

Winmostar™ チュートリアル

分子モデリング (超分子編)

V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月8日

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

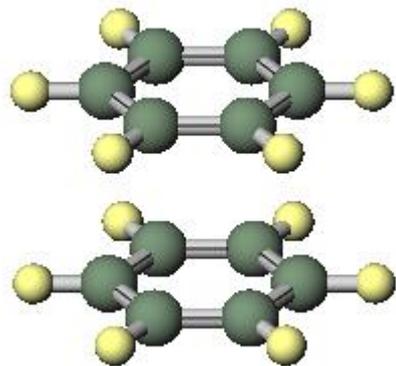
IV. ベンゼン二量体 – T字型

部分配向、部分回転

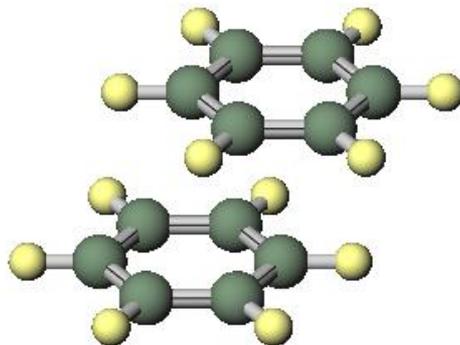
V. 電荷移動錯体

Winmostar™の多重起動

I. 超分子の一覧

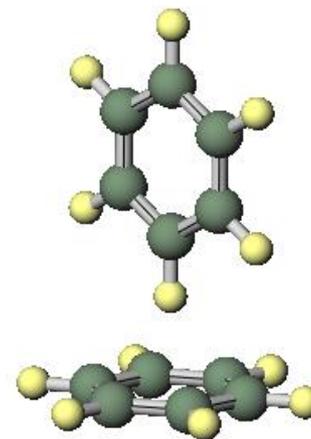


Sandwich

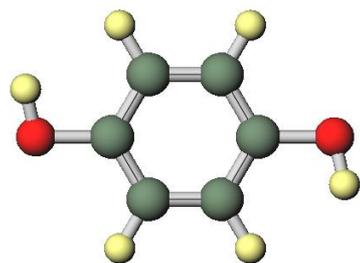


Parallel-displacement

ベンゼン二量体

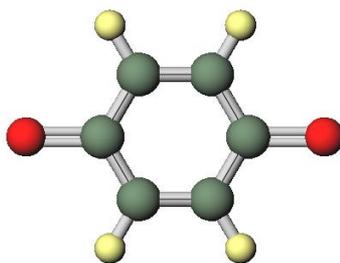


T-shaped



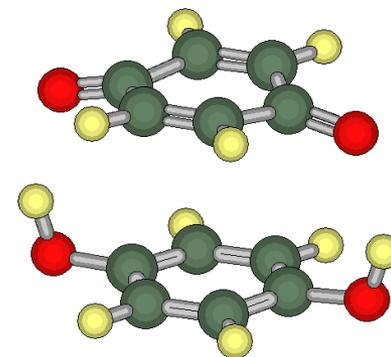
doner

+



accepter

→

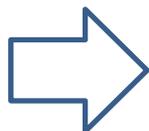
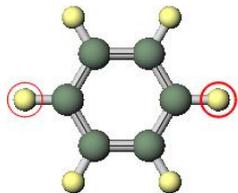


complex

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



3. Ctrl+C (グループをコピー)
を押し、
Ctrl+V(グループを貼り付け)

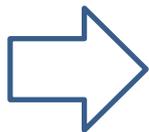
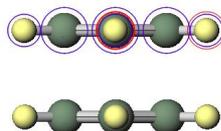


4. 画面上方向にドラッグ

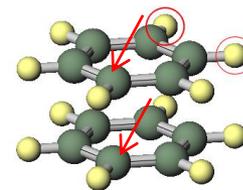
Drag to determine positions or press enter key.



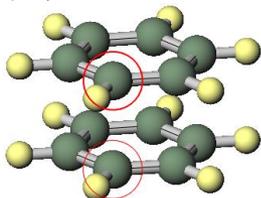
5. 視点を移動



6. 矢印の二原子をクリック



7. 編集 | 選択原子間の距離・
角度を変更 | 距離...
をクリック



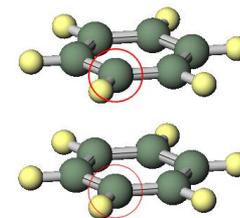
8. Lengthに3.0を入力し、
OKをクリック

Change Distance ×

Enter Distance [A]

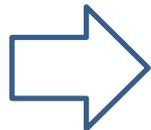
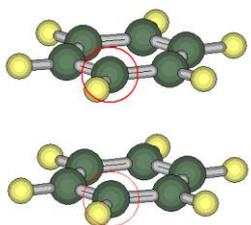


9. 必要に応じて保存

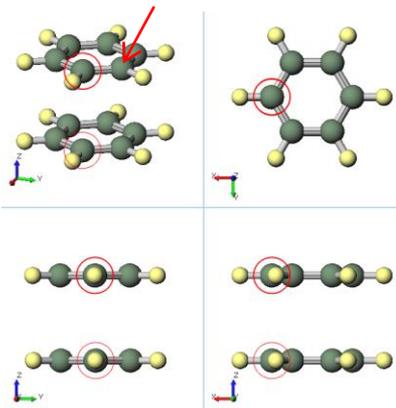


III. ベンゼン二量体（平行ずれ型）のモデリング

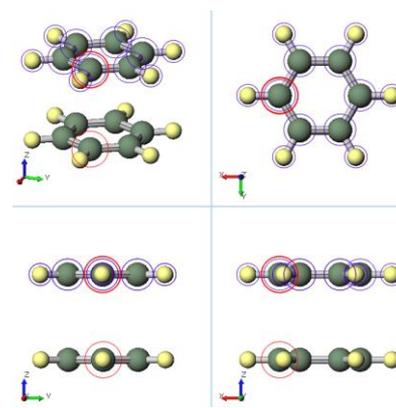
1. ベンゼン二量体（サンドウィッチ型）からスタート（三面図）をクリック



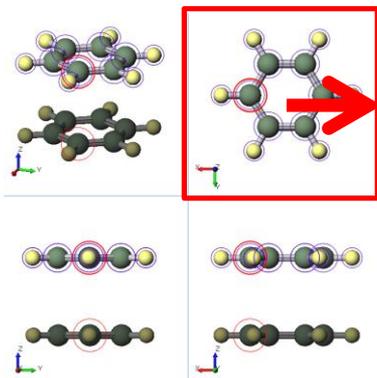
2. Shiftを押しながら、矢印の分子をクリック



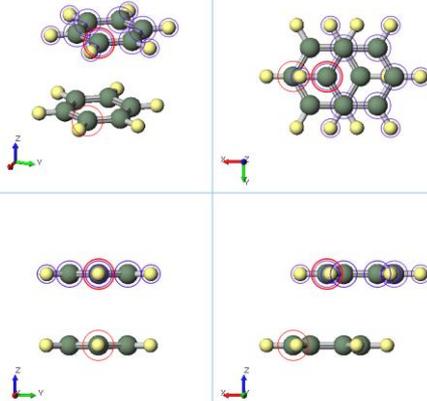
3. Ctrl + M (グループを移動) を押す。



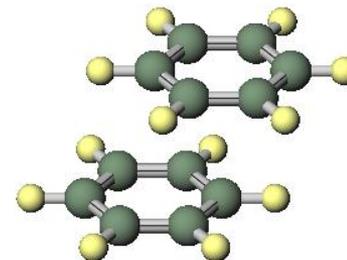
4. 右上の画面上でドラッグ



5. 視点を移動

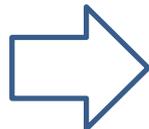
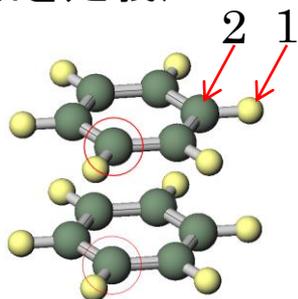


6. 必要に応じて保存

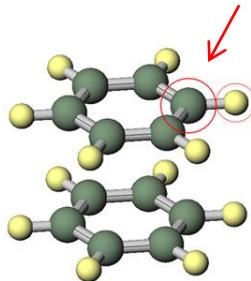


IV. ベンゼン二量体 (T字型) のモデリング

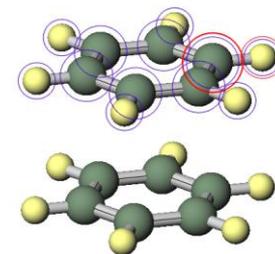
1. ベンゼン二量体 (サンドウィッチ型) からスタート
数字の順番にクリック
(軸を定義)



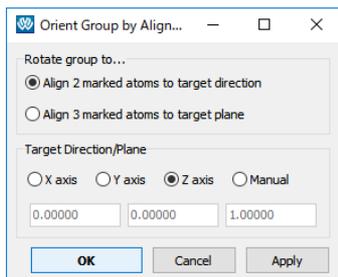
2. Shiftを押しながら、
矢印の分子をクリック
(配向させる分子を指定)



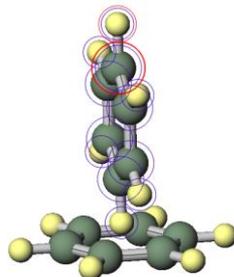
3.  (グループ編集) |
グループを回転 (配向を指定)
をクリック



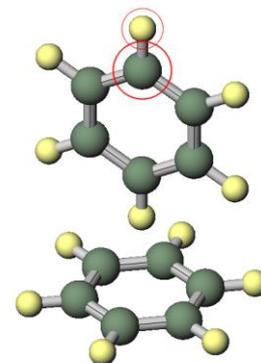
4. Rotate group to...を
Align 2 marked atoms to
target directionにチェック。
Target Direction/Planeを
Z axisに選択し、OKをクリック



5. 分子の距離等は三面図、
グループを移動を使って
微調節する

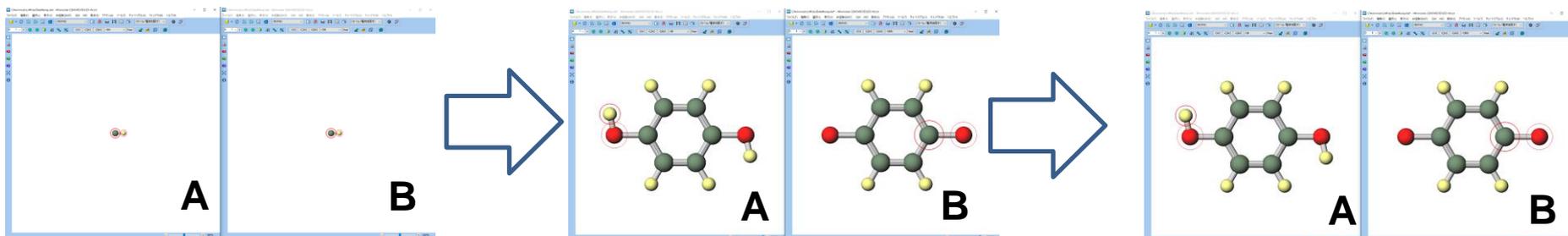


6. 必要に応じて保存



V. 電荷移動錯体のモデリング

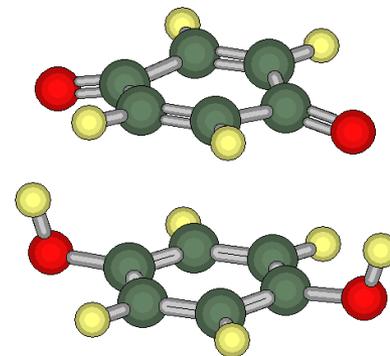
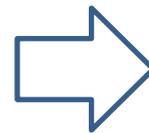
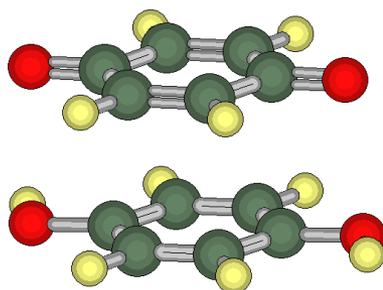
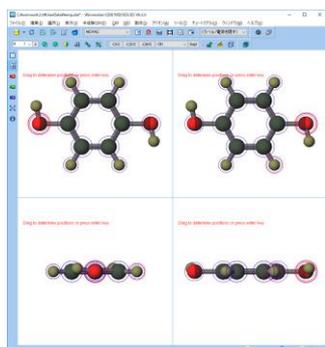
1. Winmostar™を2つ起動する。ここではそれぞれを Window A, Bと呼ぶ。
2. WindowAとWindowBでそれぞれ分子をモデリングする。
3. WindowBにて分子を **Shift+クリック**し(分子選択)、**Ctrl+C**を押す。(部分コピー)



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

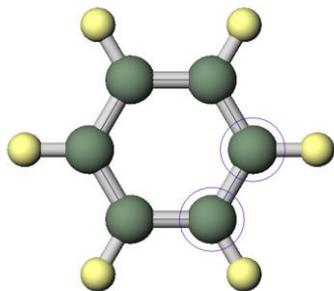


Appendix (グループ選択)

グループ選択(青いサークル)の方法は以下の三種類がある。

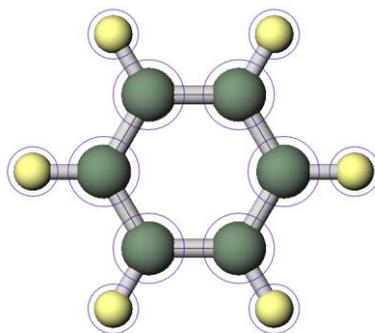
原子単位でのグループ選択

Ctrlキーを押しながら、
原子をクリック



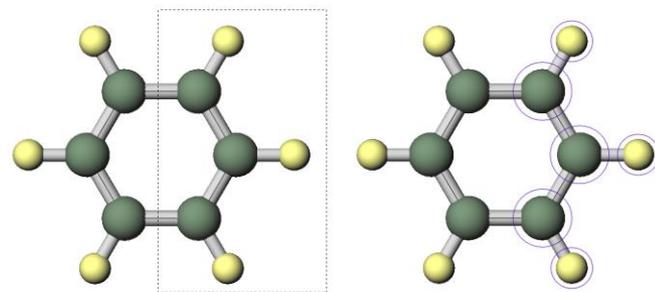
分子単位でのグループ選択

Shiftキーを押しながら、
分子をクリック



矩形を指定してグループ選択

Ctrlキーを押しながら、
画面をドラッグ

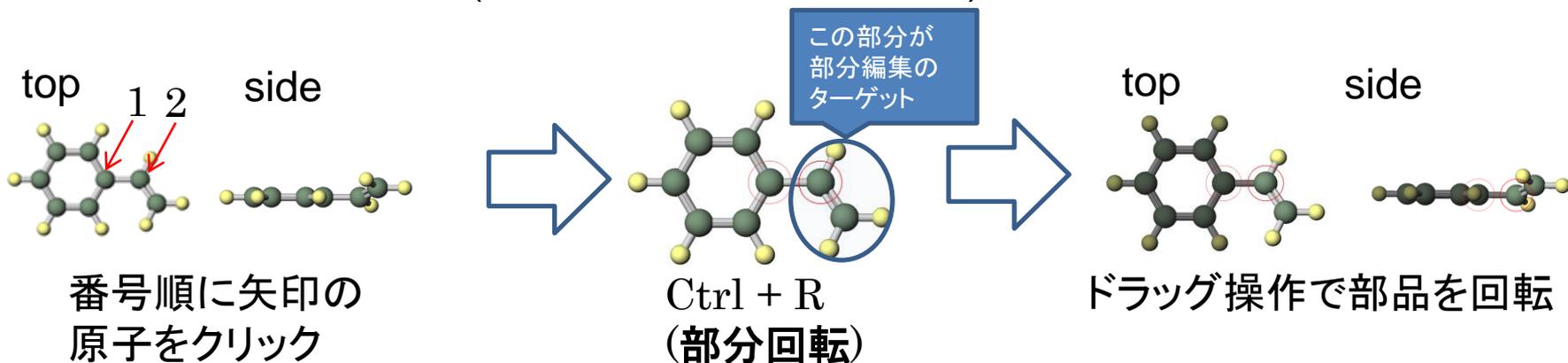


青いサークルで囲まれたグループ選択状態で、
編集 | グループ編集を使えば柔軟な分子モデリングが可能である。

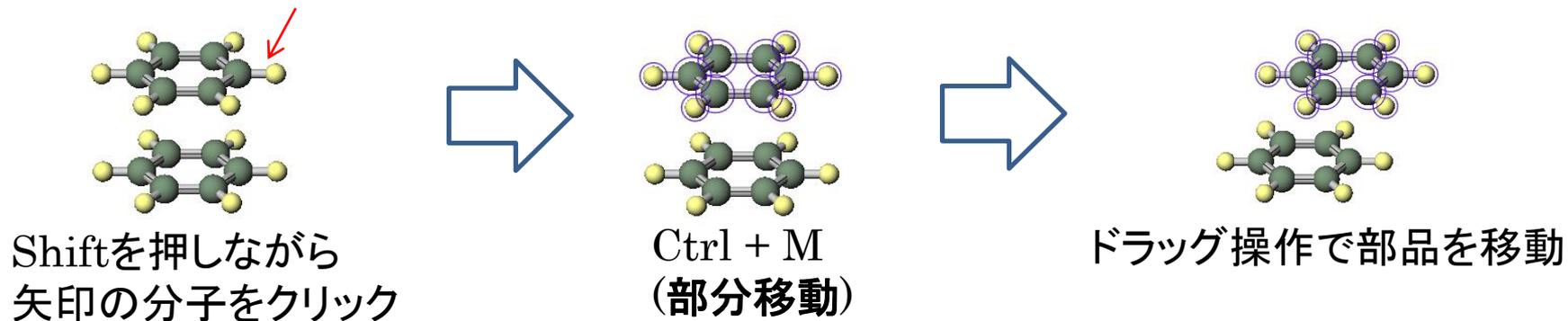
Appendix (グループ編集について)

編集 | グループ編集には以下の二つの使い方がある。

グループ選択なしの場合 (単分子のモデリングに有利)



グループ選択ありの場合 (複数分子のモデリングに有利)



<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! 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 · 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