

Winmostar チュートリアル

分子モデリング (金属錯体編)

V8.007

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2018/01/30

Contents

I. 金属錯体の一覧

II. Ferrocene

部分貼り付け、部分重心

III. Zn[Saloph]

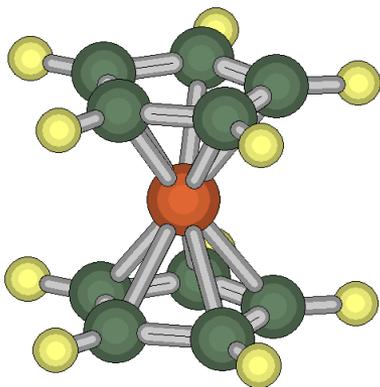
配向、鏡像体生成

IV. Ru[Tris(2,2'-bipyridyl)]

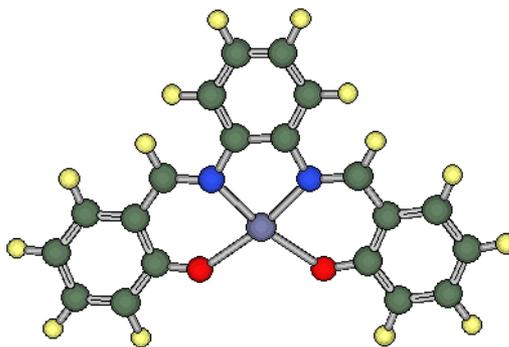
錯体用置換基(-PDH5)の利用、クリーン

I. 金属錯体の一覧

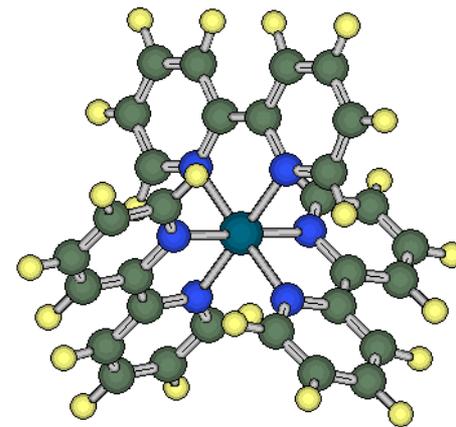
金属原子を含む分子に対しては力場を用いるクリーンは必ずしも成功しない。
本チュートリアルでは、金属錯体を効率的にモデリングする手順を示す。



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



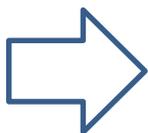
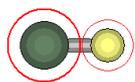
Zn(saloph) ($\text{ZnC}_{20}\text{N}_2\text{H}_{10}\text{O}_2$)



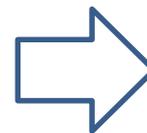
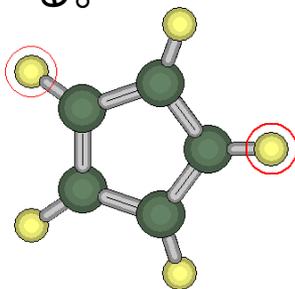
$[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ($\text{RuC}_{30}\text{N}_6\text{H}_{24}$)

II. Ferroceneのモデリング

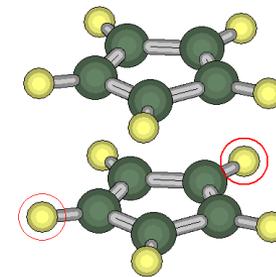
1. -C5H4部品を用いて
CP環をモデリングする。



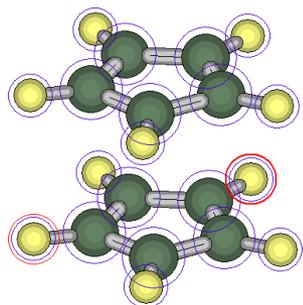
2. 分子モデリングチュートリアル
(超分子編)を参考にCP環を平
行に並べる。



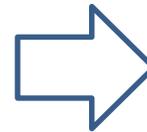
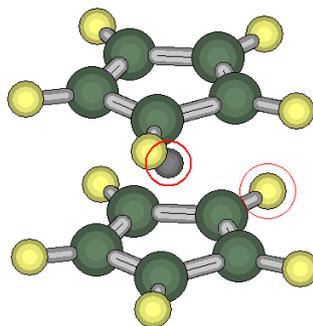
3. 全体を部分選択する。



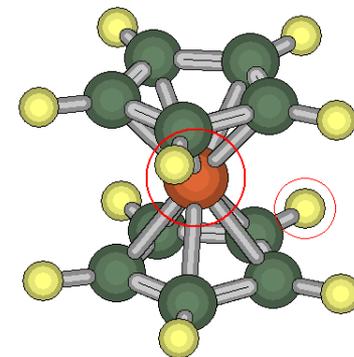
4. 編集 | 部分編集 | 部分重心
をクリックする。(重心位置にダ
ミー原子が置かれる。)



5. ダミー原子を
Zn原子に置換する。

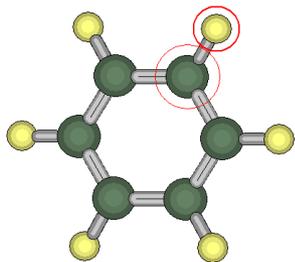


6. 必要に応じて保存。

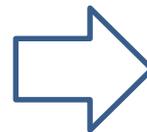
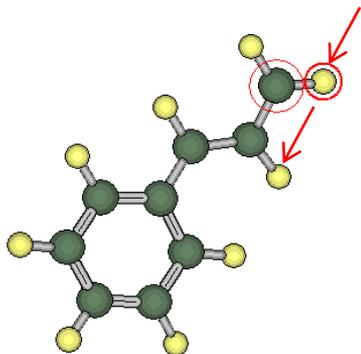


II. Zn(saloph)のモデリング

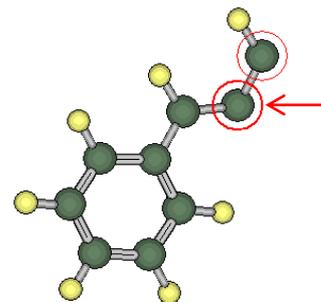
1. ベンゼン環からスタート。
-CH₂部品で三回置換し、
クリーンを行う。



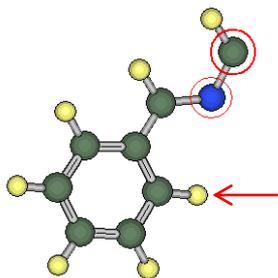
2. 矢印の水素を削除する。



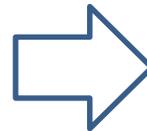
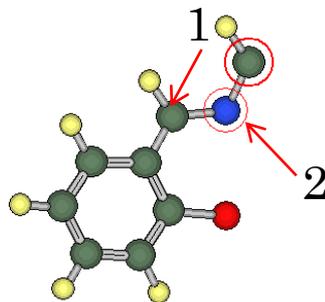
3. 矢印の水素を
窒素Nに置換する。



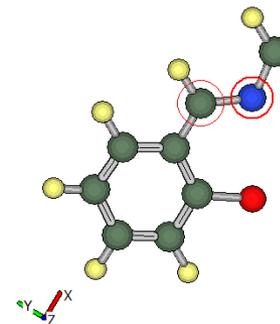
4. 矢印の水素を
酸素Oに置換する。



5. 矢印1, 2の順番で
原子をクリックする。

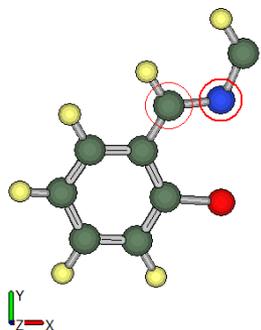


6. 編集 | 配向 | 設定をク
リックする。(選択した軸と
X軸が一致する。)

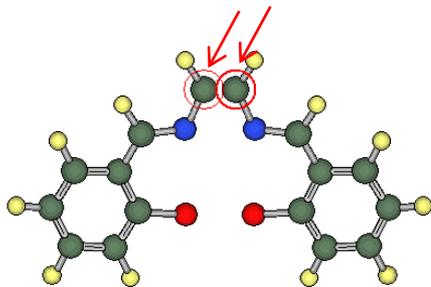


II. Zn(saloph)のモデリング

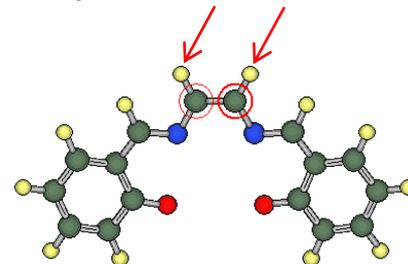
7. 編集 | 鏡像体生成をクリックする。



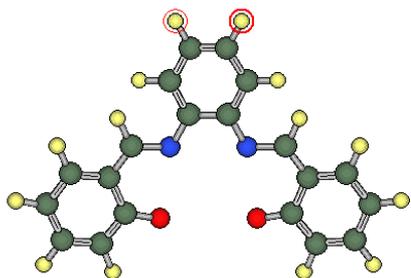
8. 矢印の炭素間に結合を作り、クリーンする。



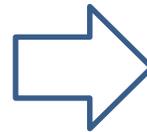
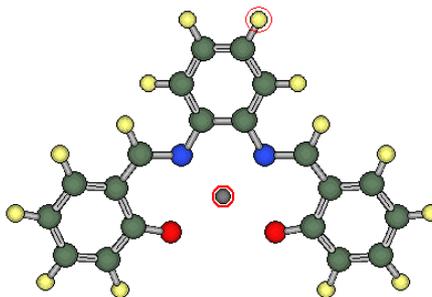
9. 二つの水素を選択し、編集 | 環構築をクリックする。



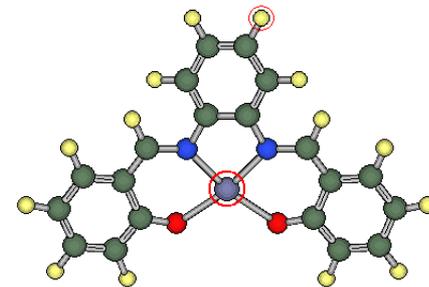
10. 全てのN, Oを部分選択し、編集 | 部分重心をクリックする。



11. ダミー原子をZnで置換する。

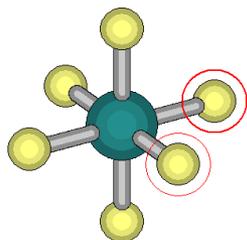


12. 必要に応じて保存

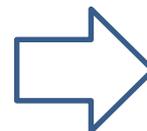
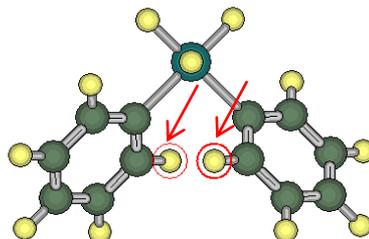


II. $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ のモデリング

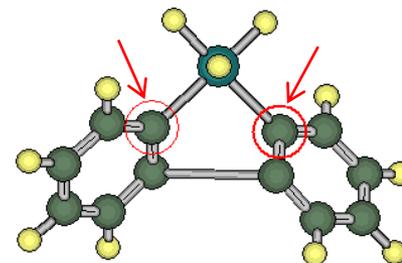
1. -PDH5部品からスタート
(PdはRuに置換しておく。)
二つのHを-C6H5で置換する。



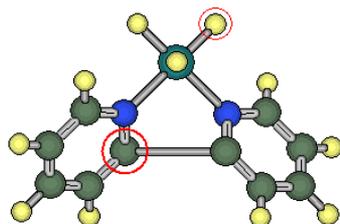
2. 矢印の水素を削除し、
隣接する炭素を結合する。



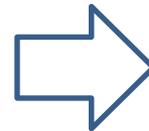
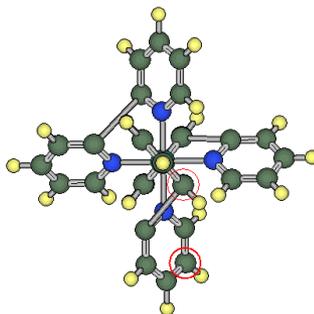
3. 矢印の炭素を窒素に
置換する。



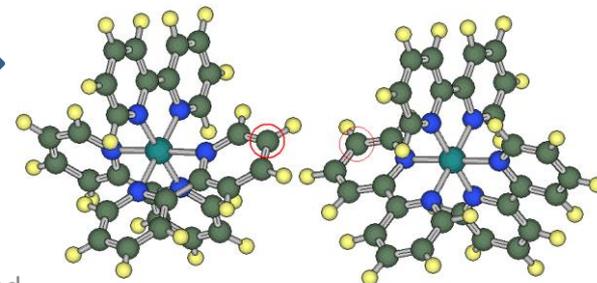
4. ここまでの操作をRuに
配位する全ての水素に対
して行う。



5. クリーンをクリック



6. この錯体にはエナンチオマー
が存在する。適宜、編集 | 座標
反転または 編集 | 鏡像体生成
を利用するとよい。



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

👍 いいね!