

Winmostar™ チュートリアル

ハンセン溶解度パラメータ & 構造物性相関(QSPR)モデル

V9.3.0

株式会社クロスアビリティ

2019年7月11日

I. 単分子の計算

Winmostarを起動し、メインウィンドウにハンセン溶解度パラメータ(HSP)や各種物性を計算したい分子を作成し、アドオン | Hansen HP & QSPRモデルを選択する。

Quantum ESPRESSO

アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィン

- CONFLEX...
- Fragment ER...
- DCDFTBMD
- Hanse SP & QSPRモデル...**

Winmostar

ostar N= 11 C3H8 M= 44.1
 nd Order: 11 - 8 - 2 - 5
 nd Atom: X= 3.0801 Y= -1.4124 Z= 0
 n= 1.1 Angle= 109 Dihedral= -154.871 Lper= 0.901

Z-Matrix	XYZ
1 C	0.00
2 C	1.49
3 H	-0.35
4 H	-0.35
5 H	-0.35
6 H	1.85
7 H	1.85
8 C	1.98
9 H	1.60
10 H	1.60
11 H	3.08

I. 単分子の計算

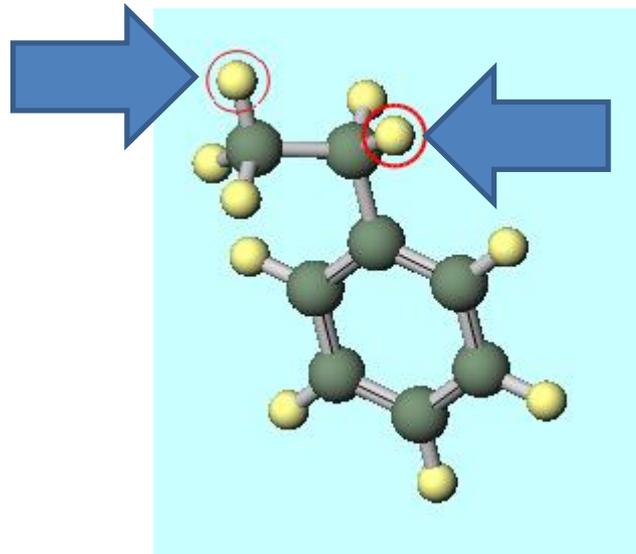
Calc Hansen SPボタンを押して、csvファイルの出力ファイル名を指定すると、各種のHSPおよび物性が書かれたcsvファイルが開かれる。
 各値の意味は[ユーザマニュアル](#)を参照のこと。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
1	totHSP	dD14	dP14	dH14	dHdo14	dHac14	MVol14	polym_tot	polym_dD	polym_dP	polym_dH	polym_dH	polym_dH	Boiling Po	Melting Po	Log10(Vis	Standard G	Standard G
2	14.54102	13.83	3.25	3.1	0.75	2.38	75.731	0	0	0	0	0	0	248.13	123.32	-0.991	-110.38	-4.87344
3																		

また、コマンドラインからも処理可能なため、バッチファイルを作成することで連続で自動計算することも可能である。
 詳細は[ユーザマニュアル](#)を参照のこと。

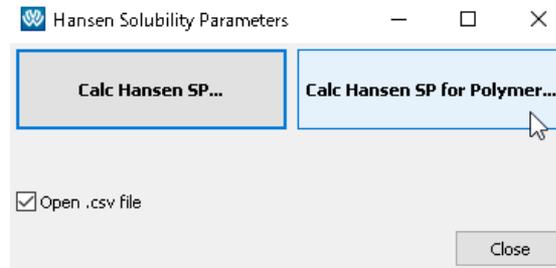
II. ポリマーの計算

メインウィンドウで、計算したいポリマーの繰り返し単位を作成し、隣接するモノマーと共有結合する箇所を2か所左クリックする。
(ポリマービルダのモノマー登録と同じ操作方法)
下図はポリスチレンの場合である。



II. ポリマーの計算

Calc Hansen SP for Polymerボタンを押して、csvファイルの出力ファイル名を指定すると、各種のHSPおよび物性が書かれたcsvファイルが開かれる。
HSPについては、「polym_」という接頭辞が付いた形で出力される。



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
1	totHSP	dD14	dP14	dH14	dHd14	dHac14	MVol14	polym_tot	polym_dD	polym_dP	polym_dH	polym_dH	polym_dH	Boiling Po	Melting P	Log10(Vis	Standard	Standard G
2	0	0	0	0	0	0	95.8	18.39299	17.85	2.55	3.63	2.44	2.27	418.07	274.03	0.015	22.71504	149.0657

<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友
アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報
http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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_au_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 · 公開