on the plot with the text '推定された溶解度パラメータ' (Estimated dissolution parameters). On the right, a panel shows the molecular structure of a compound, with a blue callout box pointing to it. Below the structure, the estimated parameters are listed: dD: 19.5, dP: 10.1, dH: 13.0. There are buttons for '3D構造を見る' (View 3D structure), '溶解を探索する' (Explore dissolution), and '精製方法を探索する' (Explore purification methods).

以上