M winmostar チュートリアル

分子モデリング 超分子編

V11.2.3

2022年10月7日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



• 本チュートリアルでは以下の二量体構造の作成方法を紹介します



(サンドイッチ型)



(平行ずれ型) ベンゼン二量体





異なる分子の二量体



I. ベンゼン二量体 (サンドイッチ)

1分子構造の作成方法の詳細は分子モデリング有機分子編チュートリアルを参照してください。

- 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. フラグメントを「-C6H5」に変更しReplaceをクリックしベンゼンを作成します。
- 3. 🚾 X軸方向から表示をクリックします。





I. ベンゼン二量体 (サンドイッチ)

- 1. 選択 | すべてグループ選択をクリックします。(またはベンゼンをShift+クリック)
- 2. **グループ編集 | グループを複製**をクリックします。
- 3. XのNumberを「1」、ZのIntervalを「3」、ZのNumberを「2」に変更しOKをクリック します。
- 4. ① ファイルをエクスポートをクリックし「benzene_sandwich.mol2」として保存します。



II. ベンゼン二量体(平行ずれ型)

- 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.
 ファイルをインポートをクリックしP.6で保存したbenzene_sandwich.mol2を開き破棄して読み込みをクリックします。
- 3. 結合する炭素原子を続けてクリックし分子表示エリア左上の「Length=…」で結合長を確認します。この結合長分だけ後で平行移動します。
- 4. 選択 | 分子によるグループ選択をクリックし、「Mole 1」の行をクリックしCloseをクリックします。(あるいは対象の分子をShift+クリック)



II. ベンゼン二量体(平行ずれ型)

1. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックします。 2. XにP. 7で確認した結合長を入力しOKをクリックします。

3. 視線を適当に回転し(分子表示エリアをドラッグ)、構造を確認します。



III.ベンゼン二量体(T字型)方法1

- 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.
 ファイルをインポートをクリックしP.6で保存したbenzene_sandwich.mol2を開き破棄して読み込みをクリックします。
- 3. 選択 | 分子によるグループ選択をクリックし、「Mole 1」の行をクリックしCloseをクリックします。(あるいは対象の分子をShift+クリック)
- 4. **グループ編集 | グループを回転(数値を指定)**をクリックし、BetaとGammaをそれぞれ「90」と「30」に変更しOKをクリックします。
- 5. 視線を適当に回転し(分子表示エリアをドラッグ)、構造を確認します。

	Rotate Group (Numerical) Center Marked Atom Center of Geometry Alpha Beta 0.00	
	Beta Gamma OK	

IV.ベンゼン二量体(T字型)方法2

- 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. **ノ ファイルをインポート**をクリックしP.6で保存したbenzene_sandwich.mol2を開き破棄 して読み込みをクリックします。
- 3. 視線を下図のように回転します(分子表示エリアをドラッグ)。
- 4. 結合する炭素原子と水素原子を続けてクリックします。(後に任意の座標軸に配向させたい結 合がこれで指定)
- 5. 4でクリックした原子を含む分子をShift+クリックしグループ選択します、



IV.ベンゼン二量体(T字型)方法2

- 1. **グループ編集 | グループを回転(配向を指定)**をクリックし、Align 2 marked atoms to target directionにチェックを入れOKをクリックします。
- 2. 視線を適当に回転し(分子表示エリアをドラッグ)、構造を確認します。

🚾 Rotate Group by Aligning M — 🛛 🛛 🛛		
Rotate group to		
Align principle axis to target direction		
Align 2 marked atoms to target direction		
O Align 3 marked atoms to target plane		
Target Direction/Plane		
○ X Axis/YZ Plane ○ Y Axis/XZ Plane		
OManual		
0.00000 0.00000 1.00000		
OK Apply		



V. 異なる分子の二量体 方法1

- 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. 下図(左)の分子を作成します。
- 3. 1 ファイルをエクスポートをクリックし「donor.mol2」として保存します。
- 4. 編集 | 構造をリセットをクリックし下図(中央)の分子を作成します。
- 5. **ファイルをインポート**をクリックしdonor.mol2を開き、追加読み込みをクリックします。 この状態でdonor.mol2の分子がグループ選択された状態になります。
- 6. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Z**を「3」に変更し**OK** をクリックします。
- 7. 視線を適当に回転し(分子表示エリアをドラッグ)、構造を確認します。







VI.異なる分子の二量体 方法2

- 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. 下図(左)の分子を作成します。
- Winmostarをもう一つ追加で起動しファイル | 新規ファイルをクリックします。下図(中央)の分子を作成し、選択 | すべてをグループ選択をクリックし、 ^d グループ選択 | グループ プをコピーをクリック(またはCtrl+C)します。
- 5. **グループ編集 | グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Z**を「3」に変更し**OK** をクリックします。
- 6. 視線を適当に回転し(分子表示エリアをドラッグ)、構造を確認します。









グループ選択(**青丸**)の手順には、**選択**メニューの機能を使う手順と、分子表示エリア上で以下 に示す方法で選択する手順があります。





分子単位でのグループ選択 Shiftキーを押しながら 分子をクリック







補足 グループ編集の動作

✓ グループ編集または編集 | グループ編集の機能は以下の対象に対し動作します。

・ グループ選択されていない場合(単分子のモデリングで有利)
 →2つのマーク原子(赤丸)で分断される構造が対象
 例:



・ グループ選択されている場合 (複数分子のモデリングに有利)
 →グループ選択原子 (青丸)が対象





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>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