M winmostar チュートリアル

分子モデリング 金属錯体編

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金属錯体の作成方法を紹介します。
- 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。



Ferrocene (FeC₁₀H₁₀) Zn(saloph) (ZnC₂₀N₂H₁₀O₂) [Ru(bpy)₃]²⁺ (RuC₃₀N₆H₂₄)

II. Ferroceneのモデリング

まず**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。

1. フラグメントを-C5H4 に変更しReplaceをクリッ クしCp環を作成します。



2. <u>分子モデリングチュートリ</u> アル超分子編の手順でCp環を 3.5 Å間隔で平行に並べます。

3. 選択 | すべてをグループ選択 をクリックします。







更し、**編集|原子/結合の自動** 調整|結合を再生成をクリッ クします。



III.Zn(saloph)のモデリング

まずファイル | 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。



III.Zn(saloph)のモデリング

7. 編集 | 座標を反転/キラリ ティ | 鏡像体を追加をクリック します。

8. 図の2か所の原子を続けてク 9. ▲ 簡易構造最適化をク リックし S 結合を付加/変更 リックします。 をクリックします。





IV.[Ru(bpy)3]2+のモデリング

まずファイル | 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。

1. **フラグメント**を-PDH5に変 更しReplaceをクリックしま す。中央のPd原子の元素をRu に変更します。 2. **フラグメント**を-C6H5に変 更し、隣接する2つの水素原子 に対しそれぞれクリックしてか らReplaceをクリックします。 3.2つのフェニル基の近接する 2つの水素原子をそれぞれ右ク リック→**原子を削除**で削除しま す。

 4. 削除した原子に結合した2か 所の炭素原子を続けてクリック
し S 結合を付加/変更をク
リックします。 5. Ruに結合する炭素原子の元 素をNに変更し 🧹 簡易構造最 適化をクリックします。 6. 2-5の操作を残りの箇所に対 して2回繰り返します。鏡像を 取得する場合は**編集 | 座標を反** 転/キラリティの機能を使いま

す。

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



• 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、<u>お問合せフォーム</u>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