M winmostar チュートリアル

分子モデリング 配向・原点の調整

V11.11.3

2025年4月18日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 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。



- 計算の目的によっては分子の特定方向を直交座標軸のいずれかの軸と平行になるようにして計算する場合があります。
- 本チュートリアルでは、Isooctane分子の下図の炭素原子A,B,Cの3原子からなる面に垂直な方 向をZ軸、AとCとを結ぶ軸をX軸とし、その配向状態での原点を炭素原子Bの位置にとった座標 を作成します。



<u>分子モデリング有機分子チュート</u>
<u>リアル</u>に従いIsooctaneをモデリ

ングする。



遠近法を使用が有効になっている場合は 操作内容を把握しやすくするため無効にする。



Winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

 X-Y平面に配置して欲しい下図の炭素原子を右回り順(例えばA→C→Bの順)に続けてクリックする(赤丸のマーカーが移動する)。そして、 選択|すべてをグループ選択をクリックする (青丸でグループ選択される)。



3. 編集 / グループ編集 / グループを回転(配向を指定)…をクリックする。



 出現したウィンドウにおいてRotate group to に「Align 3 marked atoms to target plane」、Target Direction/Planeに「Z Axis/XY plane」を指定してOKをクリック する。



これでZ軸が決まり下図の配置になる。



次にX軸の方向を決めるため、下図の
A、Cの炭素原子をC→Aの順に続けて
クリックする(先にクリックした側が
Xの正方向になる)。次いで選択 | す
べてをグループ選択をクリックする。



Winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

 編集 | グループ編集 | グループを回転(配向を指定)をクリックする。Rotate group to に「Align 2 marked atoms to target direction」、Target Direction/Planeに「X Axis/YZ plane」を指定してOKをクリックする。

🞯 Rotate Group by Aligning — 🗆 🗙
Rotate group to
Align principle axis to target direction
Align 2 marked atoms to target direction
Align 3 marked atoms to target plane
Target Direction/Plane
X Axis/YZ Plane () Y Axis/XZ Plane () Z Axis/XY Plane
() Manual
1.00000 0.00000 0.00000
OK Cancel Apply

IJ

ック

II. 原点の調整

7. Z軸方向からの表示をクリックする。

8. 選択 | グループ選択を解除をクリックする。





炭素原子AとCを結ぶ線がX軸に平行となっているのが分かる。

II. 原点の調整

9. 表示 | 表示項目 | 座標系をクリックし座標系を表示させる。



II. 原点の調整

10. 原点を炭素原子Bの位置に移す。

(1) 下図の炭素原子Bをクリックする。



(2)編集 | 座標軸の取り直し | 選択原子 の位置を原点に設定をクリックする。



ファイル | ファイルをエクスポートから、

生成された座標をxyz 形式で保存する。



• 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、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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