

Winmostar チュートリアル

分子モデリング (超分子編)

V7.016

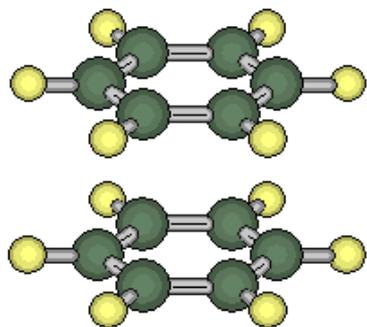
株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/04/26

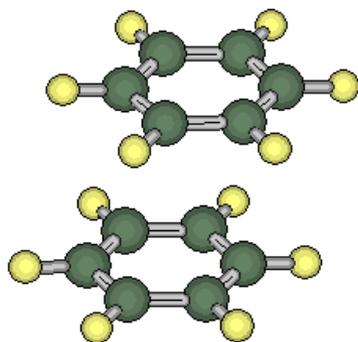
Contents

- I. 超分子の一覧
- II. ベンゼン二量体 – サンドイッチ型
視点変更、部品コピー、部分貼り付け、距離の変更
- III. ベンゼン二量体 – 平行ずれ型
三面図、部分移動
- IV. ベンゼン二量体 – T字型
部分配向、部分回転
- V. 電荷移動錯体
多重起動

I. 超分子の一覧

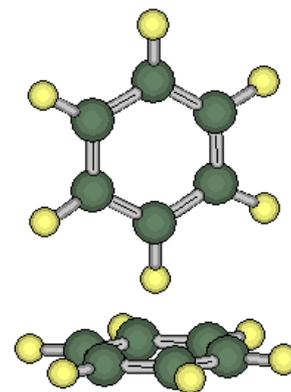


Sandwich

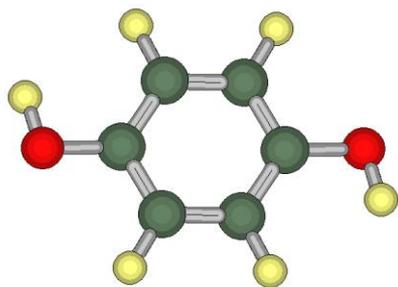


Parallel-displacement

ベンゼン二量体

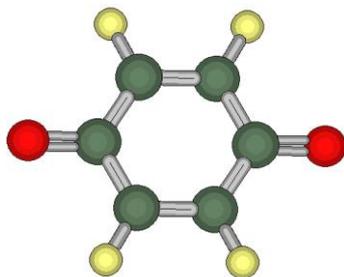


T-shaped



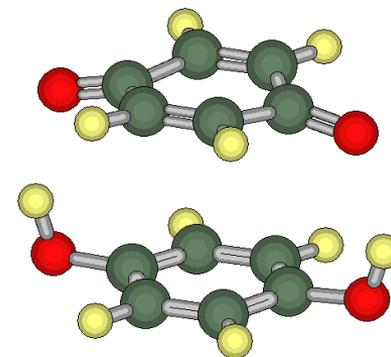
doner

+



accepter

→

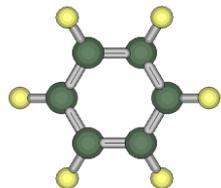


complex

電荷移動錯体

II. ベンゼン二量体(サンドウィッチ)のモデリング

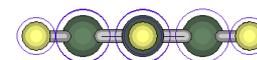
1. ベンゼンをモデルし、
ツールバーの
(X軸視点)をクリック



2. Shiftを押しながら、
分子をクリック(分子選択)



3. Ctrl+C (部分コピー)を押し、
Ctrl+V(部分貼り付け)

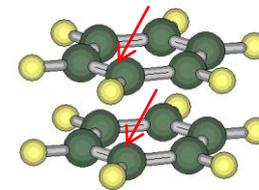
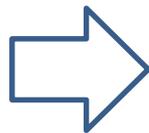
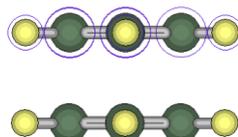
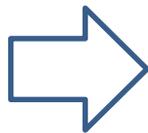
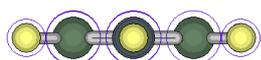


4. 画面上方向にドラッグ

5. 視点を移動

6. 矢印の二原子をクリック

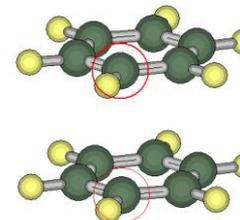
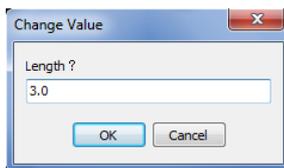
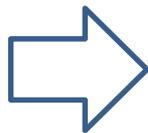
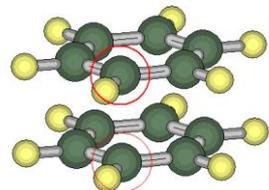
マウスドラッグで貼り付け位置を決定してください



7. 編集 | 変更 | 距離
をクリック

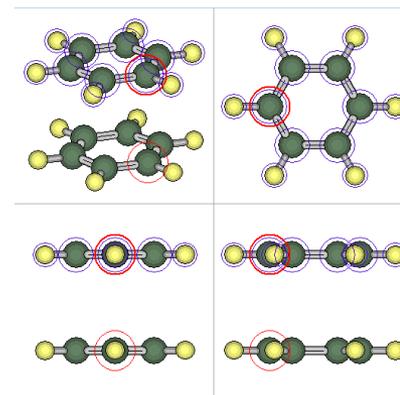
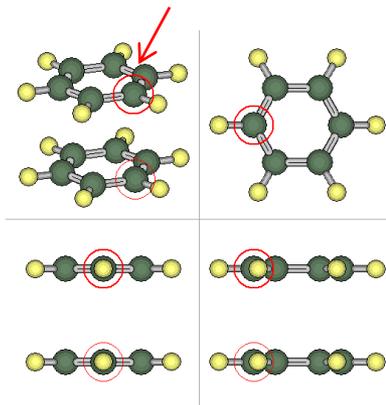
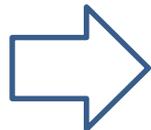
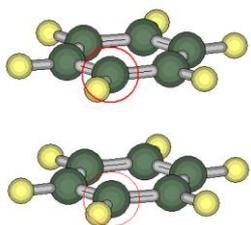
8. Lengthに3.0を入力し、
OKをクリック

9. 必要に応じて保存

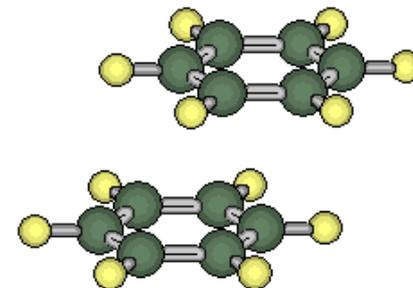
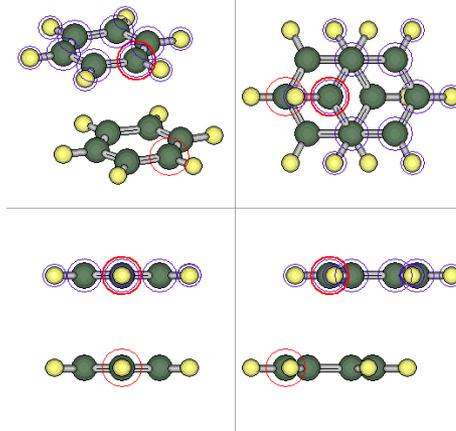
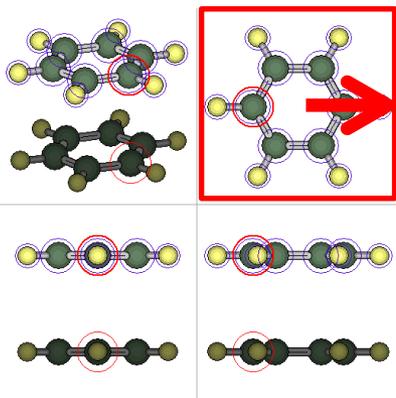


III. ベンゼン二量体（平行ずれ型）のモデリング

1. ベンゼン二量体（サンドウィッチ型）からスタート（三面図）をクリック
2. Shiftを押しながら、矢印の分子をクリック（分子選択）
3. Ctrl + M (部分移動)を押す。

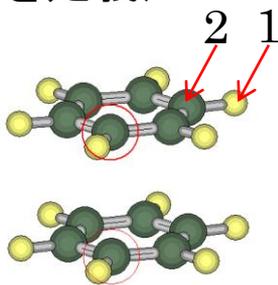


4. 右上の画面上でドラッグ
5. 視点を移動
6. 必要に応じて保存

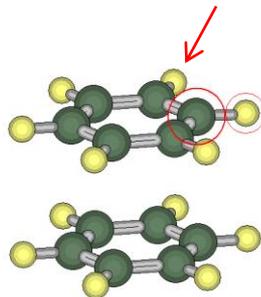


IV. ベンゼン二量体 (T字型) のモデリング

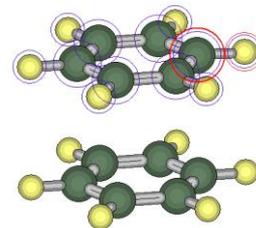
1. ベンゼン二量体 (サンドウィッチ型) からスタート
数字の順番にクリック
(軸を定義)



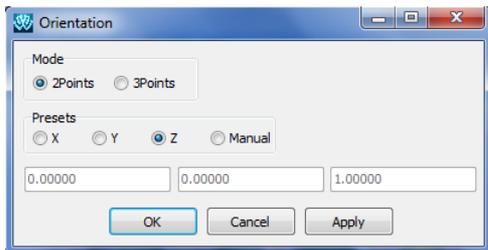
2. Shiftを押しながら、
矢印の分子をクリック
(配向させる分子を指定)



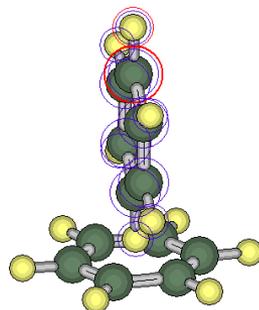
3. 編集 | 部分編集 | 部分配向
をクリック



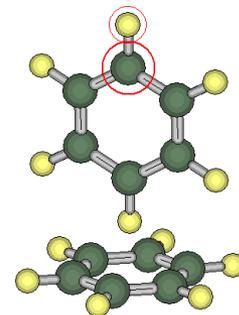
4. Modeに2 points,
Presets にZ を選択後
OKをクリック



5. 分子の距離等は三面図、
部分移動を使って微調節

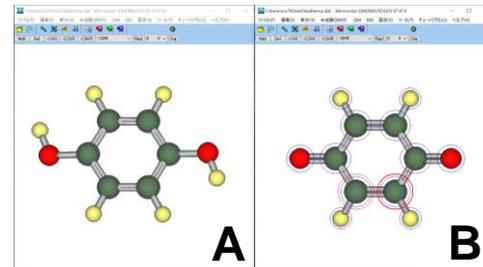
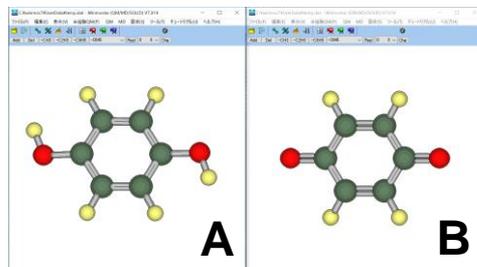
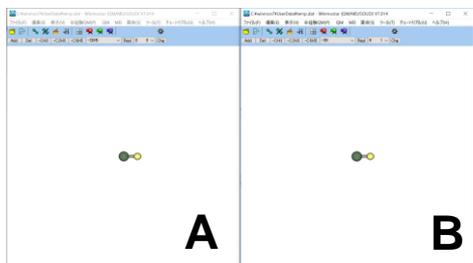


6. 必要に応じて保存

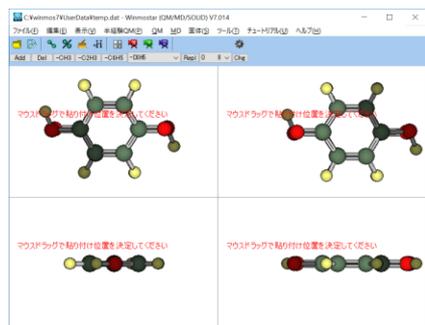


V. 電荷移動錯体のモデリング

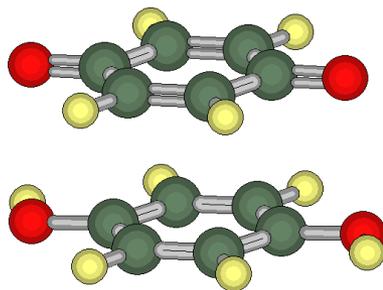
1. Winmostarを2つ起動する。ここではそれぞれをWindow A, Bと呼ぶ。
2. Window AとWindowBでそれぞれ分子をモデリングする。
3. WindowBにて分子を **Shift+クリック**し(分子選択)、**Ctrl+C**を押す。(部分コピー)



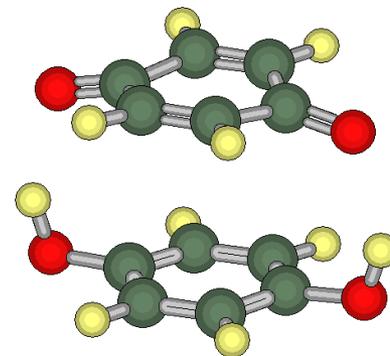
4. WindowAをクリックし、**Ctrl+V**を押す。(部分貼り付け) 適宜分子の配置を調節する。



5. GAMESSなどを使い構造最適化を行う。(例えば、b3lyp/6-31G*)



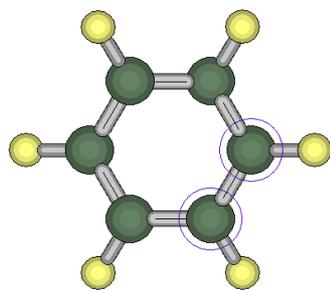
6. 最適化後の分子構造



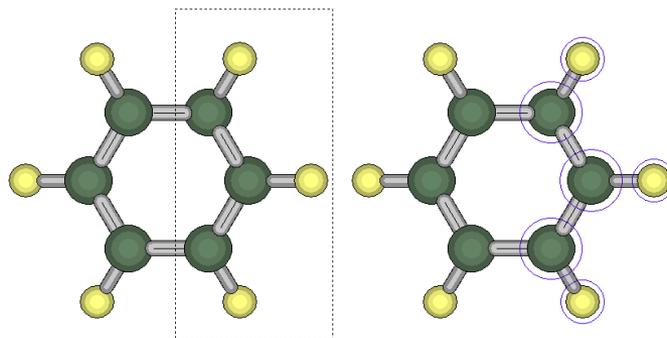
Appendix (部分選択)

部分選択(青いサークル)の方法は以下の三種類がある。

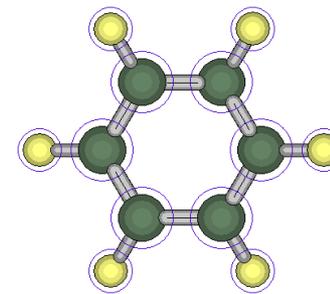
Ctrlキーを押しながら、
原子を選択(部分選択)



Ctrlキーを押しながら、
画面をドラッグ(範囲選択)



Shiftキーを押しながら、
分子をクリック(分子選択)

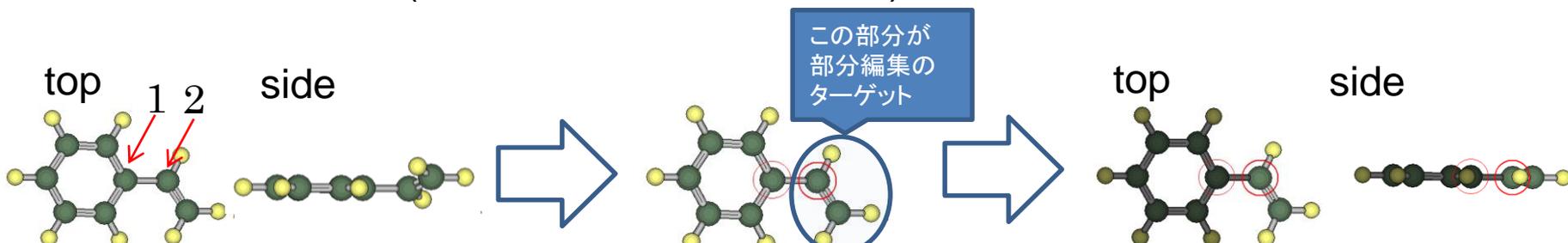


青いサークルで囲まれた部分選択状態で、
編集 | 部分編集を使えば柔軟な分子モデリングが可能である。

Appendix (部分編集について)

編集 | 部分編集には以下の二つの使い方がある。

部分選択なしの場合 (単分子のモデリングに有利)

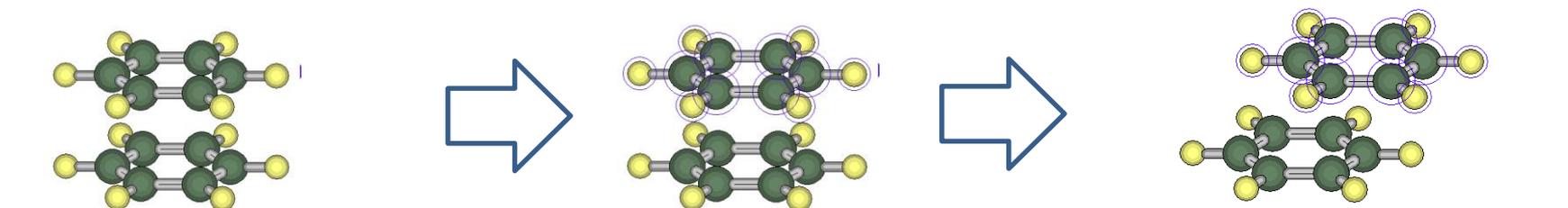


番号順に矢印の原子をクリック

Ctrl + R
(部分回転)

ドラッグ操作で部品を回転

部分選択ありの場合 (複数分子のモデリングに有利)



Shiftを押しながら矢印の分子をクリック

Ctrl + M
(部分移動)

ドラッグ操作で部品を移動

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

