

 winmostar チュートリアル

# 分子モデリング (金属錯体編)

V10.0.0

2020年3月2日

株式会社クロスアビリティ

# 本書について

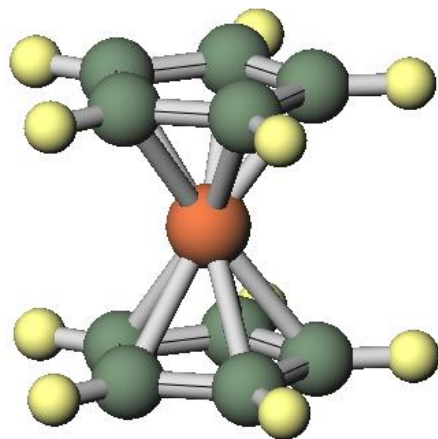
- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：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

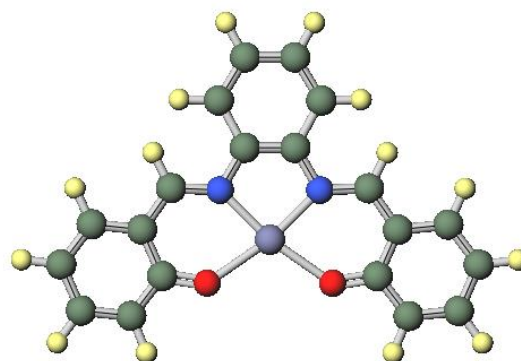
1. 金属錯体の一覧
2. Ferrocene  
部分貼り付け、部分重心
3. Zn[Saloph]  
配向、鏡像体生成
4. Ru[Tris(2,2'-bipyridyl)]  
錯体用置換基(-PDH5)の利用、クリーン

# I. 金属錯体の一覧

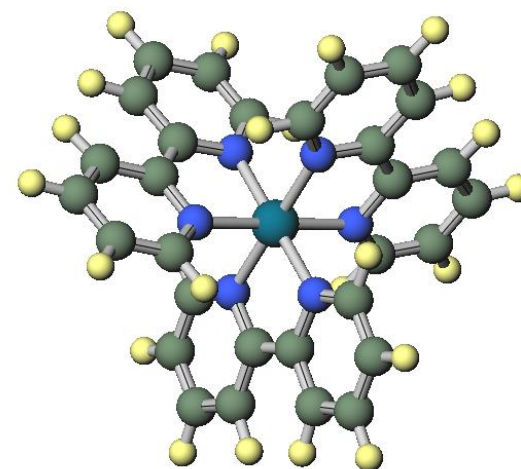
金属原子を含む分子に対しては力場を用いるクリーンは必ずしも成功しない。  
本チュートリアルでは、金属錯体を効率的にモデリングする手順を示す。



Ferrocene ( $\text{FeC}_{10}\text{H}_{10}$ )



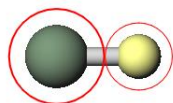
Zn(saloph) ( $\text{ZnC}_{20}\text{N}_2\text{H}_{10}\text{O}_2$ )



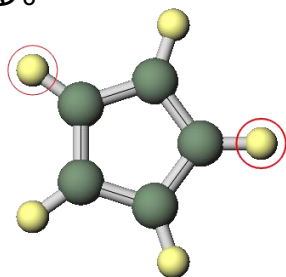
$[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$  ( $\text{RuC}_{30}\text{N}_6\text{H}_{24}$ )

## II. Ferroceneのモデリング

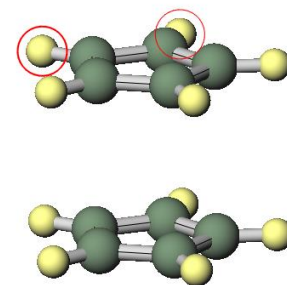
1. **-C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>**フラグメントを用いてCP環をモデリングする。



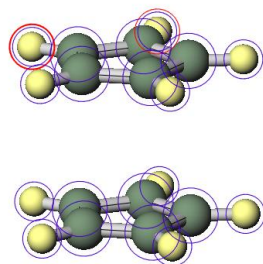
2. 分子モデリングチュートリアル (超分子編) を参考にCP環を平行に並べる。



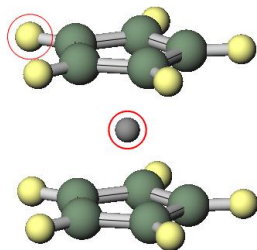
3. 全体をグループ選択する。



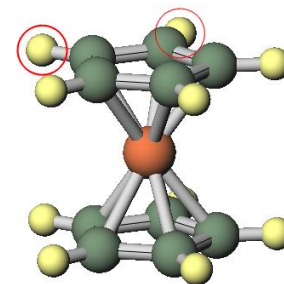
4. **編集 | ダミー原子を追加 | グループの重心に追加** をクリックする。



5. ダミー原子を**Fe**原子に置換する。その後、**編集 | 原子/結合の自動調整 | 結合を再生成**をクリックする。

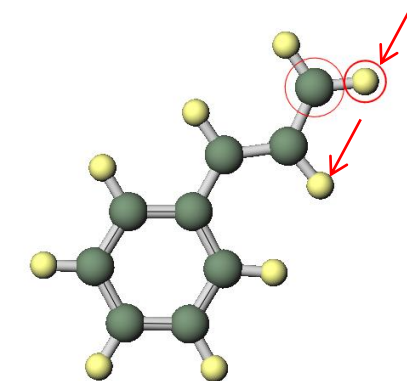
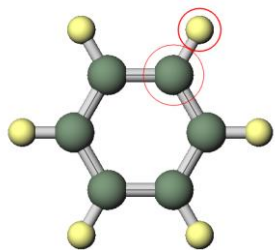


6. 必要に応じて保存。

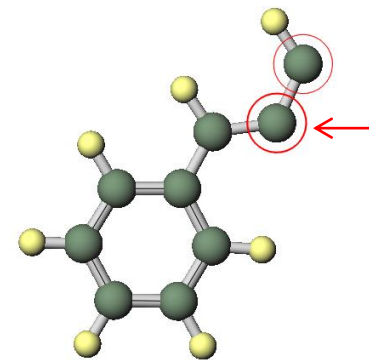


# III. Zn(saloph)のモデリング

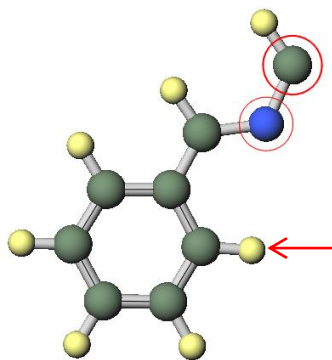
1. ベンゼン環からスタート。  
-CH<sub>2</sub>で三回置換し、👉  
(簡易構造最適化)  
をクリックする。



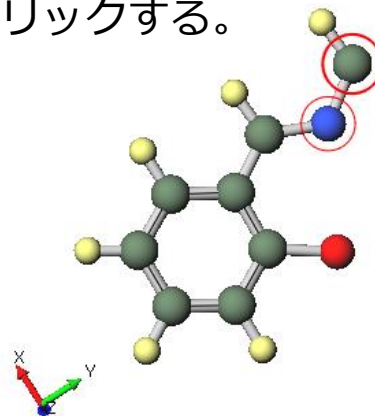
3. 矢印の炭素Cを  
窒素Nに置換する。



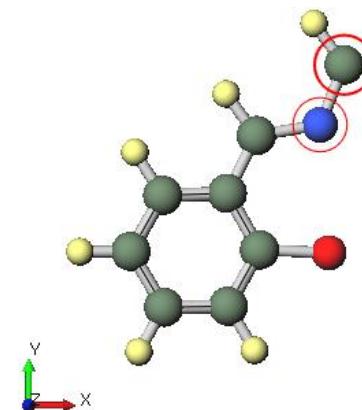
4. 矢印の水素を酸  
素Oに置換する。



- 5.編集 | 座標系の取り直し |  
カメラ座標系に設定を  
クリックする。

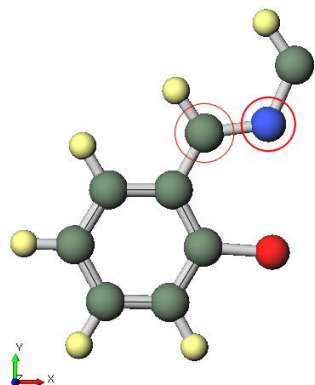




6. 軸の向きが変化する。

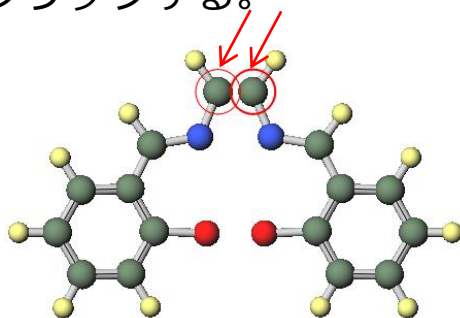


# III. Zn(saloph)のモデリング

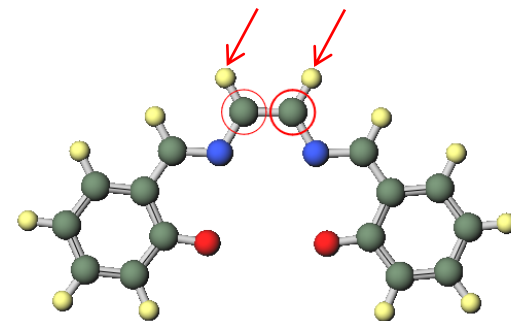
7. 編集 | キラリティ | 鏡像体を生成をクリックする。



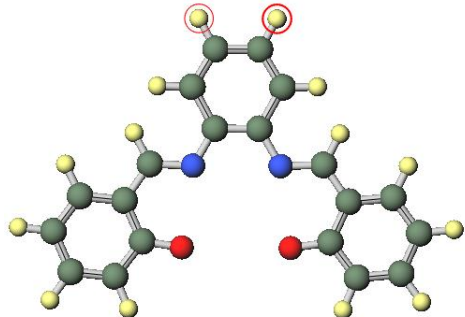
8. 矢印の炭素間に  (結合を付加/変更) で結合を作り、 (簡易構造最適化) をクリックする。



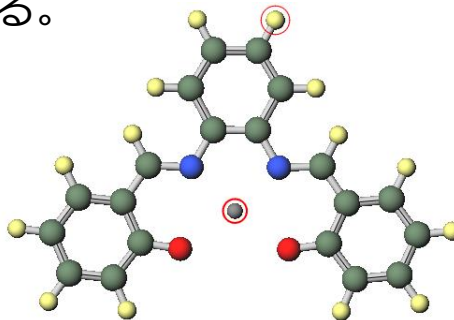
9. 二つの水素を選択し、編集 | 環構築をクリックする



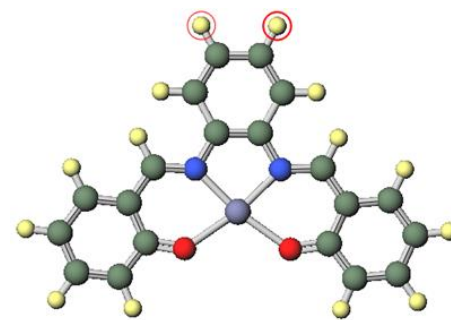
10. 全てのN, Oをグループ選択し、編集 | ダミー原子を追加 | グループの重心に追加をクリックする。



11. ダミー原子をZnで置換する。その後、編集 | 原子/結合の自動調整 | 結合を再生成をクリックする。



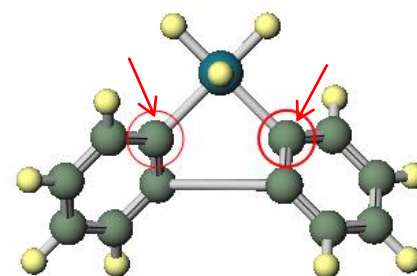
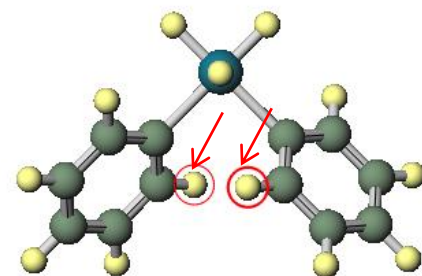
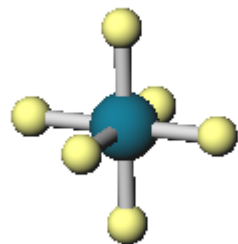
12. 必要に応じて保存





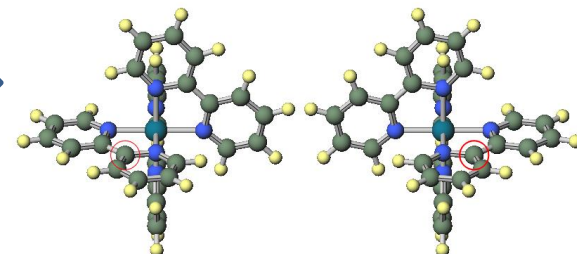
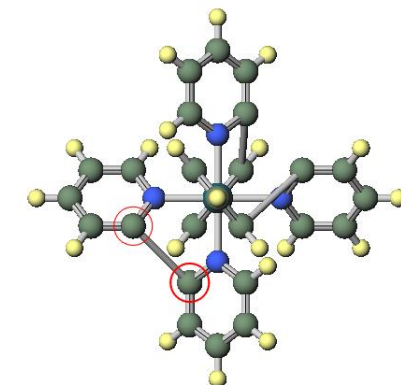
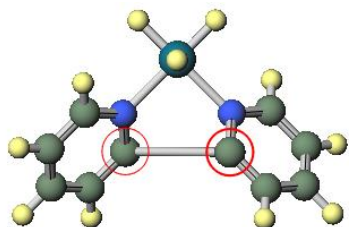
# IV. [Ru(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>のモデリング

1. -PDH5フラグメントからスタート。PdはRuに置換しておく。二つのHを-C6H5で置換する。



3. 矢印の炭素を窒素に置換する。

4. ここまでの操作をRuに配位する全ての水素に対して行う。



5. 🖱️ (簡易構造最適化)をクリックする。

6. この錯体にはエナンチオマーが存在する。適宜、編集 | キラリティ | 鏡像体を生成を利用するとよい。



# 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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)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[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