

# Winmostar チュートリアル

## 分子モデリング (有機分子編)

V9.0.0

株式会社クロスアビリティ  
2019年1月15日

# 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

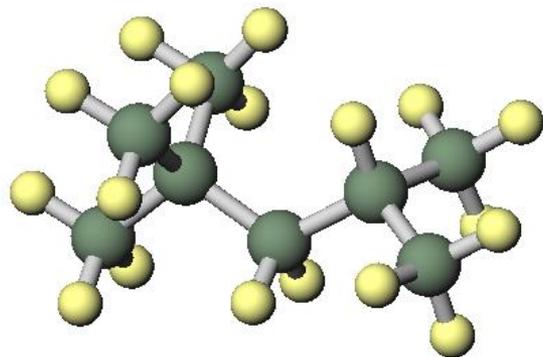
## V. Uric Acid

部分削除

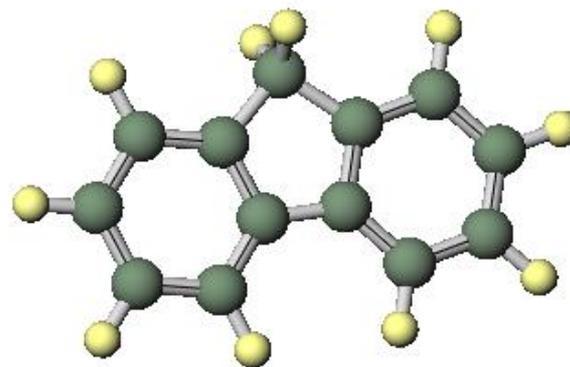
## Appendix

部品登録

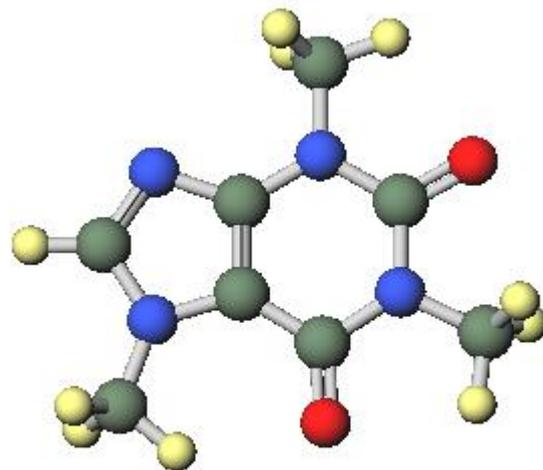
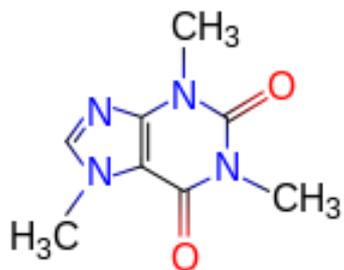
# I. 分子の一覧



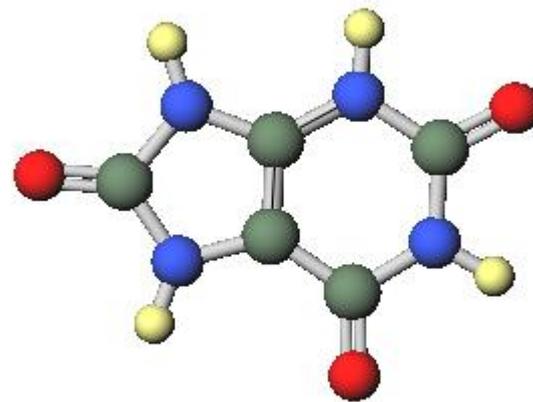
isooctane (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>)



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



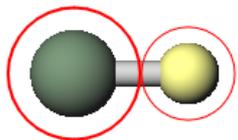
caffeine (C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>)



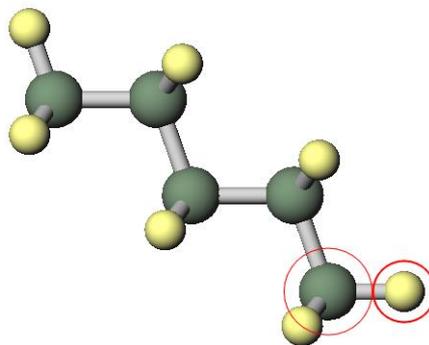
uric acid (C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>)

## II. Isooctaneのモデリング

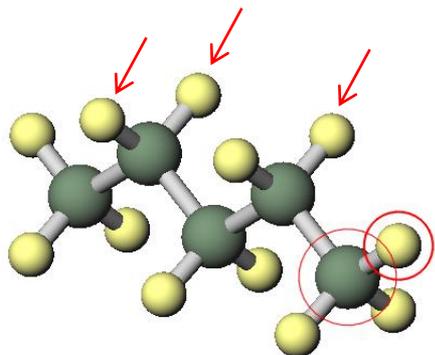
1. ファイル | 新規をクリック。  
(C-H骨格が描画される。)  
Replボタンを5回クリック。



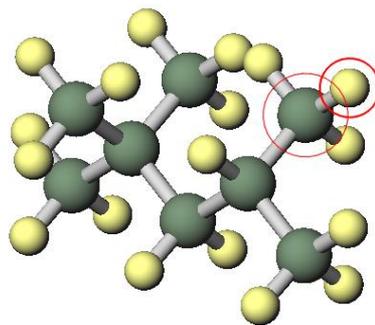
2. *n*-pentane骨格が完成する。  
カメラの位置を微調整する。



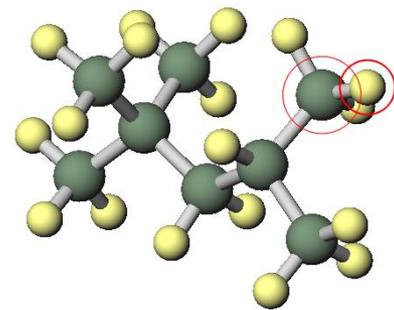
3. 矢印の先のH原子上で右クリック。



4.  (クリーン)をクリック。

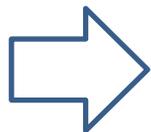
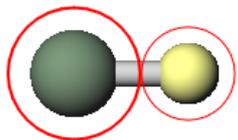


5. 必要に応じて保存。

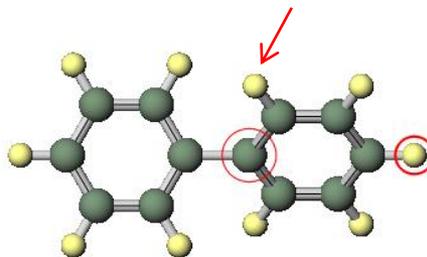


## III. Fluoreneのモデリング1

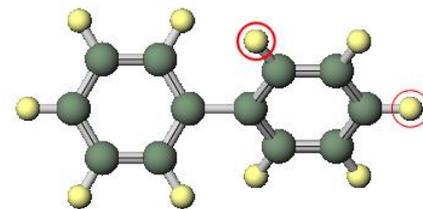
1. ファイル | 新規をクリック。  
-C6H5をクリック。  
Replを2回クリック。



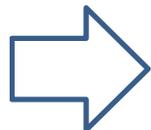
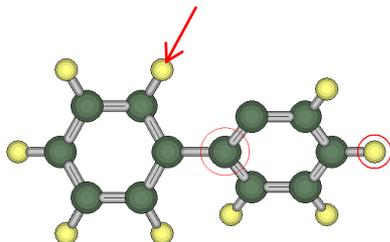
2. biphenyl骨格が完成する。  
矢印の水素原子をクリック。



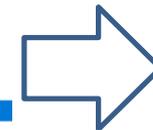
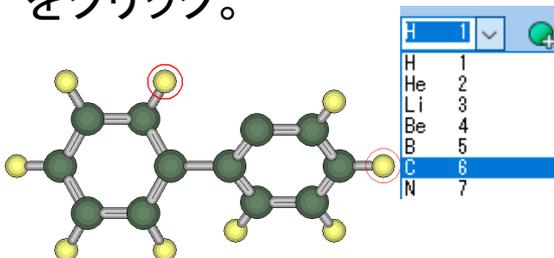
3.  (原子を削除) をクリック。



4. 矢印の先のH原子上でクリック。



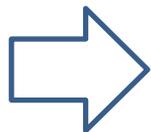
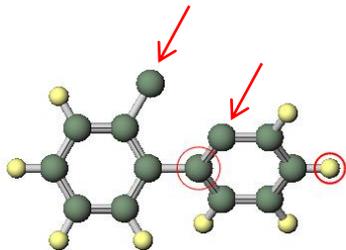
5. 原子選択にてCを選択し、 (元素を変更) をクリック。



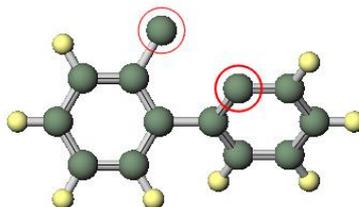
次のページへ

## III. Fluoreneのモデリング2

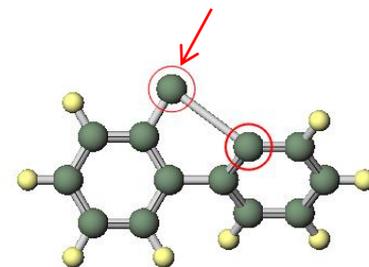
6. 矢印の先の  
二つのC原子をクリック。



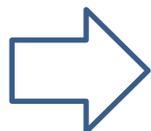
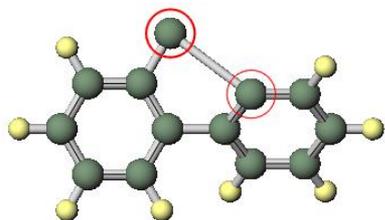
7.  (結合付加)アイコン  
をクリック。



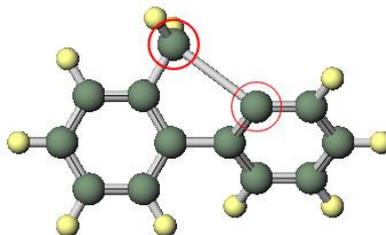
8. 矢印の先の  
C原子をクリック。



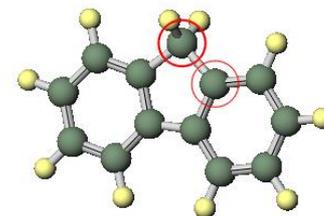
9.  (水素付加)アイコン  
を二回クリック。



10.  (クリーン)アイコン  
をクリック。

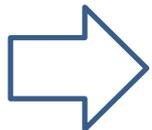
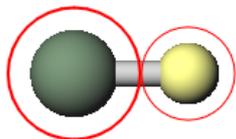


11. 必要に応じて保存。

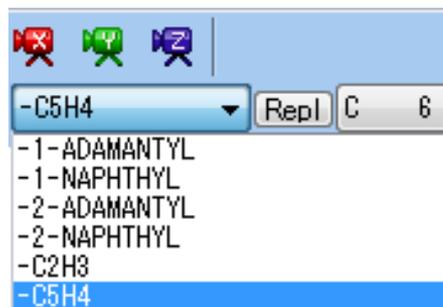


## IV. Caffeineのモデリング1

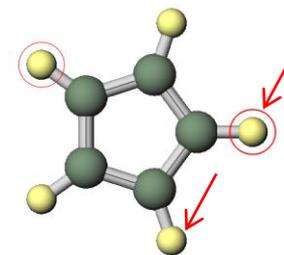
1. ファイル | 新規をクリック。  
(C-H骨格が描画される。)



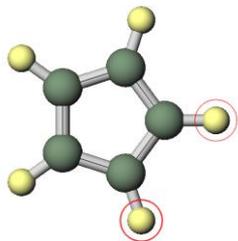
2. フラグメントを選択  
から-C5H4を選択後、  
Replをクリック



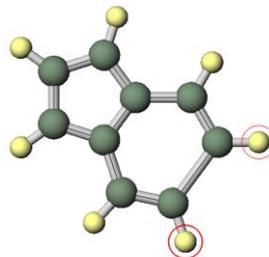
3. CP環が描画される。  
矢印の先の  
二つのH原子をクリック。



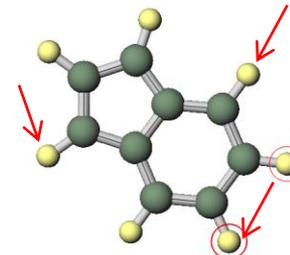
4. 編集 | 環構築をクリック  
(キーボードのF9でもよい。)



5. 🧼 (クリーン) をクリック。

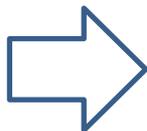
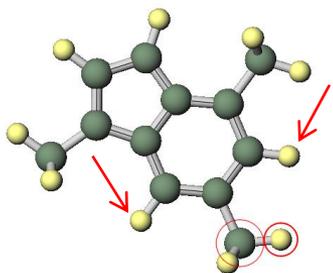


6. -CH3をクリックし、  
矢印の先の  
3つの水素上で右クリック

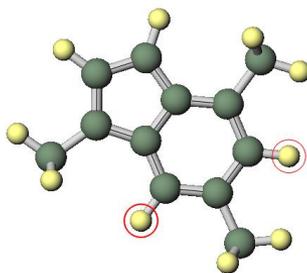


## IV. Caffeineのモデリング2

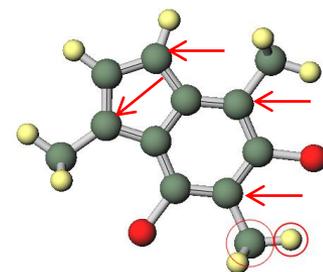
7. 矢印の先の  
二つのH原子をクリック。



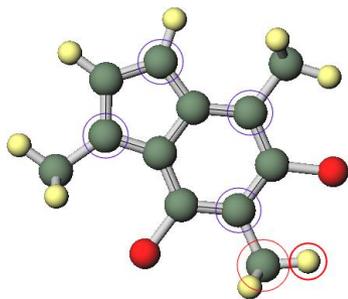
8. 元素選択からOを選択し、 (元素を変更)を2回クリック



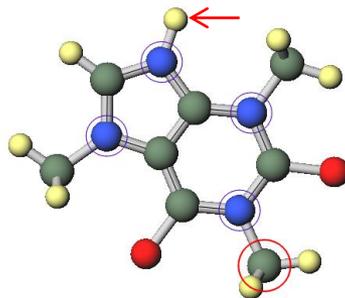
9. 矢印の先の4つのC原子を  
Ctrlを押しながらクリック  
(グループ選択)



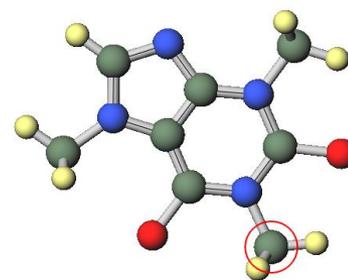
10. 元素選択からNを選択し、 (元素を変更)をクリック



11. 矢印の先のH原子を  
クリックし、 (原子を削除)  
をクリック。

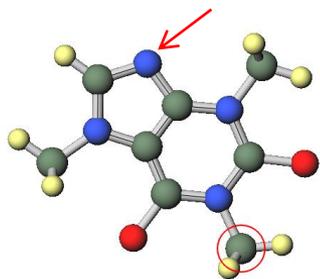


12. 次のモデリングに進む前に  
ファイル | 名前を付けて保存  
をクリック (Caffeine.datとして保存)

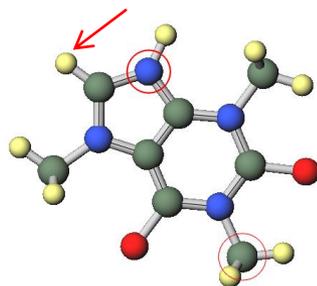


## V. Uric Acidのモデリング

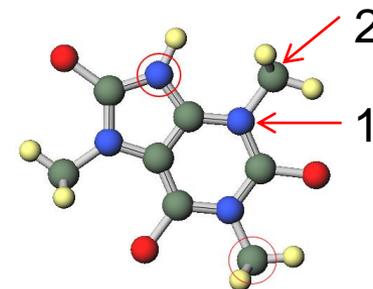
1. Caffeineから開始。  
矢印の先のN原子をクリックし、**+H**をクリック。



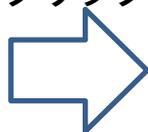
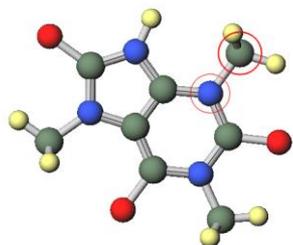
2. 矢印の先のH原子を選択し、**元素選択**からO原子を選択し、 (**元素を変更**)をクリック。



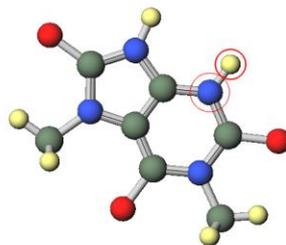
3. 矢印の先の原子を  
順番通りにクリック。



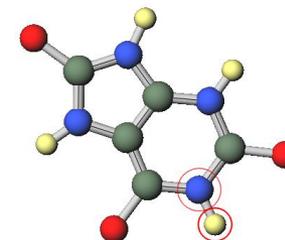
4.  (**グループ編集**) |  
**グループを削除**をクリック  
(ショートカット: **Ctrl+d**)  
Selectionでは**Delete**をクリック。



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。



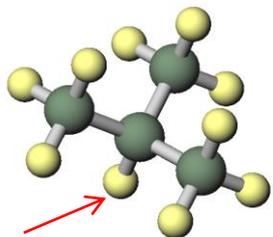
6. 必要に応じて保存



# Appendix (フラグメント登録)

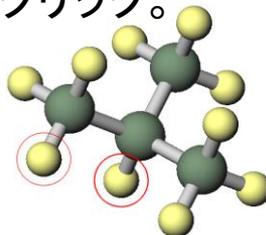
モデリングした分子はユーザ定義の部品(置換基)として登録できる。  
*tert*-Butyl基の登録手順を以下に示す。

1. イソブタンをモデリング。  
矢印の水素をクリック。

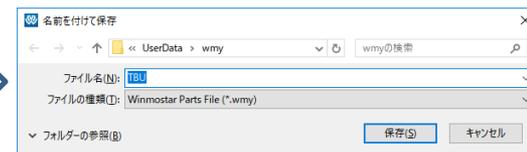


ここで選択した水素原子の位置  
が置換基の始点に設定される。

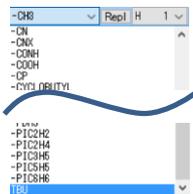
2. ツール | フラグメントを  
登録/置換 | フラグメントを  
登録をクリック。



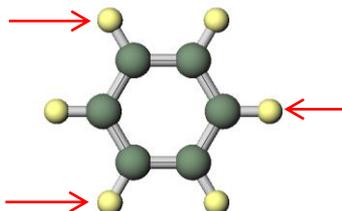
3. 名前を付けて保存。  
ここではTBUとする。



4. フラグメントを選択に  
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  
フラグメントとして登録して  
おくと便利。



<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

山口 達明

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...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...)

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