

# Winmostar チュートリアル

## 分子モデリング (超分子編)

V8.007

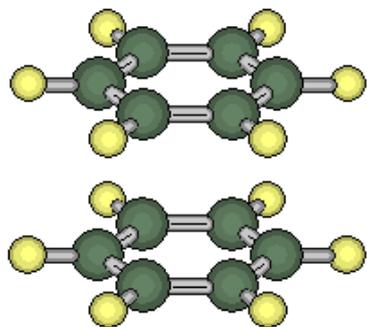
株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2018/01/30

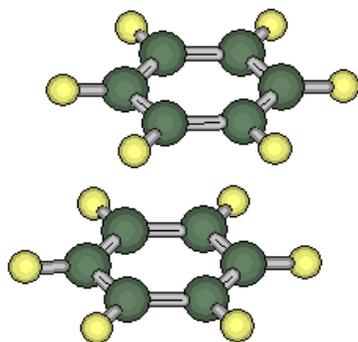
# Contents

- I. 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

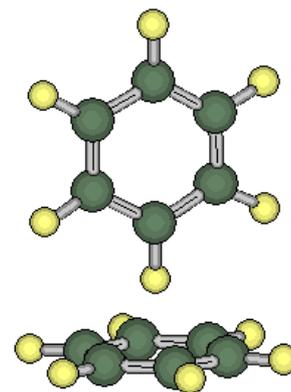


Sandwich

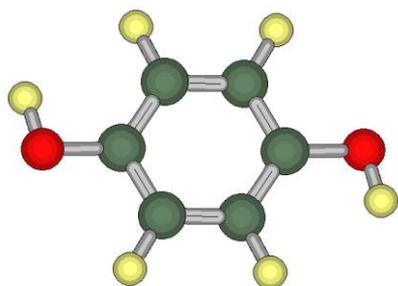


Parallel-displacement

ベンゼン二量体

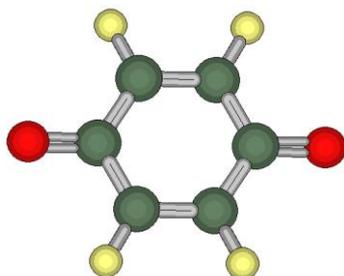


T-shaped



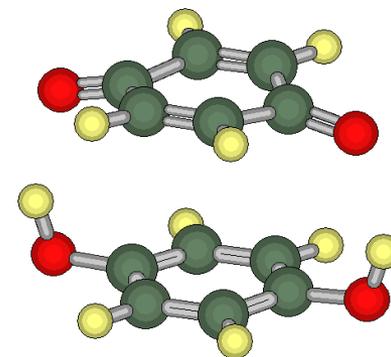
doner

+



accepter

→

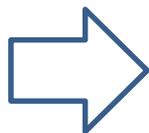
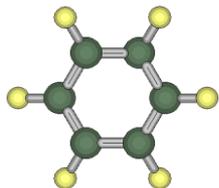


complex

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

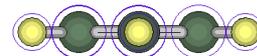
1. ベンゼンをモデルし、  
ツールバーの  
(X軸視点)をクリック



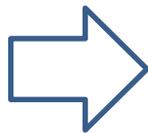
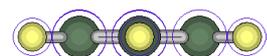
2. Shiftを押しながら、  
分子をクリック(分子選択)



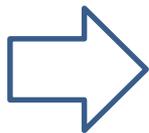
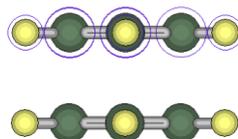
3. Ctrl+C (部分コピー)を押し、  
Ctrl+V(部分貼り付け)



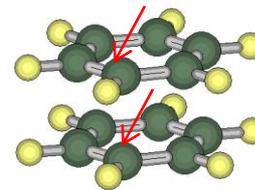
4. 画面上方向にドラッグ



5. 視点を移動

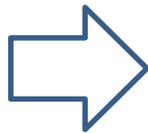
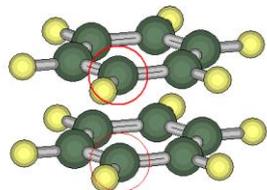


6. 矢印の二原子をクリック

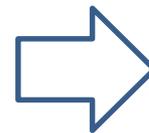
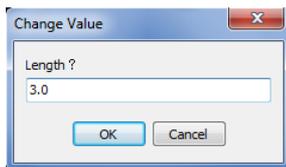


マウสดラッグで貼り付け位置を決定してください

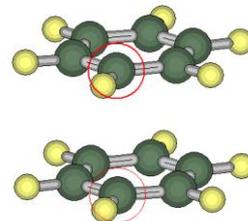
7. 編集 | 変更 | 距離  
をクリック



8. Lengthに3.0を入力し、  
OKをクリック

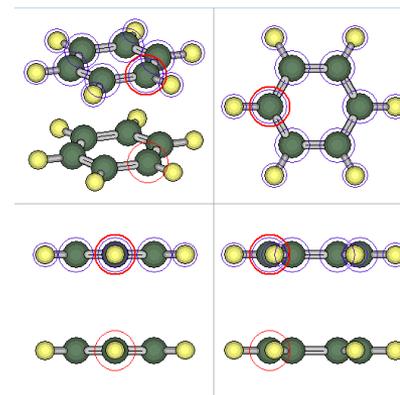
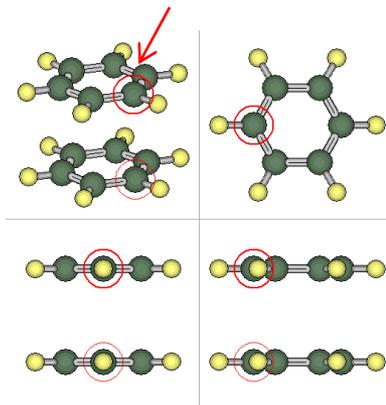
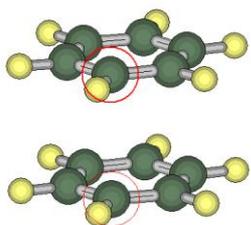


9. 必要に応じて保存

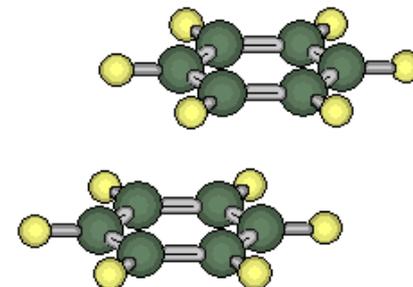
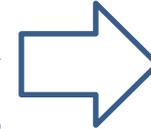
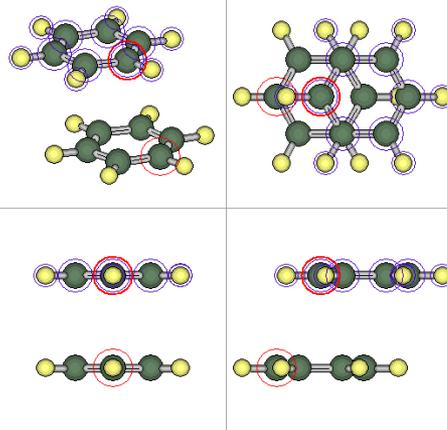
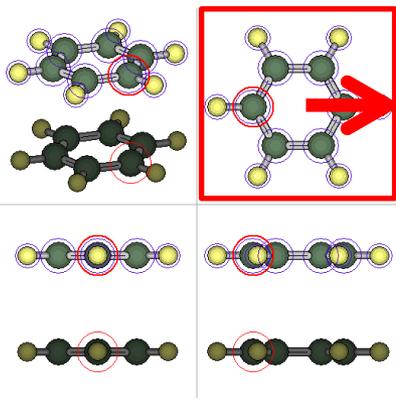


# III. ベンゼン二量体（平行ずれ型）のモデリング

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。

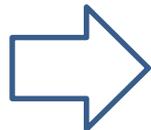
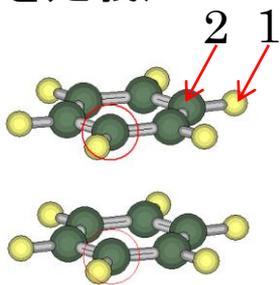


4. 右上の画面上でドラッグ
5. 視点を移動
6. 必要に応じて保存

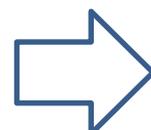
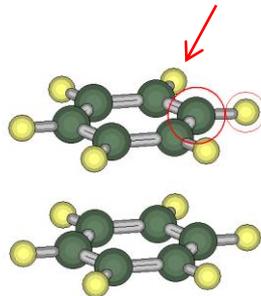


## IV. ベンゼン二量体 (T字型) のモデリング

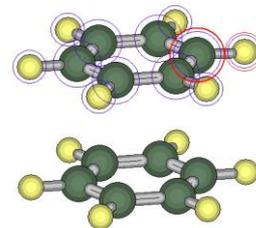
1. ベンゼン二量体 (サンドウィッチ型) からスタート  
数字の順番にクリック  
(軸を定義)



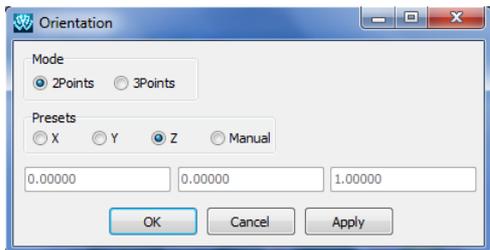
2. Shiftを押しながら、  
矢印の分子をクリック  
(配向させる分子を指定)



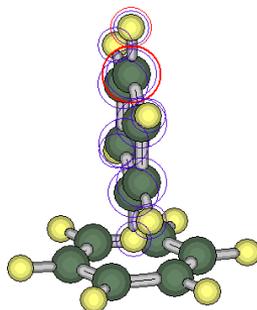
3. 編集 | 部分編集 | 部分配向  
をクリック



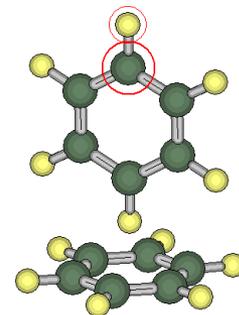
4. Modeに2 points,  
Presets にZ を選択後  
OKをクリック



5. 分子の距離等は三面図、  
部分移動を使って微調節

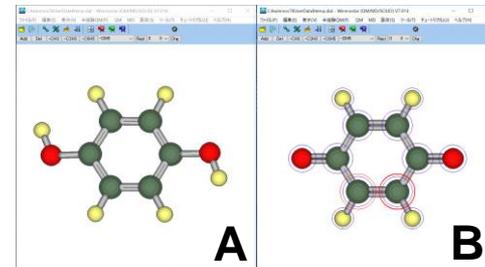
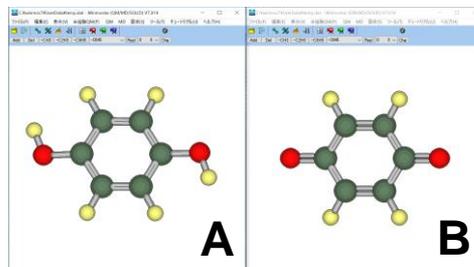
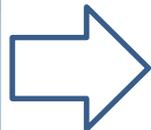
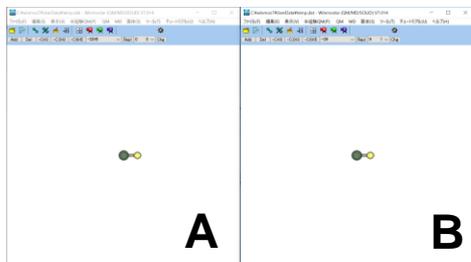


6. 必要に応じて保存

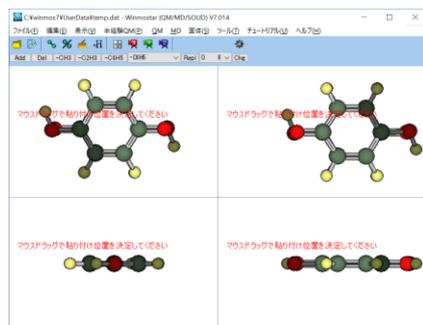


# V. 電荷移動錯体のモデリング

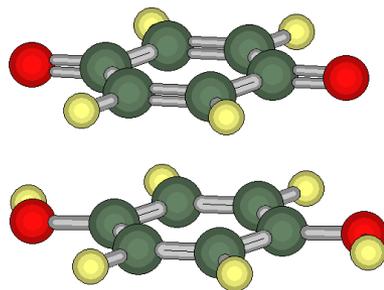
1. Winmostarを2つ起動する。ここではそれぞれをWindow A, Bと呼ぶ。
2. Window AとWindowBでそれぞれ分子をモデリングする。
3. WindowBにて分子を **Shift+クリック**し(分子選択)、**Ctrl+C**を押す。(部分コピー)



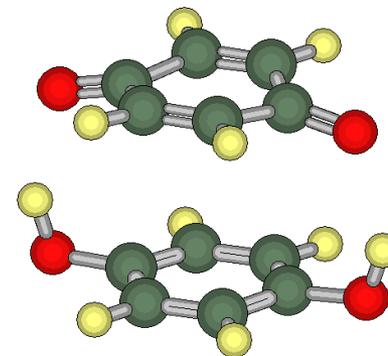
4. WindowAをクリックし、**Ctrl+V**を押す。(部分貼り付け) 適宜分子の配置を調節する。



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



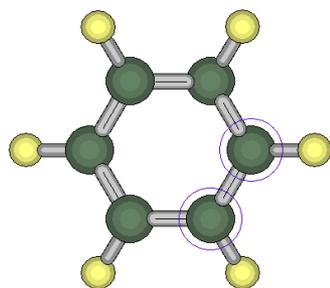
6. 最適化後の分子構造



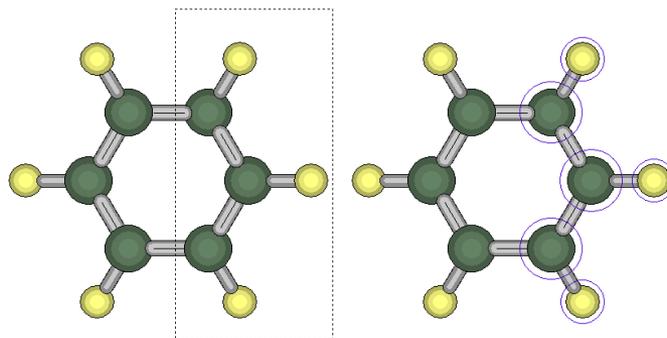
# Appendix (部分選択)

部分選択(青いサークル)の方法は以下の三種類がある。

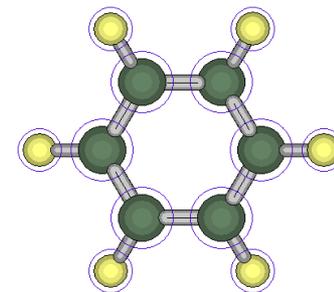
Ctrlキーを押しながら、  
原子を選択(部分選択)



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)

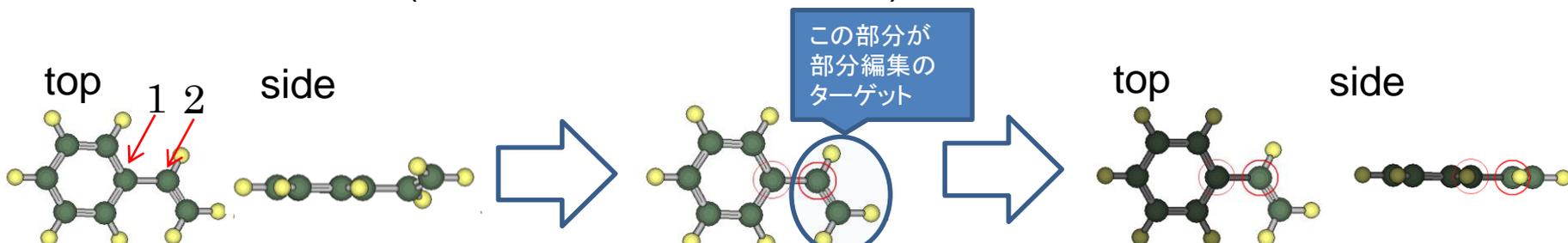


青いサークルで囲まれた部分選択状態で、  
編集 | 部分編集を使えば柔軟な分子モデリングが可能である。

# 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)

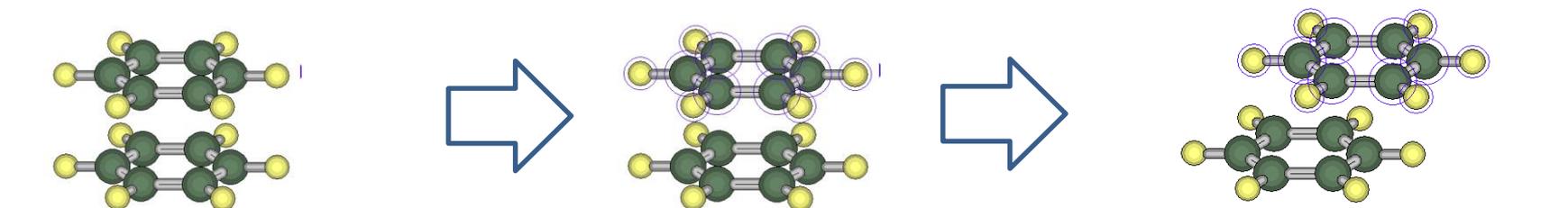


番号順に矢印の原子をクリック

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...](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!