

Winmostar チュートリアル

分子モデリング (有機分子編)

V7.016

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/04/26

Contents

I. 分子の一覧

II. Isooctane

部品置換、クリーン

III. Fluorene

原子削除、原子置換、結合付加、水素付加

IV. Caffeine

環構築、一括原子置換

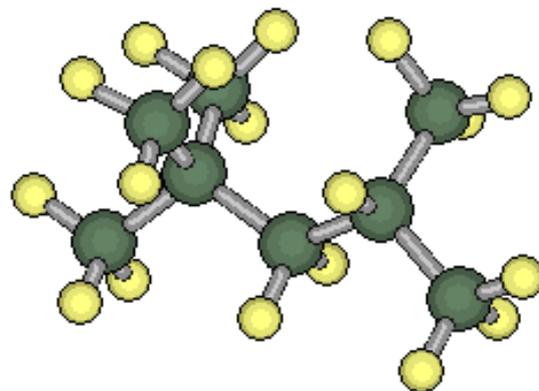
V. Uric Acid

部分削除

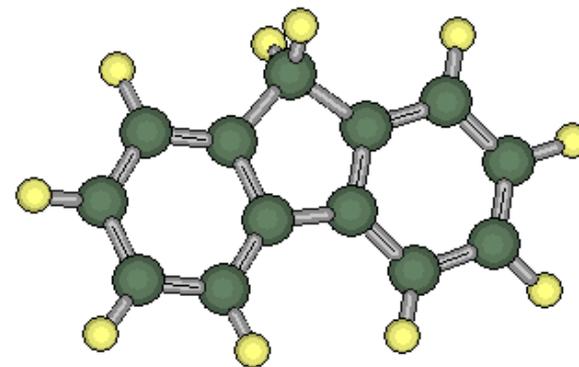
Appendix

部品登録

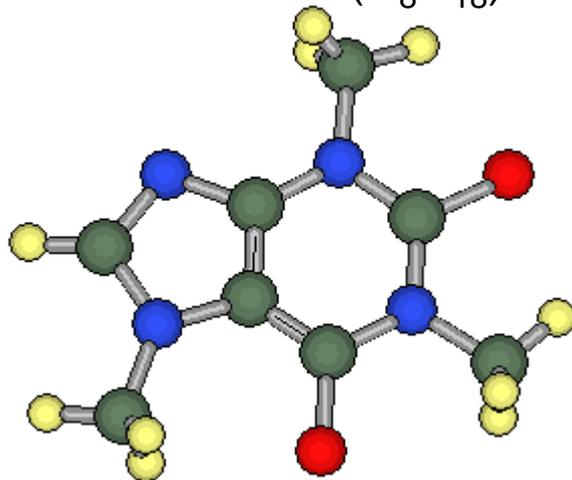
I. 分子の一覧



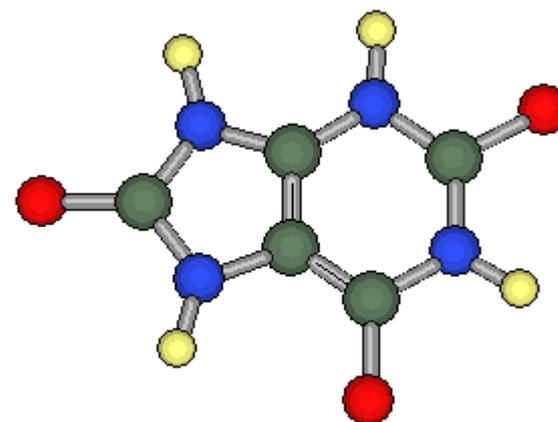
isooctane (C₈H₁₈)



fluorene (C₁₃H₁₀)



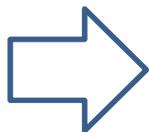
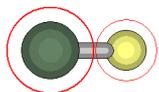
caffeine (C₈H₁₀N₄O₂)



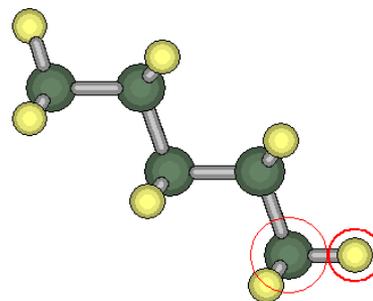
uric acid (C₅H₄N₄O₃)

II. Isooctaneのモデリング

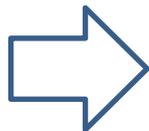
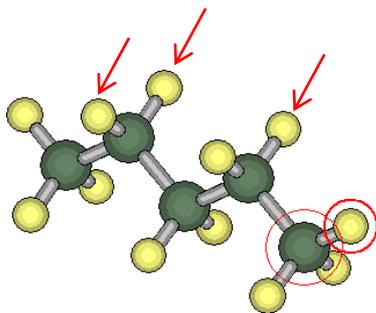
1. ファイル | 新規をクリック。
(C-H骨格が描画される。)
Replボタンを5回クリック。



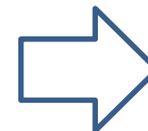
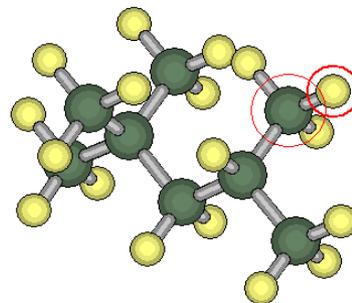
2. *n*-pentane骨格が完成する。
カメラの位置を微調整する。



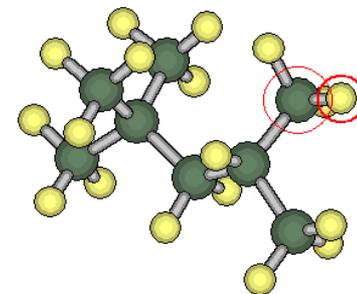
3. 矢印の先のH原子上で右クリック。



4.  (クリーン)をクリック。

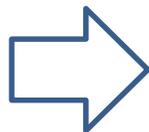
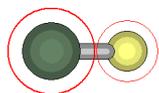


5. 必要に応じて保存。

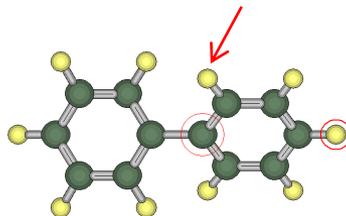


III. Fluoreneのモデリング1

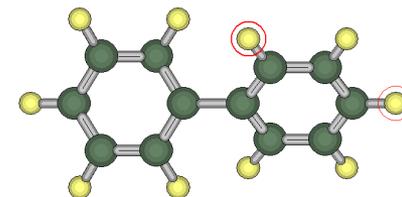
1. ファイル | 新規をクリック。
-C6H5をクリック。
Replを2回クリック。



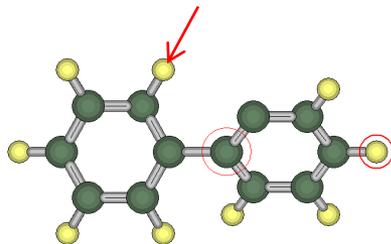
2. biphenyl骨格が完成する。
矢印の水素原子をクリック。



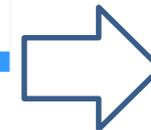
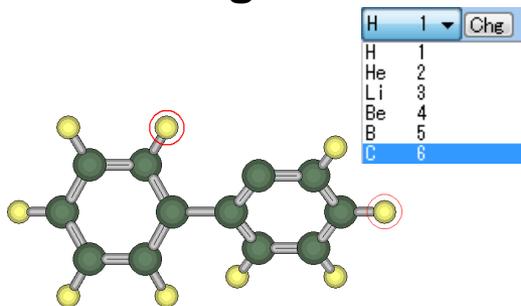
3. Delをクリック。



4. 矢印の先のH原子上でクリック。



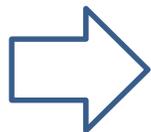
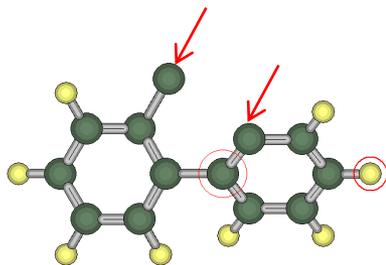
5. 原子選択にてCを
選択し、Chgをクリック。



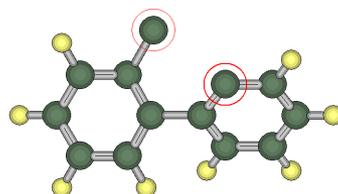
次のページへ

III. Fluoreneのモデリング2

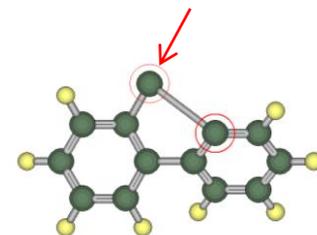
6. 矢印の先の
二つのC原子をクリック。



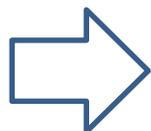
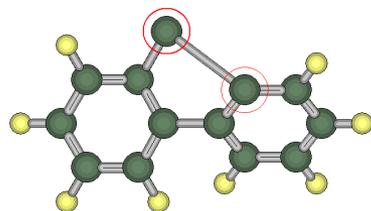
7.  (結合付加)アイコン
をクリック。



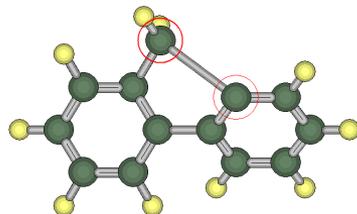
8. 矢印の先の
C原子をクリック。



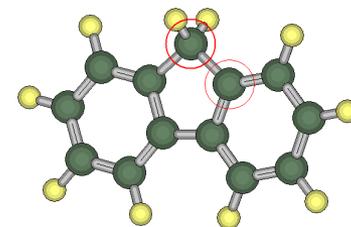
9.  (水素付加)アイコン
を二回クリック。



10.  (クリーン)アイコン
をクリック。

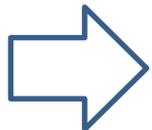
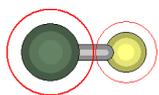


11. 必要に応じて保存。

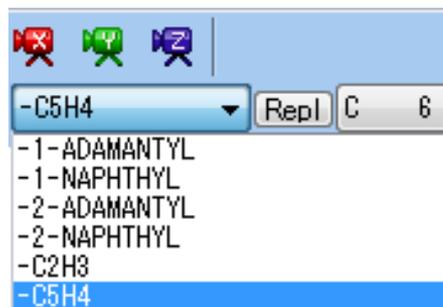


IV. Caffeineのモデリング1

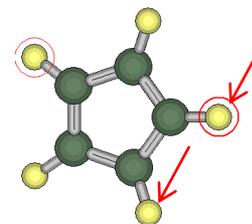
1. ファイル | 新規をクリック。
(C-H骨格が描画される。)



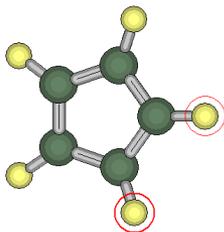
2. 部品選択
から-C5H4を選択後、
Replをクリック



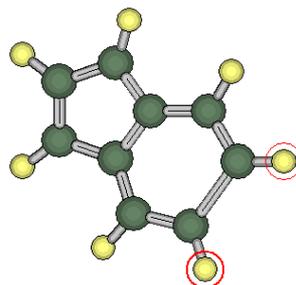
3. CP環が描画される。
矢印の先の
二つのH原子をクリック。



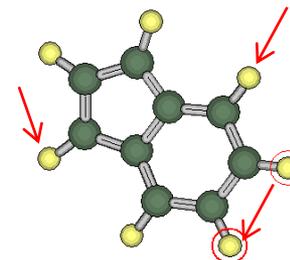
4. 編集 | 環構築をクリック
(キーボードのF9でもよい。)



5.  (クリーン)をクリック。

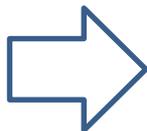
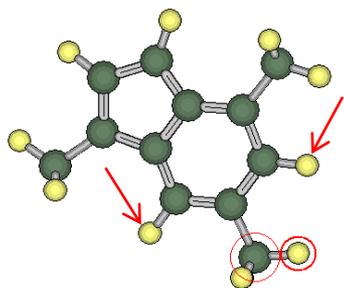


6. -CH3をクリックし、
矢印の先の
3つの水素上で右クリック

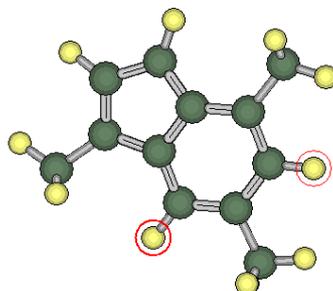


IV. Caffeineのモデリング2

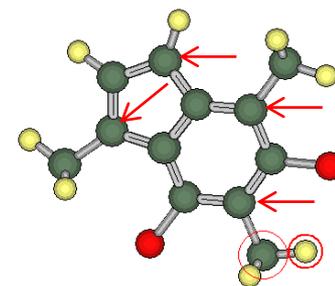
7. 矢印の先の
二つのH原子をクリック。



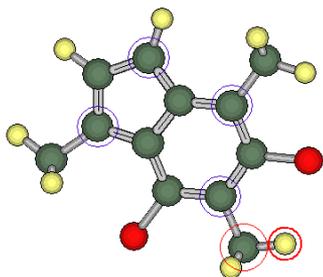
8. 原子選択から**O**を選択し、**Chg**を2回クリック



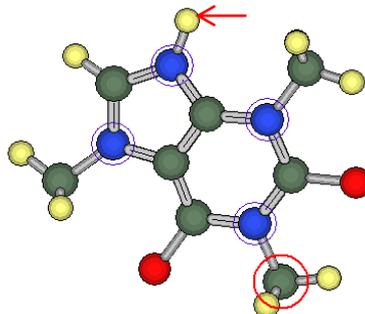
9. 矢印の先の4つのC原子を
Ctrlを押しながらクリック
(部分選択)



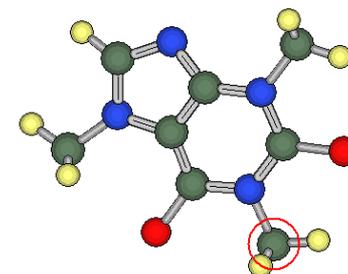
10. 原子選択から**N**を選択し、**Chg**をクリック(一括置換)



11. 矢印の先のH原子を
クリックし、**Del**をクリック

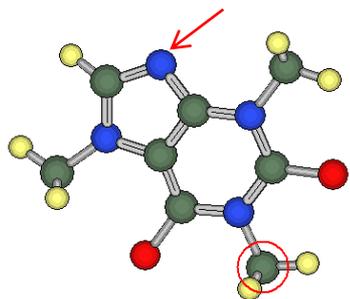


12. 次のモデリングに進む前に
File | 名前を付けて保存をクリック
(Caffeine.datとして保存)

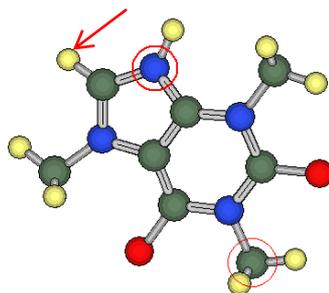


V. Uric Acidのモデリング

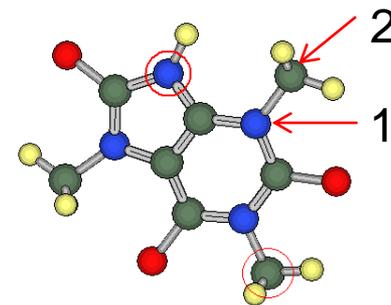
1. Caffeineから開始。
矢印の先のN原子をクリックし、**+H**をクリック。



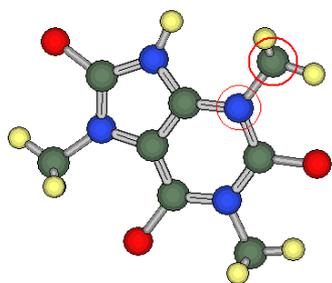
2. 矢印の先のH原子を選択し、**原子選択**からO原子を選択し、**Chg**をクリック



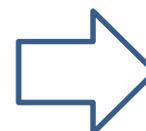
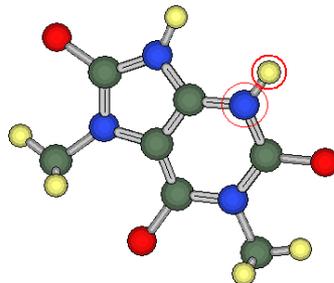
3. 矢印の先の原子を
順番通りにクリック



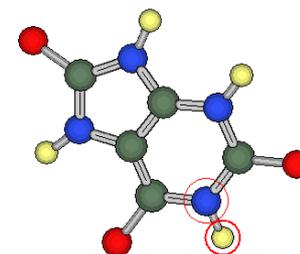
4. **編集 | 部分編集 | 部分削除**
をクリック(ショートカット:**Ctrl+d**)
Selectionでは**Delete**をクリック



5. メチル基が削除され、
H原子でキャップされる。
残りのメチル基も削除する。



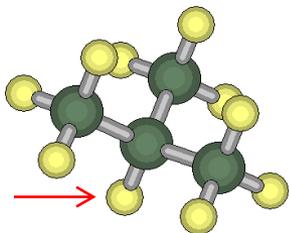
6. 必要に応じて保存



Appendix (部品登録)

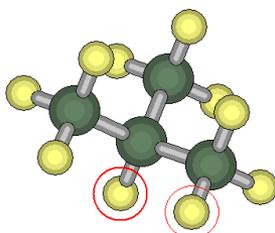
モデリングした分子はユーザ定義の部品(置換基)として登録できる。
tert-Butyl基の登録手順を以下に示す。

1. イソブタンをモデリング。
矢印の水素をクリック。

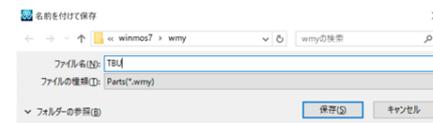


ここで選択した水素原子の位置
が置換基の始点に設定される。

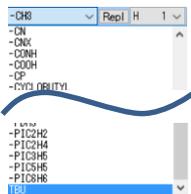
2. 編集 | 部品 | 部品登録
をクリック。



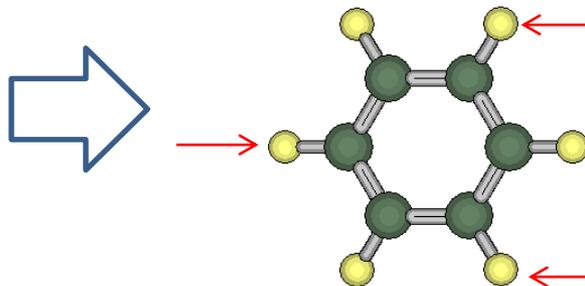
3. 名前を付けて保存。
ここではTBUとする。



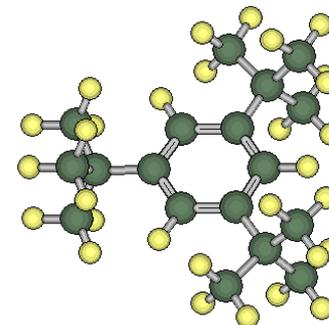
4. 部品選択にTBUが
表示される。



5. 矢印の位置の全て水素を
tert-Butyl基で置換する。



6. よく使う置換基は登
録しておく则便利。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

