

 winmostar チュートリアル

分子モデリング 有機分子編

V11.1.0

2025年7月2日

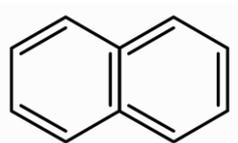
株式会社クロスアビリティ

本書について

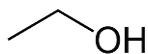
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

概要

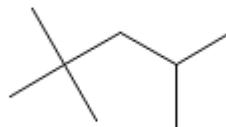
- Winmostarでは以下に示す4つの方法で有機分子を作成することができます。
 - ① 構造式を入力
 - ② SMILESを読み込み
 - ③ 他のソフトで作成したファイル、各種のデータベースから取得したファイルを読み込み
 - pdb, mol, mol2, cif, xyz, sdfなどのフォーマットに対応
 - ④ 3次元の分子構造を直接モデリング
- 本チュートリアルでは、以下の分子を例に各方法を紹介します。



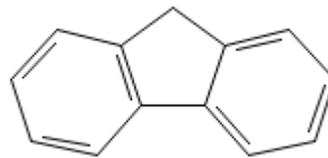
Naphthalene
 $C_{10}H_8$



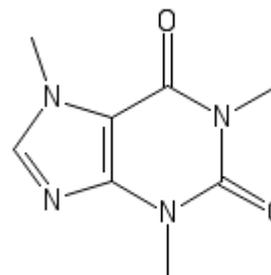
Ethanol
 C_2H_6O



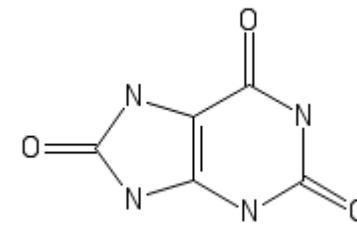
Isooctane
 C_8H_{18}



Fluorene
 $C_{13}H_{10}$



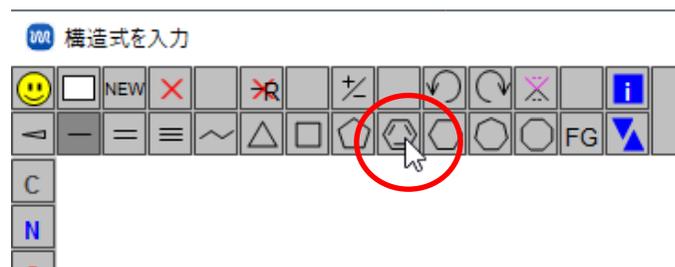
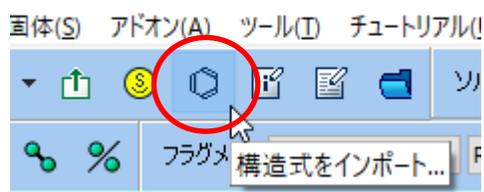
Caffeine
 $C_8H_{10}N_4O_2$



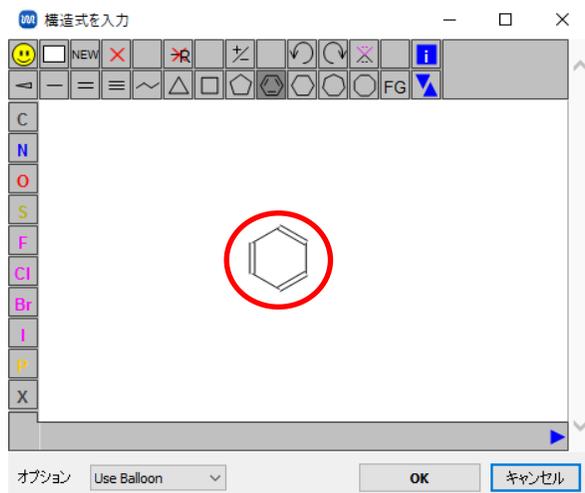
Uric acid
 $C_5H_4N_4O_3$

I. 構造式を入力 (Naphthalene)

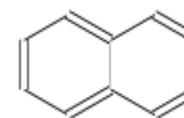
1. **ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセット**をクリックします。
2.  **構造式をインポート**をクリックし、フェニル基のボタンをクリックします。



3. ウィンドウ中央付近をクリックするとベンゼン環が出現します。

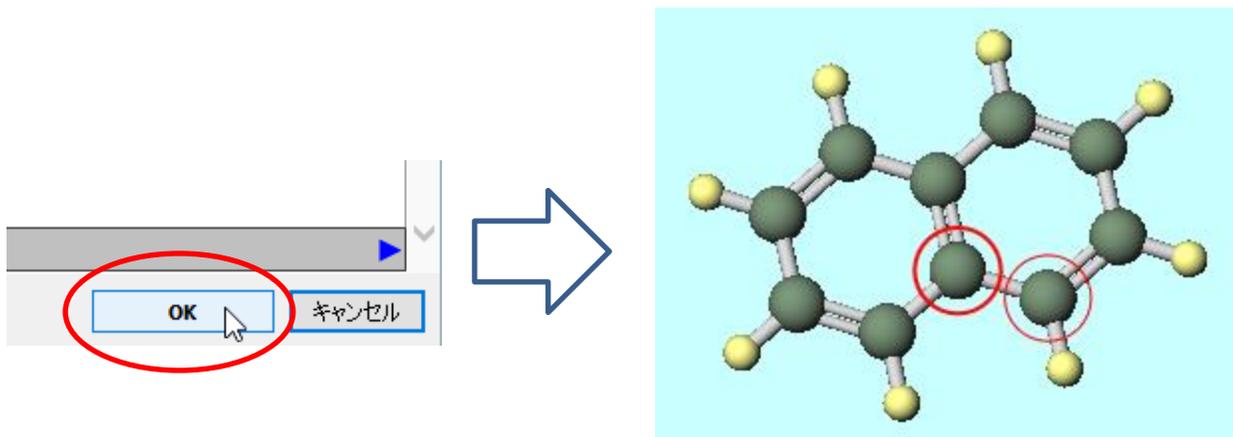


4. ベンゼンの結合のうちどれか一つをもう一回クリックすると、ナフタレンになります。



I. 構造式を入力 (Naphthalene)

5. ウィンドウの右下の**OK**をクリックすると、ナフタレンの3次元構造が出現します。



II. SMILESを読み込み (Ethanol)

EthanolのWikipediaからSMILES文字列 (大文字でCCO) をコピーします。(SMILESは仕様上大文字小文字を区別するので注意)

エタノール 5A 117の言語版

ページ ノート 閲覧 編集 履歴表示 ツール

出典: フリー百科事典『ウィキペディア (Wikipedia)』

「メタノール」とは異なります。

エタノール (英: ethanol) は、アルコールの一種。揮発性の無色液体で、特有の芳香を持つ^[2]。別名はエチルアルコール (ethyl alcohol)。酒を酒たらしめる化学成分であり、**酒精** (しゅせい) とも呼ばれる^[2]。その分子は、油になじみやすいエチル基 CH₃CH₂- と水になじみやすいヒドロキシ基 -OH が結合した構造を持つ。

メタノールなど、他のアルコールが知られる以前から広く用いられてきた物質であり、エチルアルコールを指して単に「アルコール」と呼ぶことも多い。例えば、**アルコール発酵**で生じるアルコールはエタノールであり、アルコール飲料に含まれるアルコールもエタノールである。変性アルコールは、飲用への転用を防ぐために、毒性の強いメタノールや苦味の強いイソプロパノールが添加されたエタノールである^[3]。

発酵により生じたエタノールを蒸留・精製すると、純度が93% (質量パーセント濃度) ^[注釈 1]のエタノールが得られる。残りの7%は水分である。この水分を化学処理で取り除いて、エタノールの純度を99.5%以上にまで高めたものが、無水エタノール (absolute ethanol または anhydrous ethanol) である。

エタノール	
$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	
IUPAC名	[表示]
別称	[表示]
識別情報	
CAS登録番号	64-17-5 [▼]
ChemSpider	682 [↗]
KEGG	C00469 [↗]
RTECS番号	KQ6300000
SMILES	[表示]
特性	

識別情報	
CAS登録番号	64-17-5 [▼]
ChemSpider	682 [↗]
KEGG	C00469 [↗]
RTECS番号	KQ6300000
SMILES	[表示]



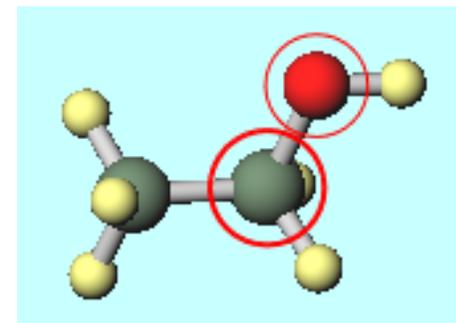
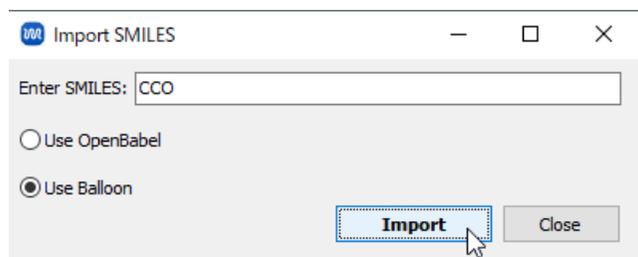
識別情報	
CAS登録番号	64-17-5 [▼]
ChemSpider	682 [↗]
KEGG	C00469 [↗]
RTECS番号	KQ6300000
SMILES	[隠す]
CCO	

II. SMILESを読み込み (Ethanol)

1. ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセットをクリックします。
2.  SMILESをインポートをクリックしEnter SMILESにSMILES文字列をペーストします。

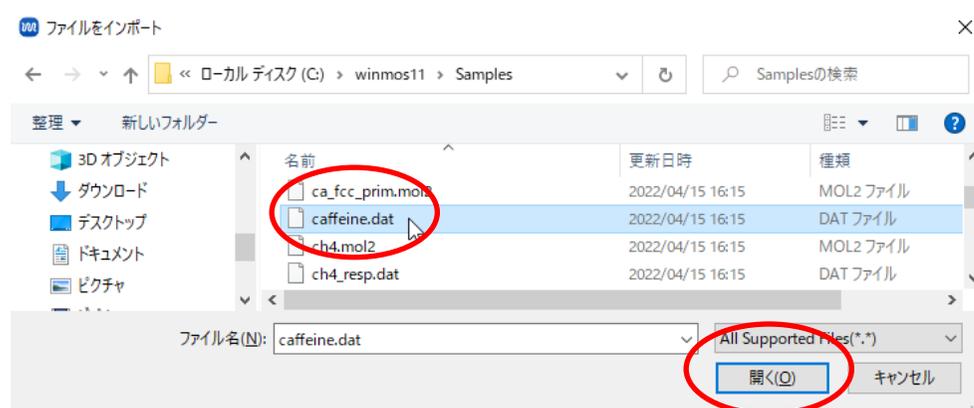
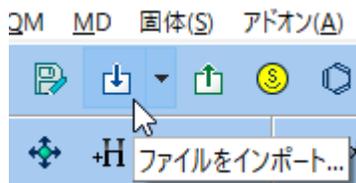


3. **Import**をクリックし**OK**をクリックするとEthanolの3次元構造が出現します。



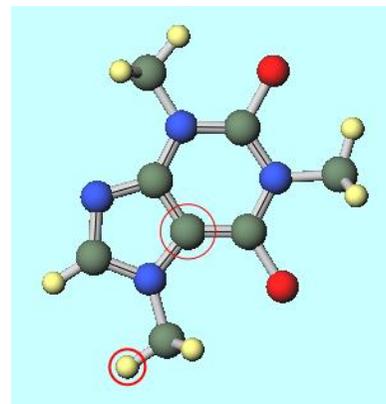
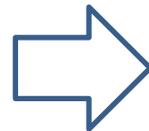
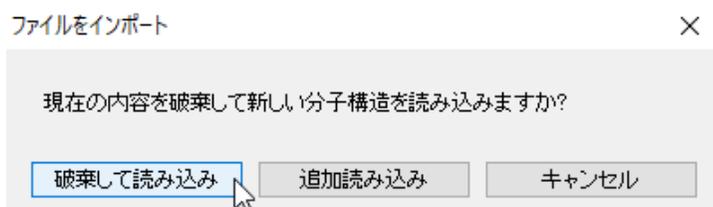
III. ファイルを読み込み (Caffeine)

1. ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセットをクリックします。
2.  ファイル | ファイルをインポートをクリックし、1階層上のSamplesフォルダのcaffeine.datを選択し開くをクリックします。

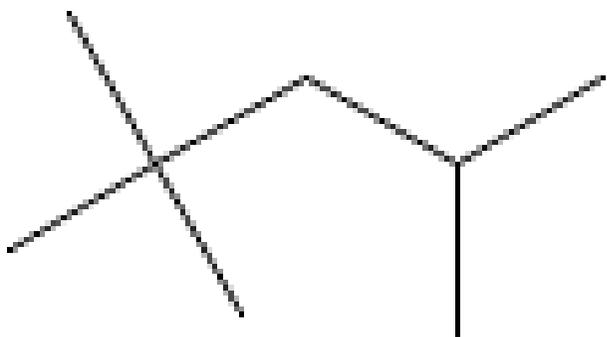


※エクスプローラからファイルをWinmostarにドラッグアンドドロップしても同様の操作が可能です。

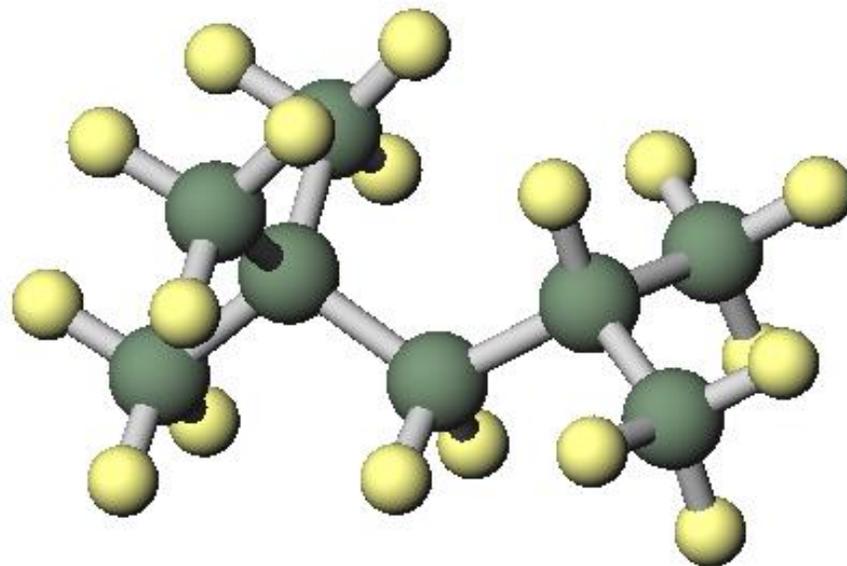
3. 破棄して読み込みをクリックするとCaffeineの3次元構造が出現します。



IV. 直接モデリング (Isooctane)



構造式

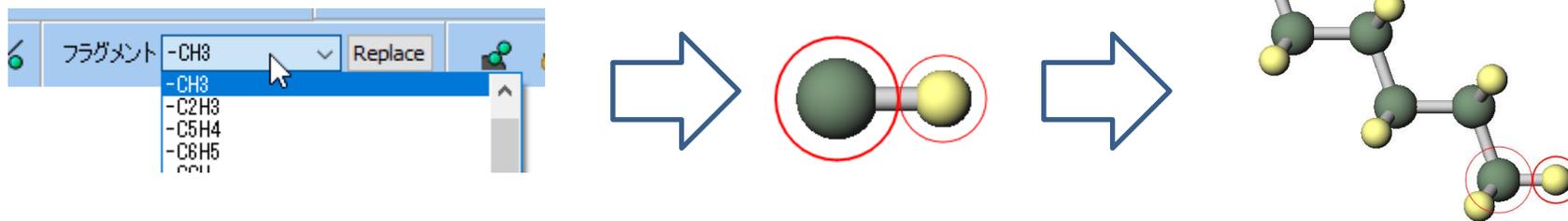


3Dモデル

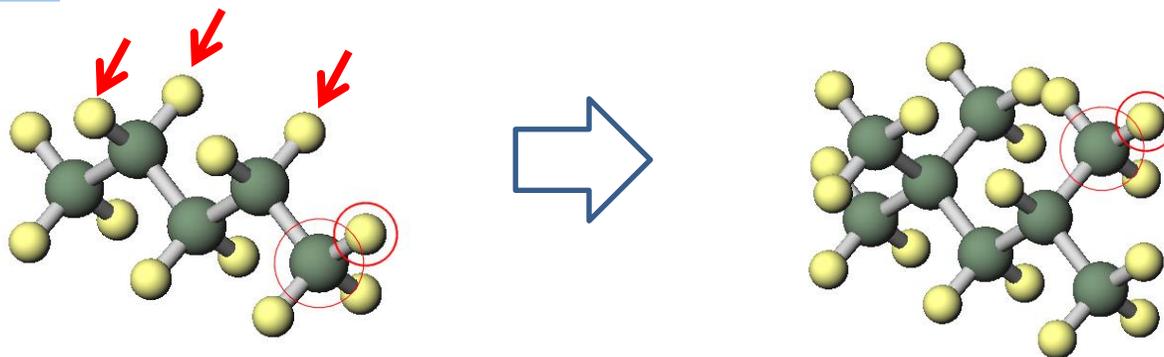
IV. 直接モデリング (Isooctane)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

1. **ファイル** | **新規ファイル**、**新規プロジェクト**または**編集** | **構造をリセット**をクリックします。
2. **フラグメント**で「-CH3」を選択し **Replace** **フラグメントで置換**を5回クリックするとn-pentaneが作成されます。



3. 適度にドラッグしてカメラアングルを変更した後、下図の矢印の3つのH原子に対し、原子をクリックしてから **Replace** **フラグメントで置換**をクリック、を繰り返すとIsooctaneが作成されます。

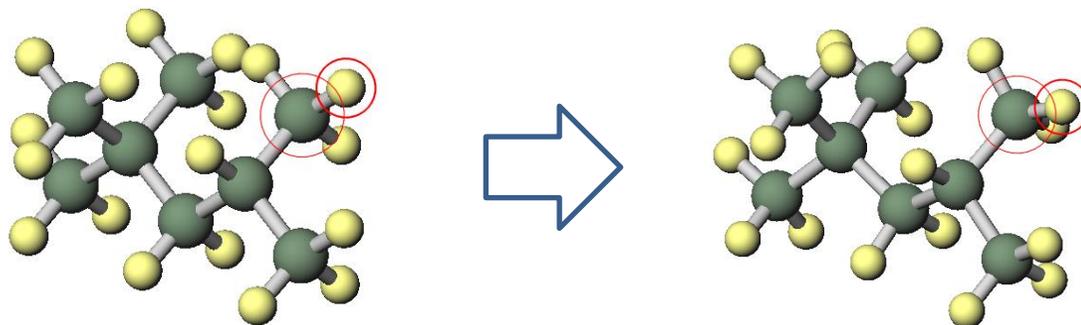


※原子を直接Shift+Ctrl+右クリックすると、フラグメントで置換と同等の操作を簡単に実行できます。

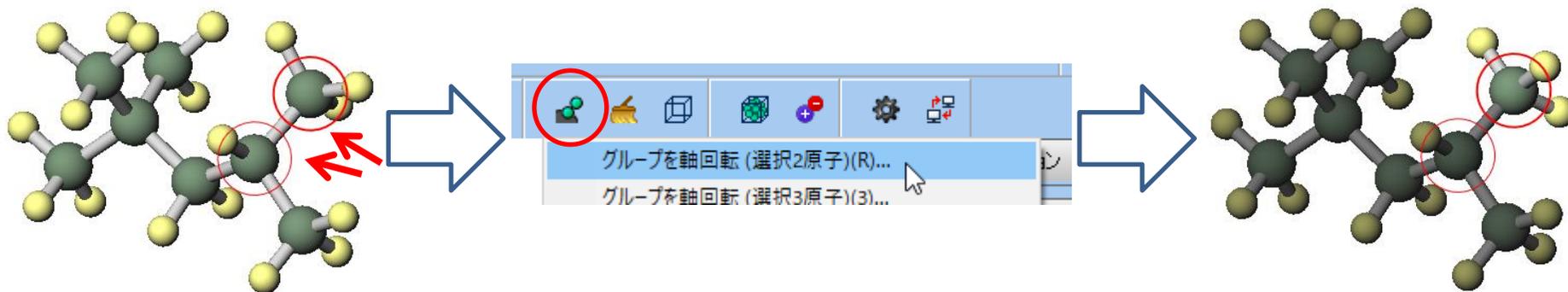
IV. 直接モデリング (Isooctane)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

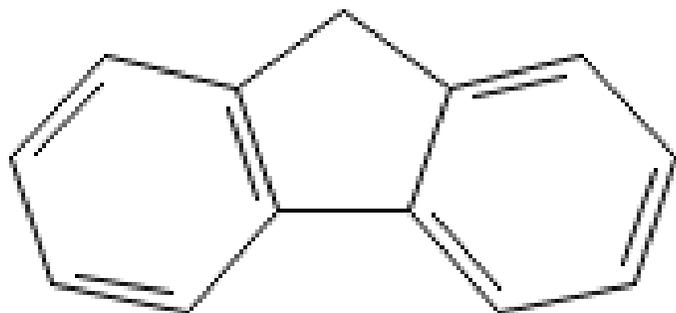
4.  **簡易構造最適化**をクリックすると、ある程度妥当な結合長・角に自動調整されます。



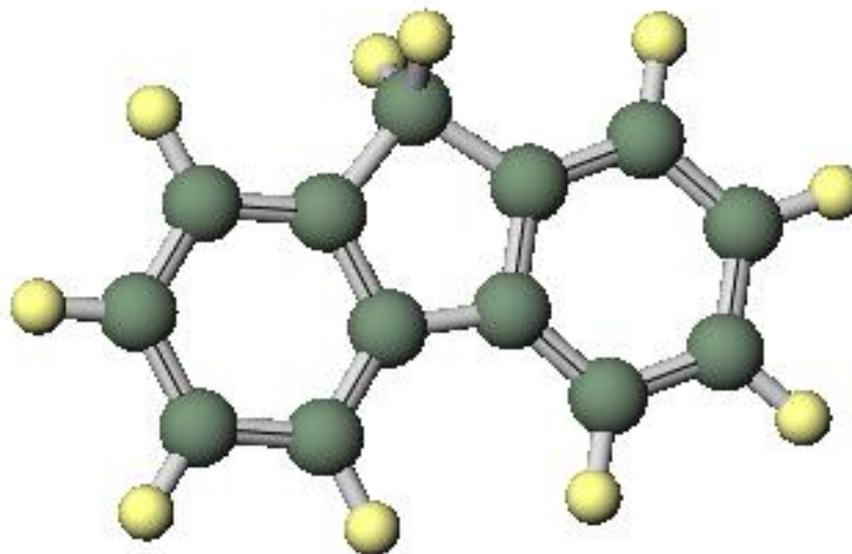
5. 明示的に二面角を回転させたい場合は、回転させたい結合の両端の原子を続けてクリックし、 **グループ編集 | グループを軸回転 (選択2原子)** をクリックします。そして分子構造の上でドラッグすると二面角が回転します。



V. 直接モデリング (Fluorene)



構造式

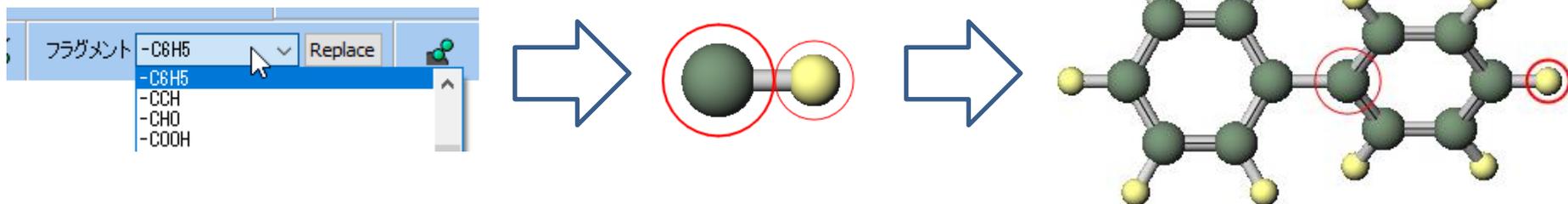


3Dモデル

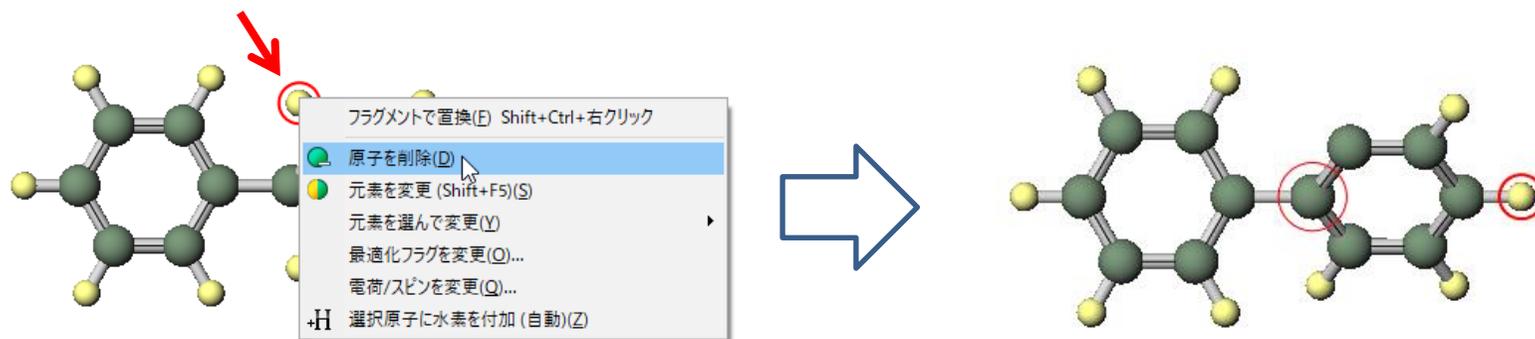
V. 直接モデリング (Fluorene)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

1. **ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセット**をクリックします。
2. **フラグメント**で「-C6H5」を選択し **Replace** **フラグメントで置換**を2回クリックするとBiphenylが作成されます。



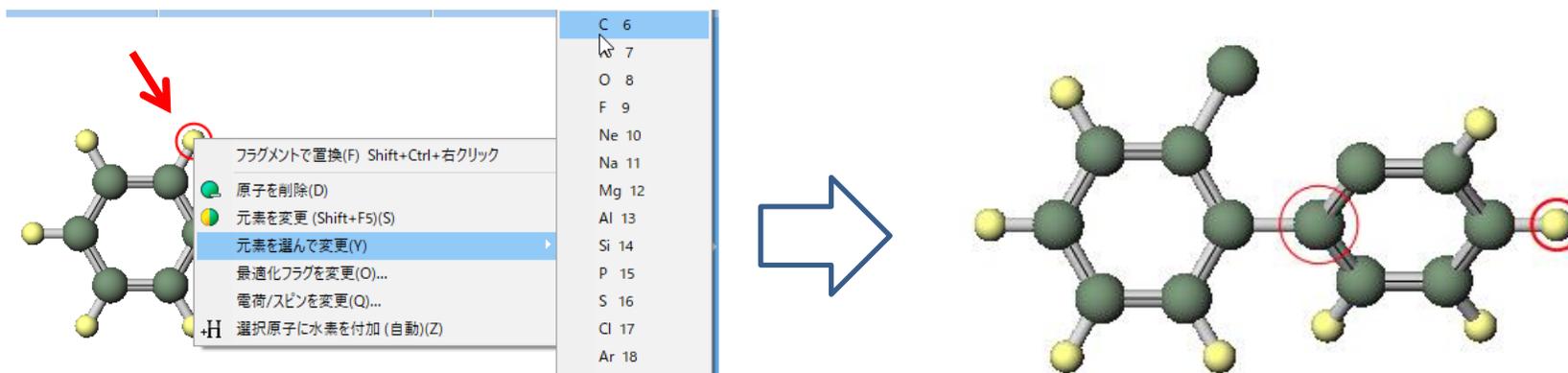
3. 下図の水素を右クリックし**原子を削除**をクリックします。



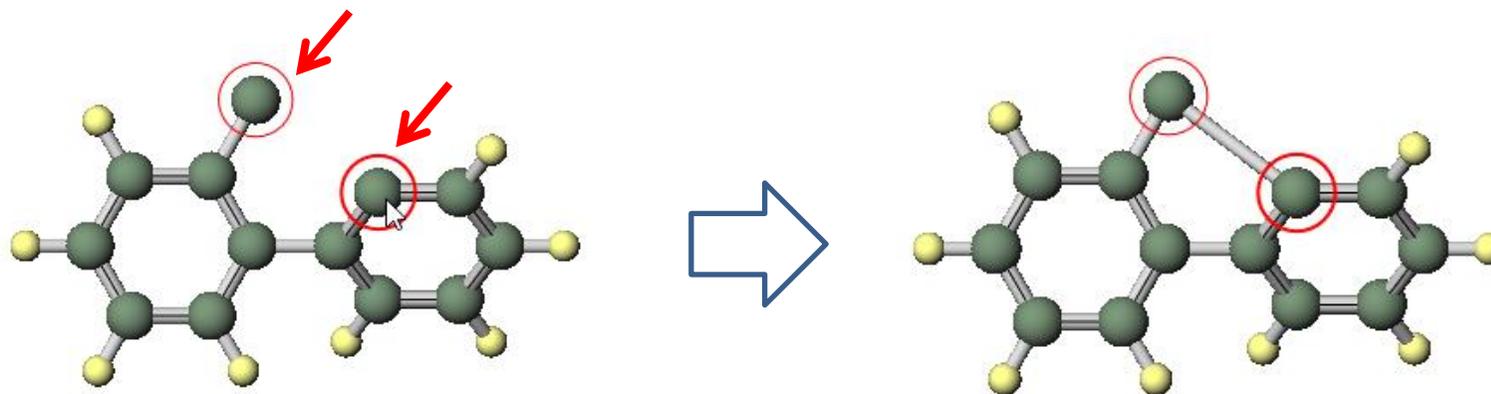
V. 直接モデリング (Fluorene)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

4. 下図の水素を右クリックし**元素を選んで変更** | **C 6**をクリックします。

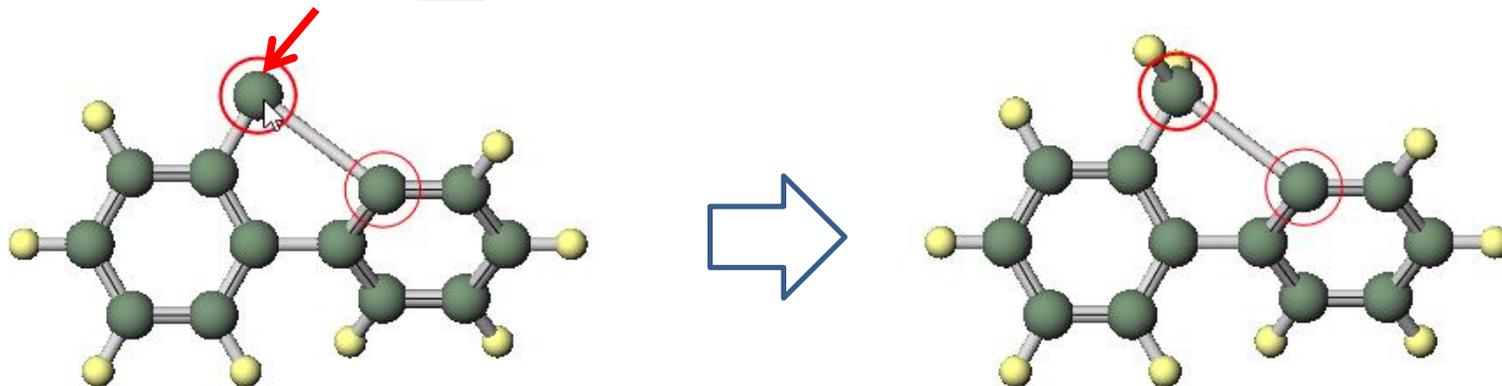


5. 下図の矢印の2つの炭素を続けてクリックし  **結合を付加/変更**をクリックします。

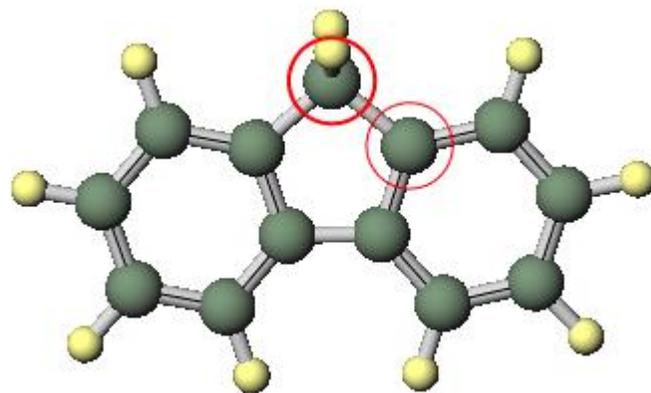


V. 直接モデリング (Fluorene)

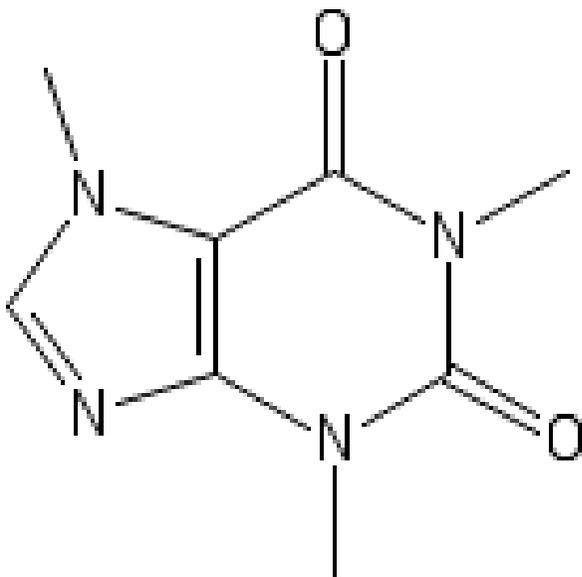
6. 下図の炭素をクリックし **+H** 選択原子に水素を付加を2回クリックします。



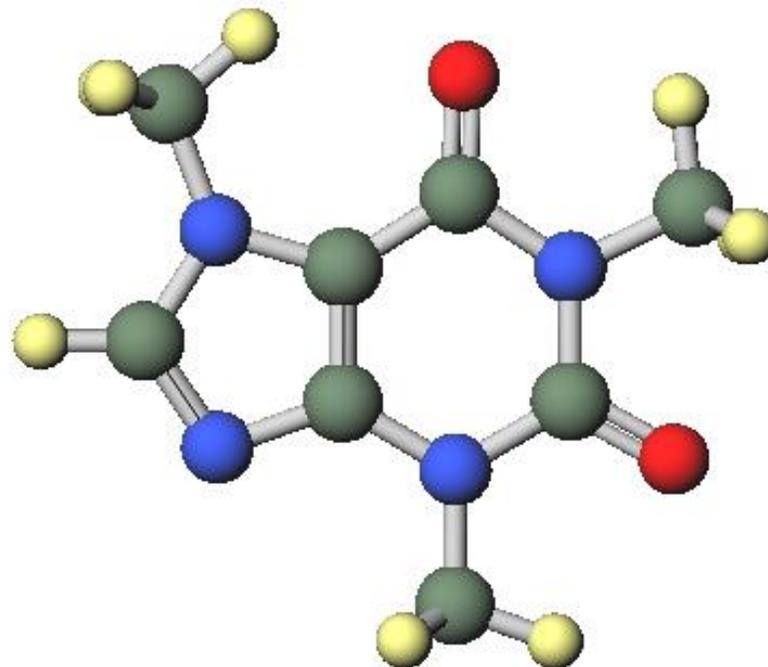
7.  **簡易構造最適化**をクリックすると、ある程度妥当な結合長・角に自動調整されます。



VI.直接モデリング (Caffeine)



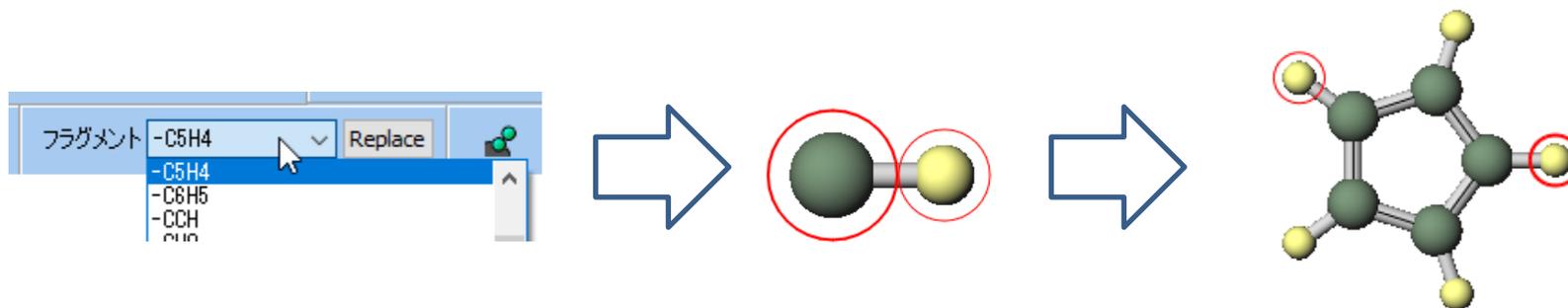
構造式



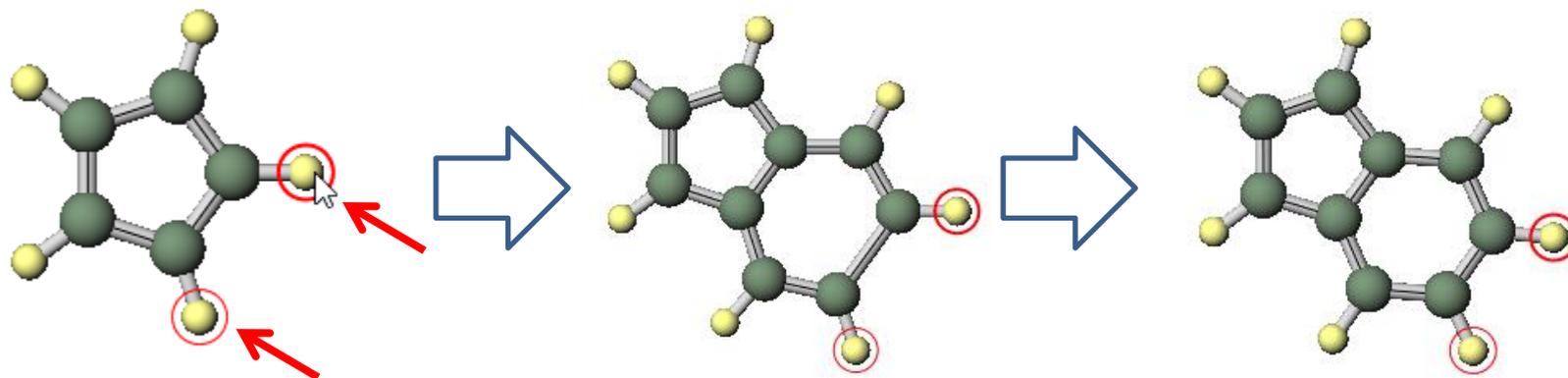
3Dモデル

VI. 直接モデリング (Caffeine)

1. ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセットをクリックします。
2. フラグメントで「-C5H4」を選択し **Replace** フラグメントで置換をクリックします。



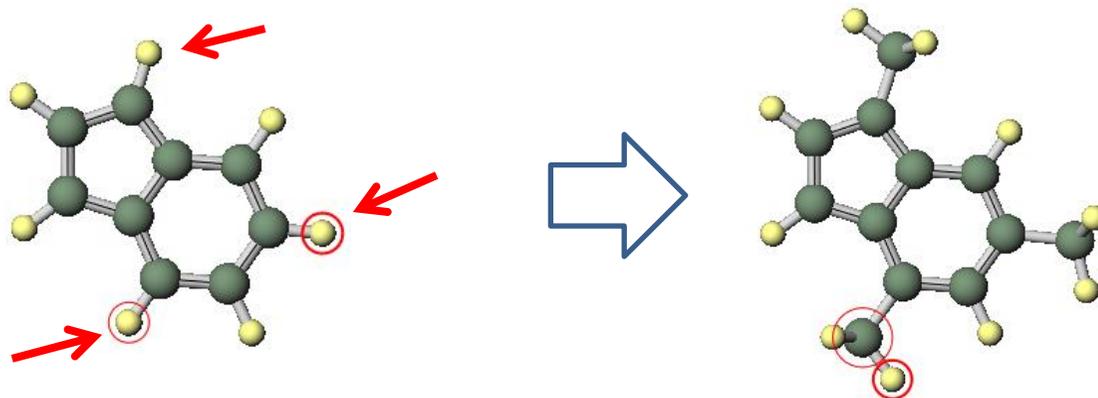
3. 下図の矢印の2つの水素を続けてクリックし、編集 | 環構築をクリックし、 簡易構造最適化をクリックします。



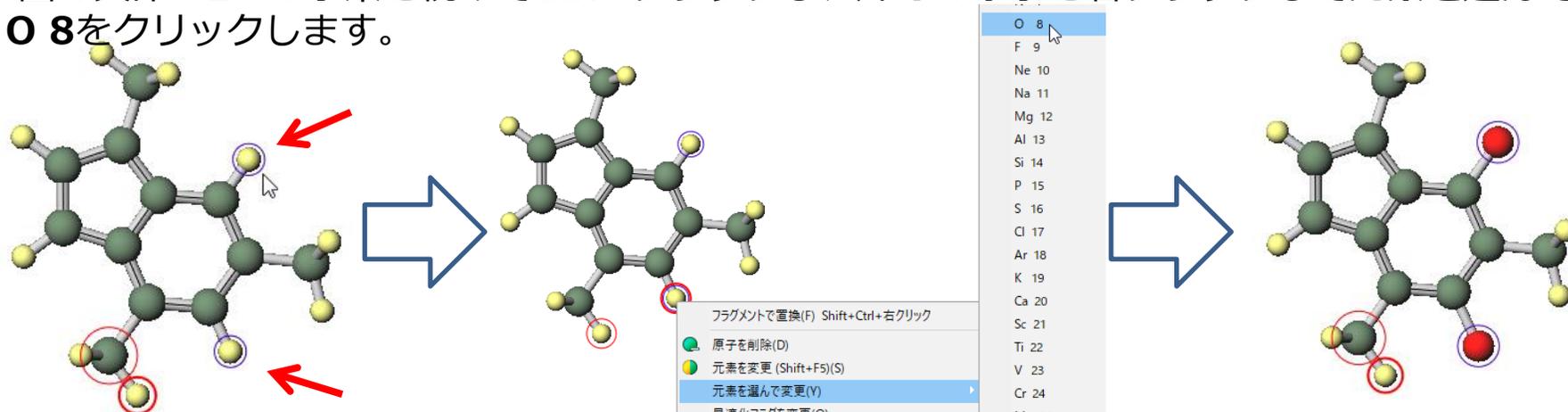
VI. 直接モデリング (Caffeine)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

4. フラグメントで「-CH3」を選択し、下図の矢印の3つの水素に対し、原子をクリックしてから **Replace** フラグメントで置換をクリック、を繰り返します。



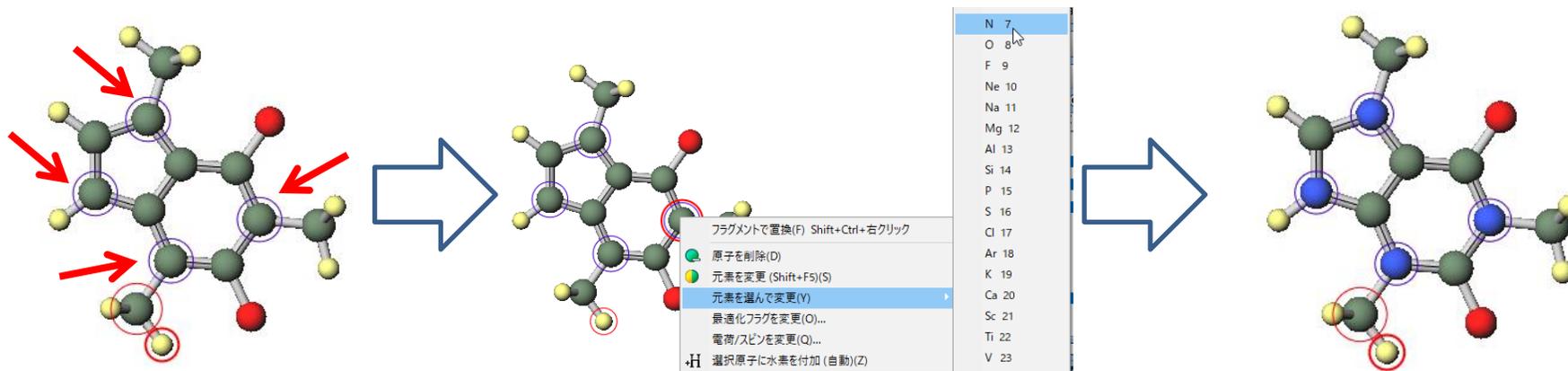
5. 下図の矢印の2つの水素を続けてCtrl+クリックし、片方の原子を右クリックして**元素を選んで変更** | **O 8**をクリックします。



VI. 直接モデリング (Caffeine)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

6. **選択 | グループ選択を解除**をクリックしてから下図の矢印の4つの水素を続けてCtrl+クリックし、片方の原子を右クリックして**元素を選んで変更 | N 7**をクリックします。

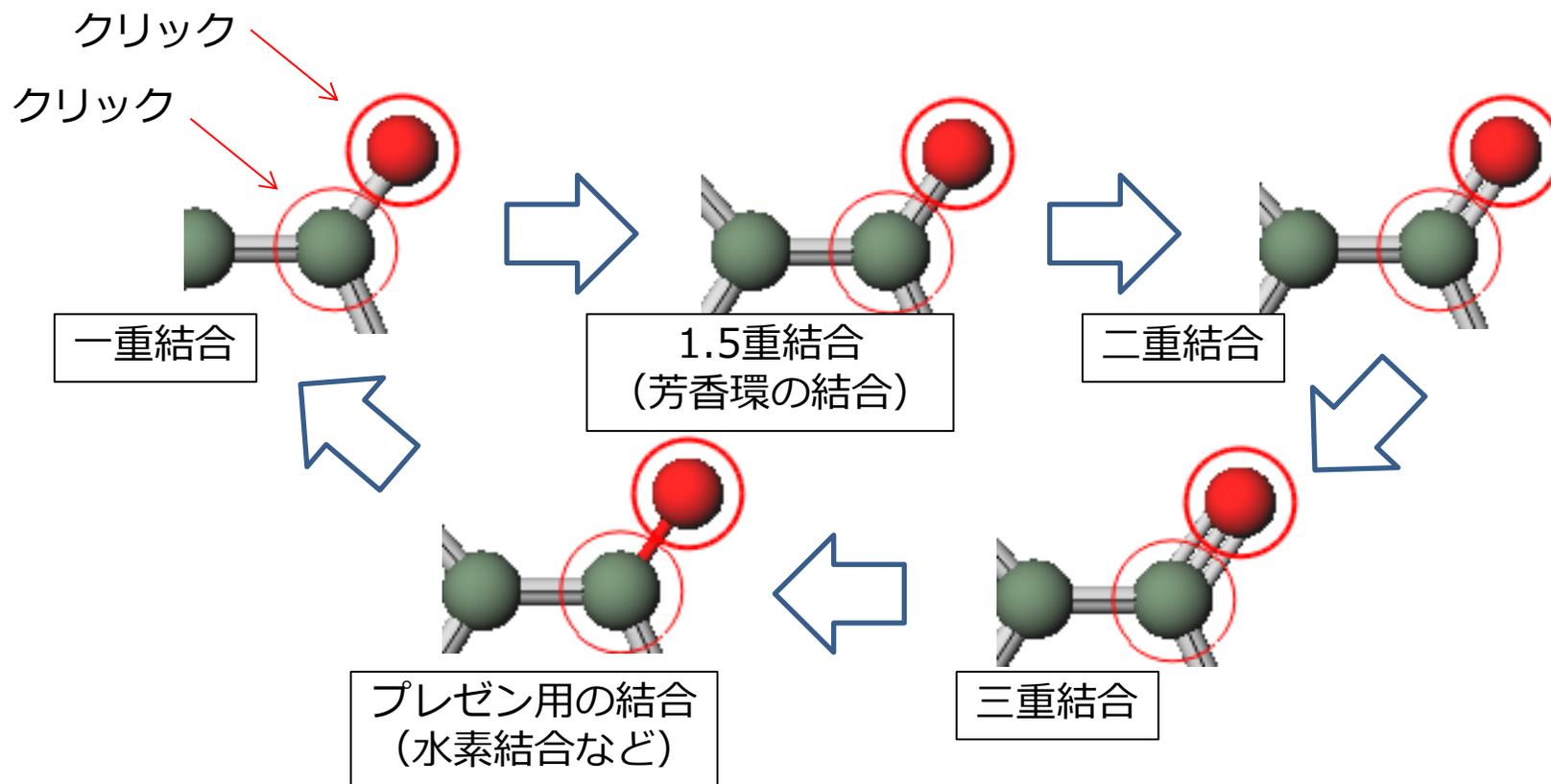


7. 下図の水素を右クリックし**原子を削除**をクリックします。

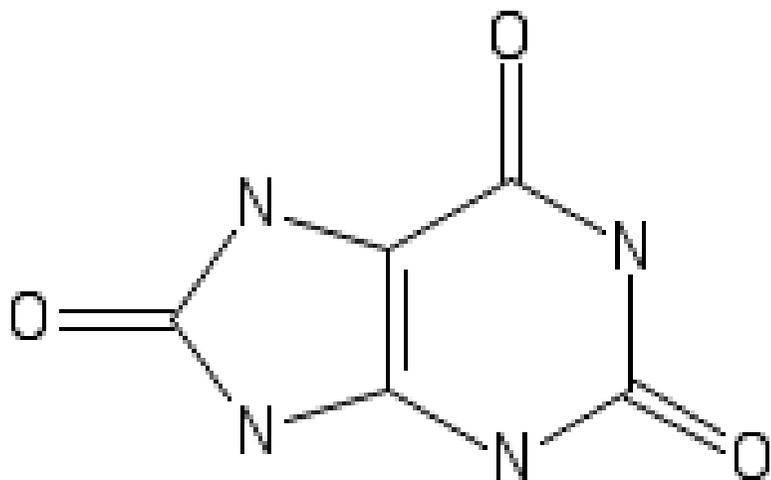


補足 結合の変更

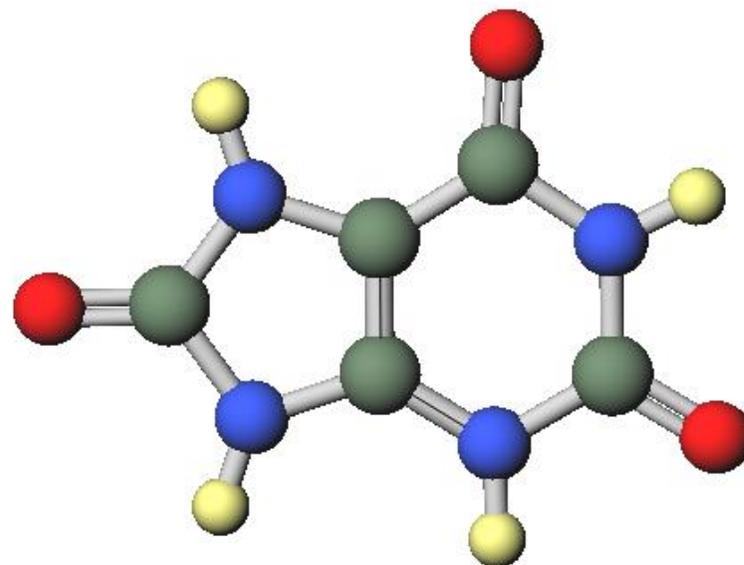
- 結合次数（一重結合、二重結合など）を変更したい場合は、結合の両端の原子を続けてクリックし、（結合を付加/変更）をクリックします。
- ただし、結合次数は量子化学計算、第一原理計算のシミュレーション内容に影響しないため、これらの計算を実行する目的においては適当でも問題ありません。



VII. 直接モデリング (Uric acid)



構造式

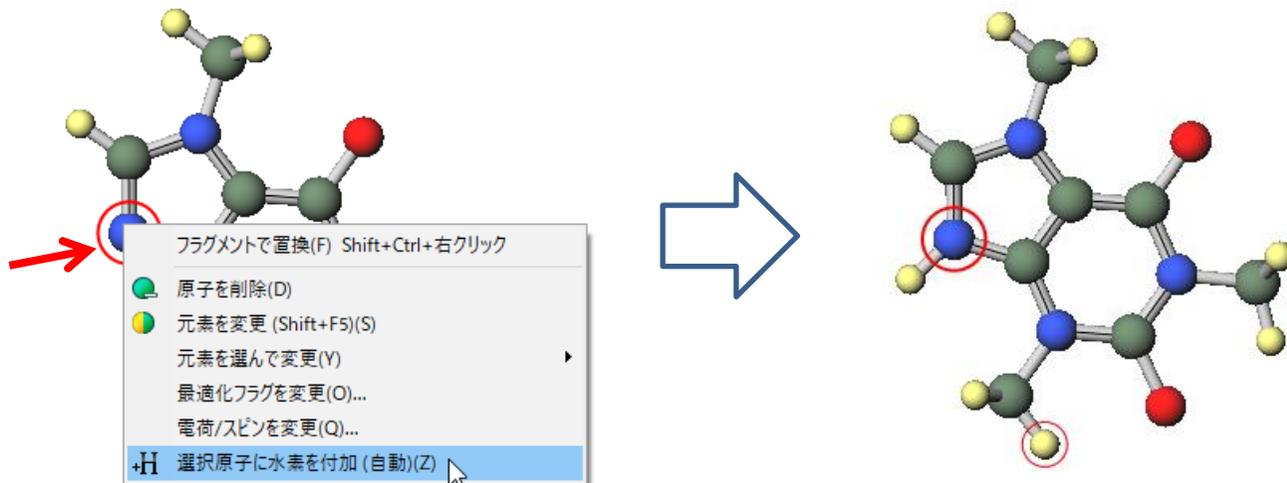


3Dモデル

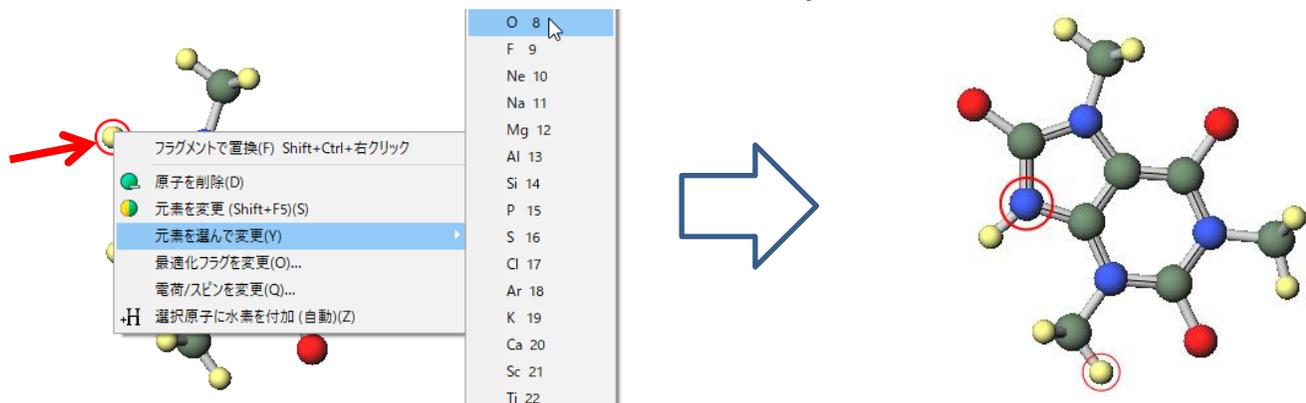
VII. 直接モデリング (Uric acid)

クリックとだけ書かれている場合は左クリック。

1. VI. 直接モデリング (Caffeine) の構造から出発します。
2. 下図の水素を右クリックし**選択原子に水素を付加**をクリックします。

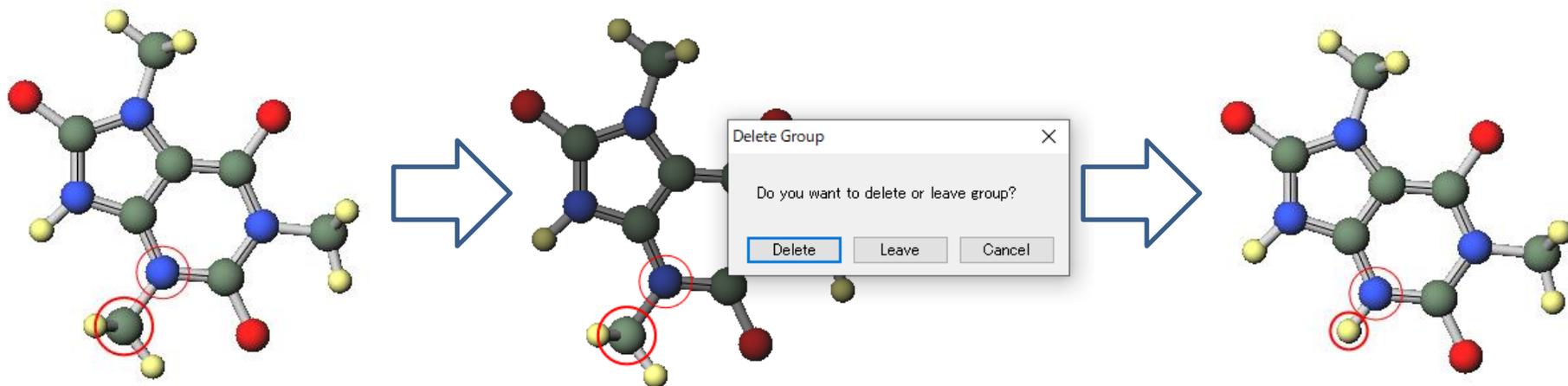


3. 下図の水素を右クリックし**元素を選んで変更 | O 8**をクリックします。

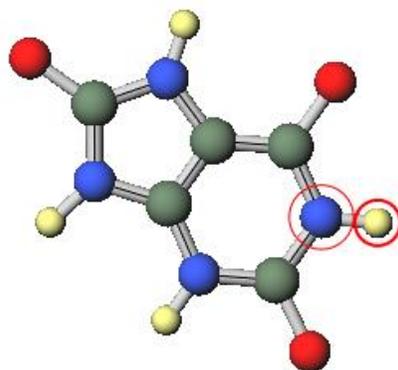


VII. 直接モデリング (Uric acid)

4. 下図の矢印の原子を数字の順番通りに続けてクリックし、 (グループ編集) | グループを削除をクリックし、Deleteをクリックします。



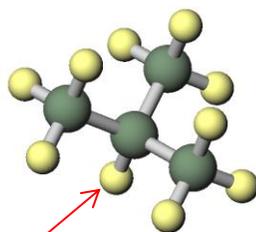
5. 4の手順で残り2つのメチル基を削除します。



補足 フラグメントの登録

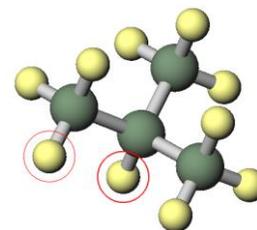
モデリングした分子はユーザ定義のフラグメント（置換基）として登録できます。
例として $tert$ -Butyl基の登録手順を以下に示します。

1. イソブタンをモデリングし矢印の水素をクリックします。

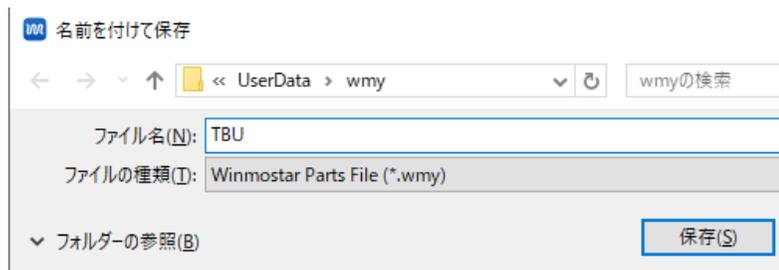


ここで選択した水素原子の位置
が置換基の始点に設定

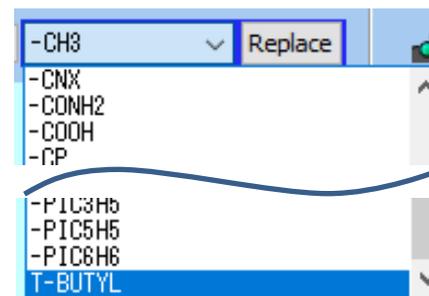
2. **編集 | フラグメントを選択 | フラグメントを登録**をクリックします。



3. **ファイル名**に「T-BUTYL」と入力し**保存**をクリックします。



4. **フラグメントを選択**に「T-BUTYL」が表示されます。



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上