

# Winmostar チュートリアル

## 分子モデリング (有機分子編)

V8.007

株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2018/01/30

# 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

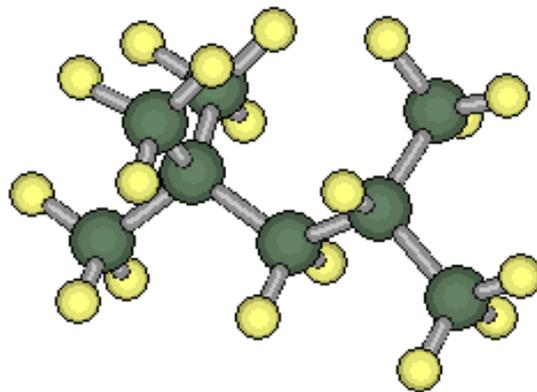
## V. Uric Acid

部分削除

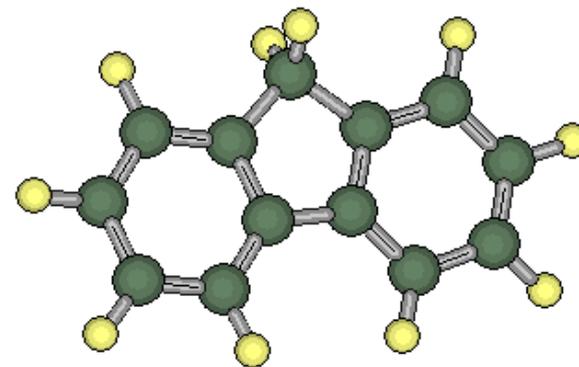
## Appendix

部品登録

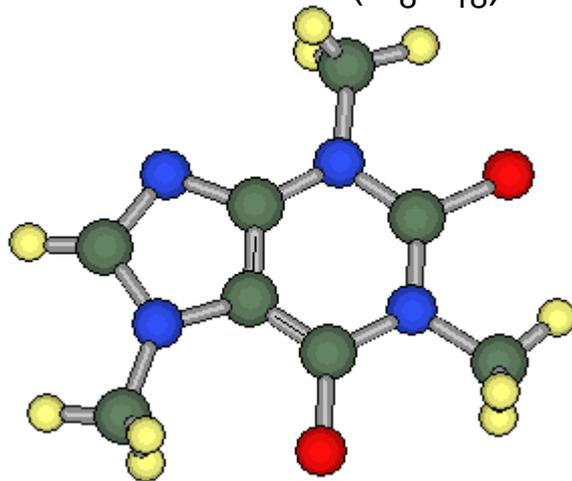
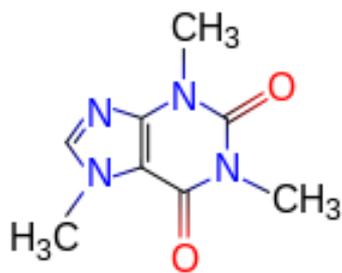
# I. 分子の一覧



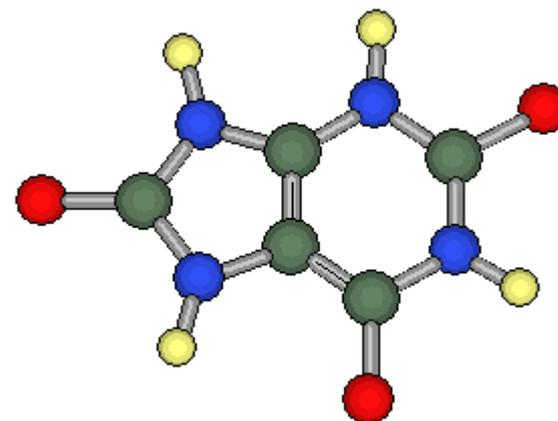
isooctane (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>)



fluorene (C<sub>13</sub>H<sub>10</sub>)



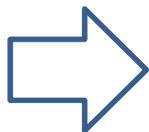
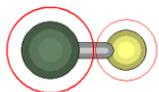
caffeine (C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>)



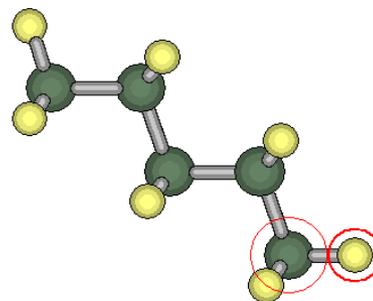
uric acid (C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>)

## II. Isooctaneのモデリング

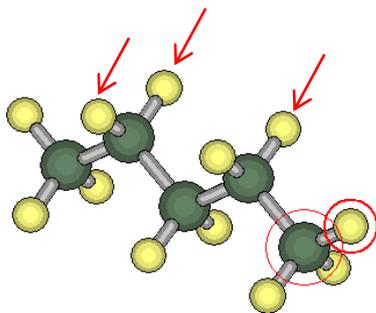
1. ファイル | 新規をクリック。  
(C-H骨格が描画される。)  
Replボタンを5回クリック。



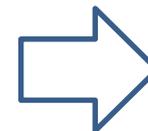
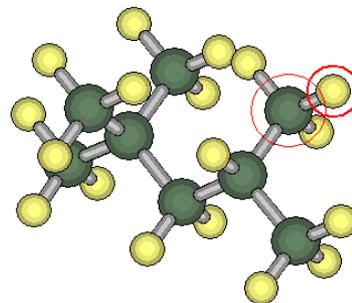
2. *n*-pentane骨格が完成する。  
カメラの位置を微調整する。



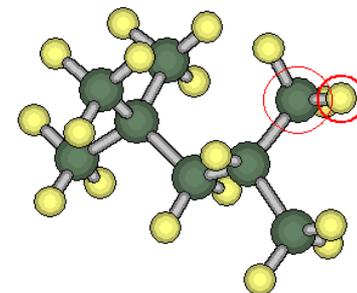
3. 矢印の先のH原子上で右クリック。



4.  (クリーン)をクリック。

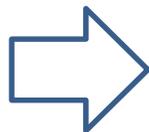
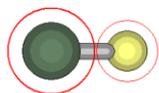


5. 必要に応じて保存。

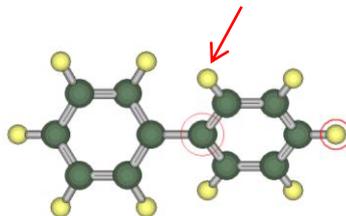


## III. Fluoreneのモデリング1

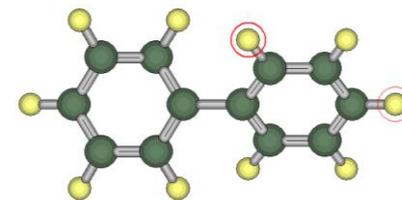
1. ファイル | 新規をクリック。  
-C6H5をクリック。  
Replを2回クリック。



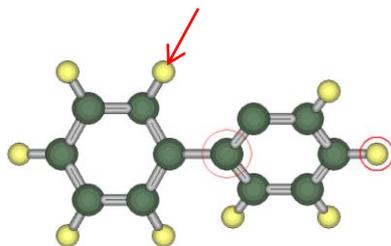
2. biphenyl骨格が完成する。  
矢印の水素原子をクリック。



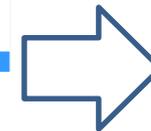
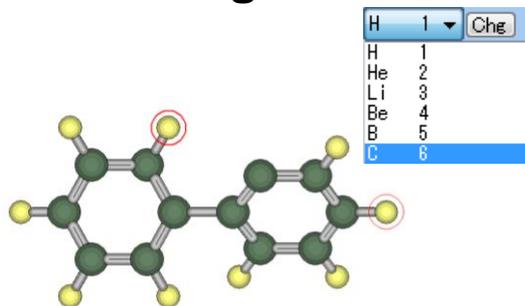
3. 原子削除  
をクリック。



4. 矢印の先のH原子上でクリック。



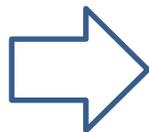
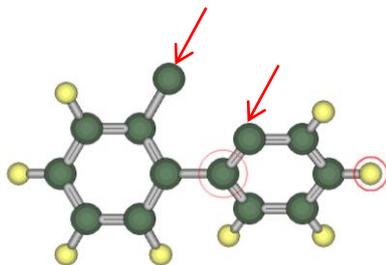
5. 原子選択にてCを  
選択し、Chgをクリック。



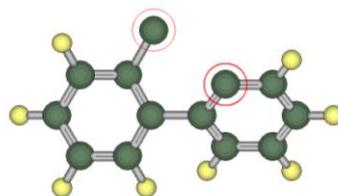
次のページへ

## III. Fluoreneのモデリング2

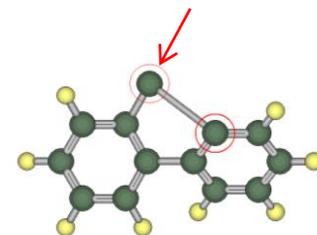
6. 矢印の先の  
二つのC原子をクリック。



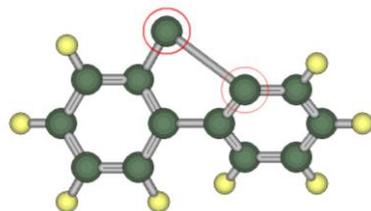
7.  (結合付加)アイコン  
をクリック。



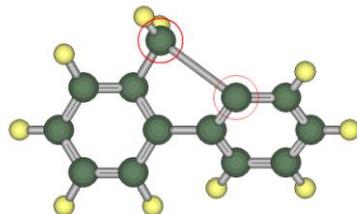
8. 矢印の先の  
C原子をクリック。



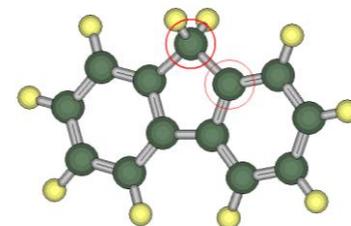
9.  (水素付加)アイコン  
を二回クリック。



10.  (クリーン)アイコン  
をクリック。

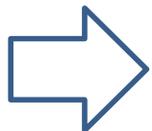
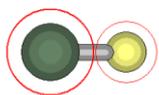


11. 必要に応じて保存。

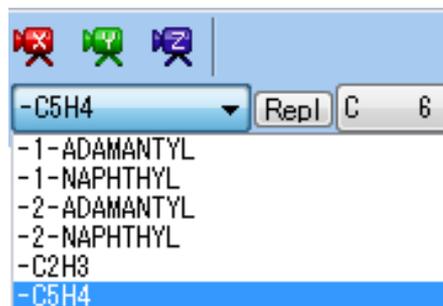


## IV. Caffeineのモデリング1

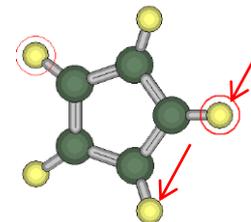
1. ファイル | 新規をクリック。  
(C-H骨格が描画される。)



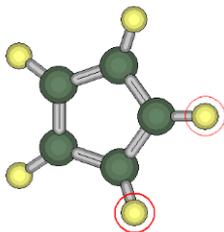
2. 部品選択  
から-C5H4を選択後、  
Replをクリック



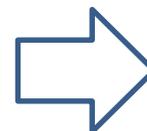
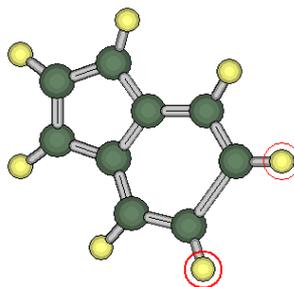
3. CP環が描画される。  
矢印の先の  
二つのH原子をクリック。



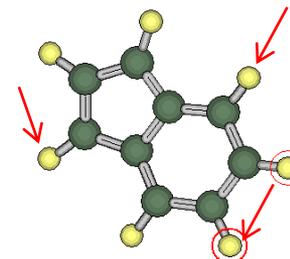
4. 編集 | 環構築をクリック  
(キーボードのF9でもよい。)



5.  (クリーン)をクリック。

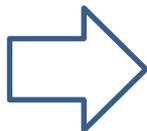
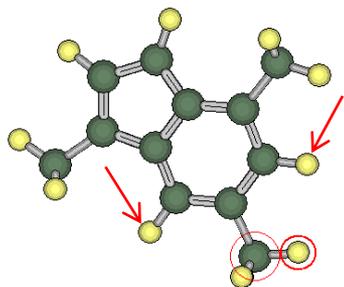


6. -CH3をクリックし、  
矢印の先の  
3つの水素上で右クリック

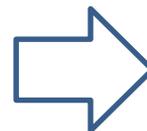
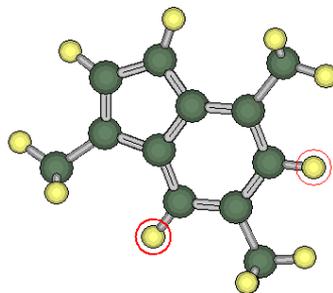


## IV. Caffeineのモデリング2

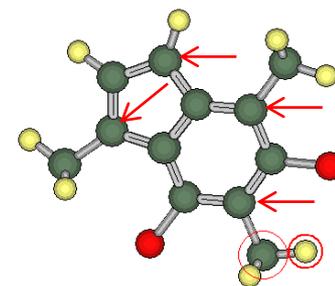
7. 矢印の先の  
二つのH原子をクリック。



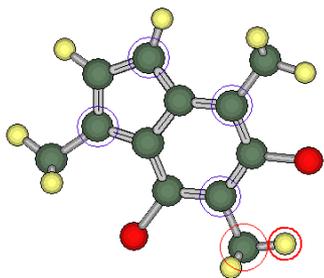
8. 原子選択からOを選択し、  
Chgを2回クリック



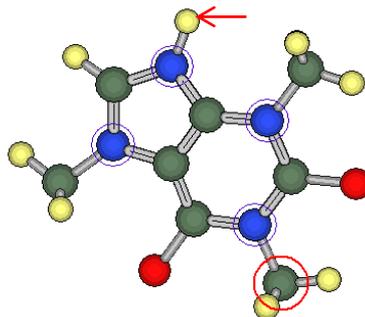
9. 矢印の先の4つのC原子を  
Ctrlを押しながらクリック  
(部分選択)



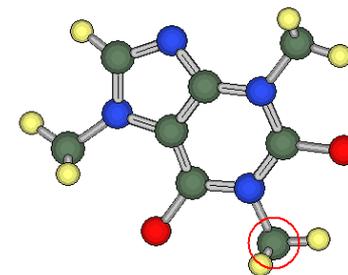
10. 原子選択からNを選択し、  
Chgをクリック(一括置換)



11. 矢印の先のH原子を  
クリックし、原子削除  
をクリック。

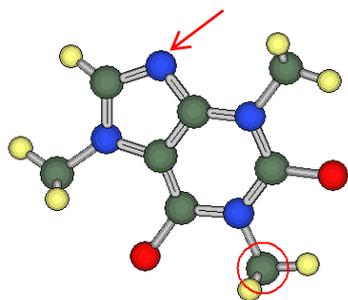


12. 次のモデリングに進む前に  
File | 名前を付けて保存をクリック  
(Caffeine.datとして保存)

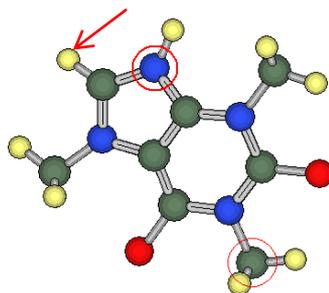


# V. Uric Acidのモデリング

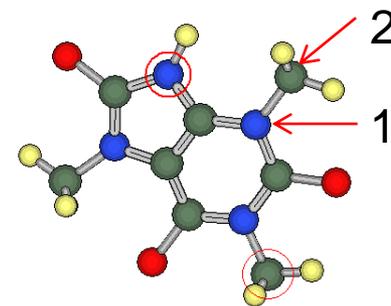
1. Caffeineから開始。  
矢印の先のN原子をクリックし、**+H**をクリック。



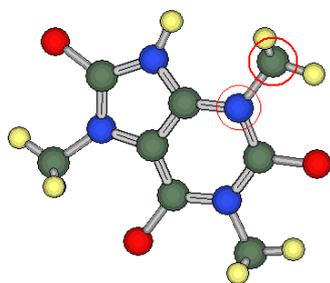
2. 矢印の先のH原子を選択し、**原子選択**からO原子を選択し、**Chg**をクリック



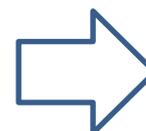
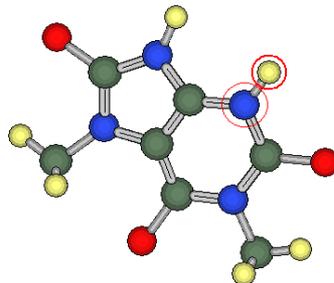
3. 矢印の先の原子を  
順番通りにクリック



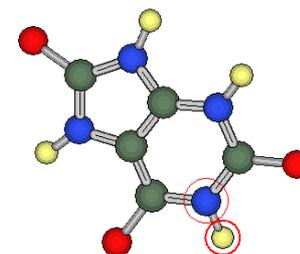
4. **編集 | 部分編集 | 部分削除**  
をクリック(ショートカット:**Ctrl+d**)  
Selectionでは**Delete**をクリック



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。



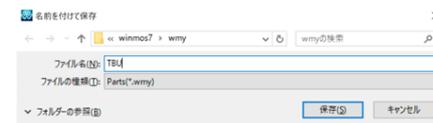
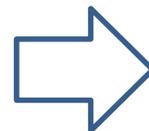
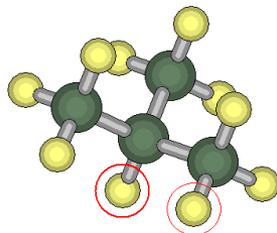
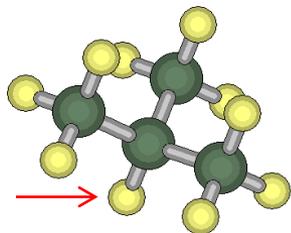
6. 必要に応じて保存



# Appendix (部品登録)

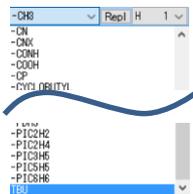
モデリングした分子はユーザ定義の部品(置換基)として登録できる。  
*tert*-Butyl基の登録手順を以下に示す。

1. イソブタンをモデリング。  
矢印の水素をクリック。
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。

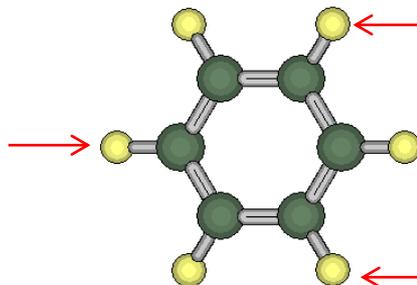


ここで選択した水素原子の位置  
が置換基の始点に設定される。

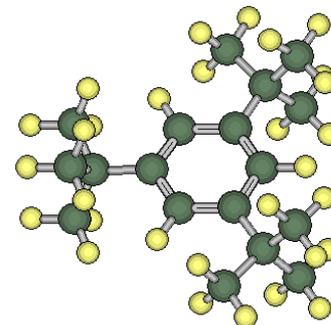
4. 部品選択にTBUが  
表示される。



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  
録しておくると便利。



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...](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

👍 いいね!