

# Winmostar™ チュートリアル

## 分子モデリング (金属錯体編)

V9.2.0

株式会社クロスアビリティ  
2019年4月8日

# Contents

## I. 金属錯体の一覧

## II. Ferrocene

部分貼り付け、部分重心

## III. Zn[Saloph]

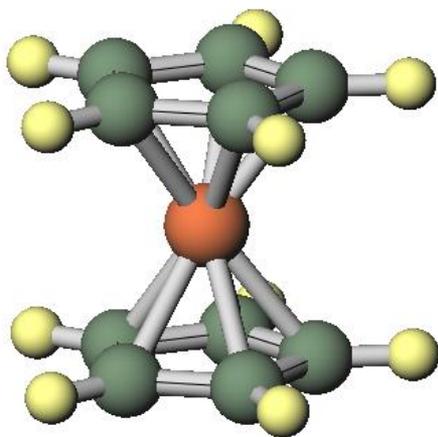
配向、鏡像体生成

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

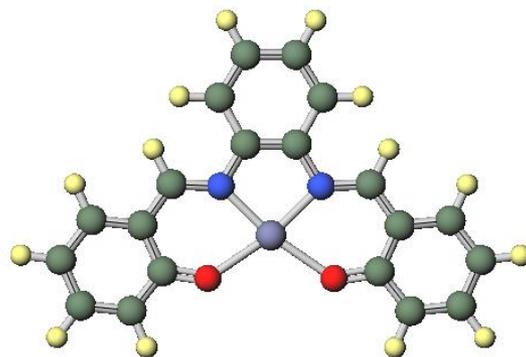
錯体用置換基(-PDH5)の利用、クリーン

# I. 金属錯体の一覧

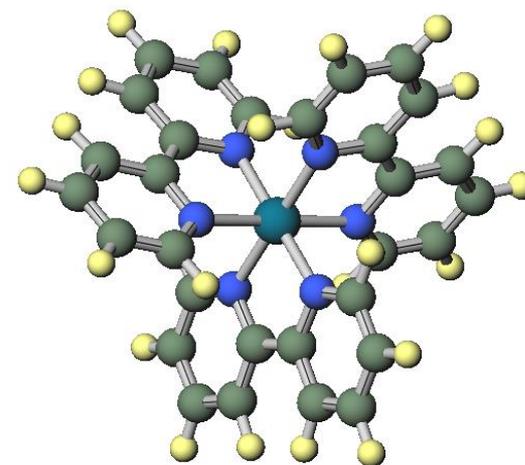
金属原子を含む分子に対しては力場を用いるクリーンは必ずしも成功しない。  
本チュートリアルでは、金属錯体を効率的にモデリングする手順を示す。



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



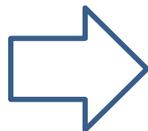
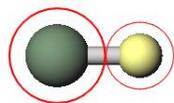
Zn(saloph) ( $\text{ZnC}_{20}\text{N}_2\text{H}_{10}\text{O}_2$ )



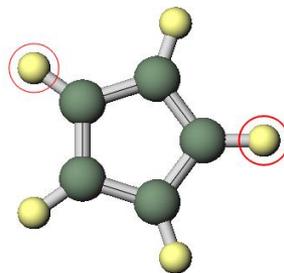
$[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$  ( $\text{RuC}_{30}\text{N}_6\text{H}_{24}$ )

## II. Ferroceneのモデリング

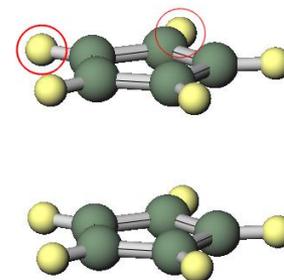
1.  $-C_5H_4$ フラグメントを用いてCP環をモデリングする。



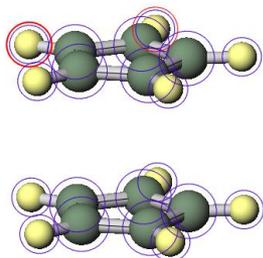
2. 分子モデリングチュートリアル（超分子編）を参考にCP環を平行に並べる。



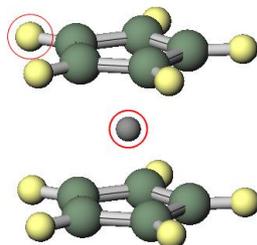
3. 全体をグループ選択する。



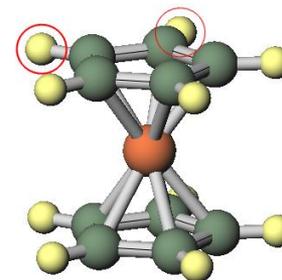
4. 編集 | ダミー原子を追加 | グループの重心に追加をクリックする。



5. ダミー原子をFe原子に置換する。その後、編集 | 原子/結合の自動調整 | 結合を再生成をクリックする。



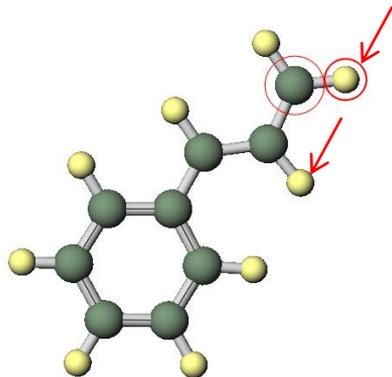
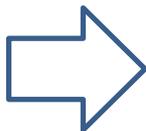
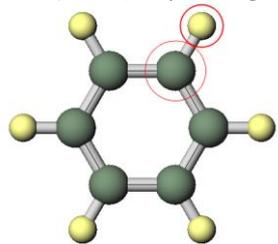
6. 必要に応じて保存。



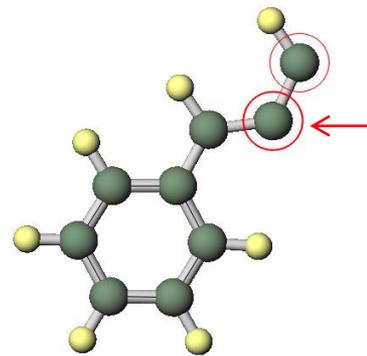
## II. Zn(saloph)のモデリング

1. ベンゼン環からスタート。 2. 矢印の水素を削除する。

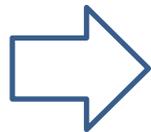
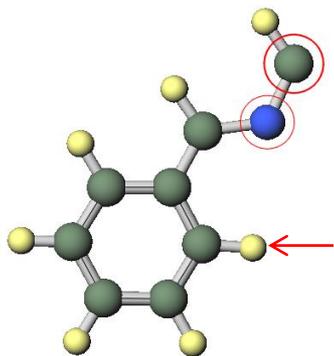
-CH<sub>2</sub>で三回置換し、  
(簡易構造最適化)  
をクリックする。



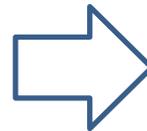
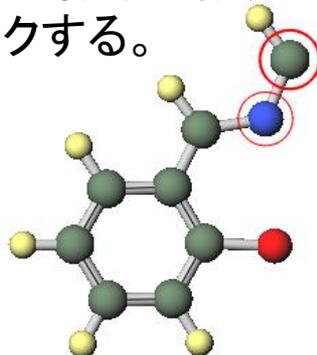
3. 矢印の炭素Cを窒素Nに置換する。



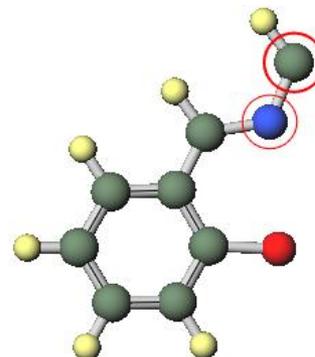
4. 矢印の水素を酸素Oに置換する。



5. 編集 | 座標系の取り直し | カメラ座標系に設定をクリックする。

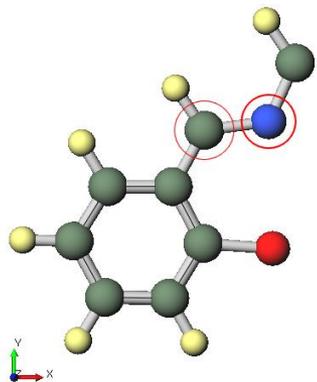


6. 軸の向きが変化する。

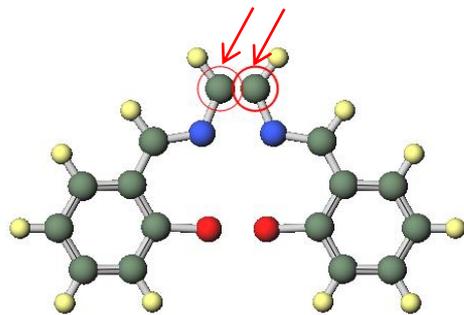


## II. Zn(saloph)のモデリング

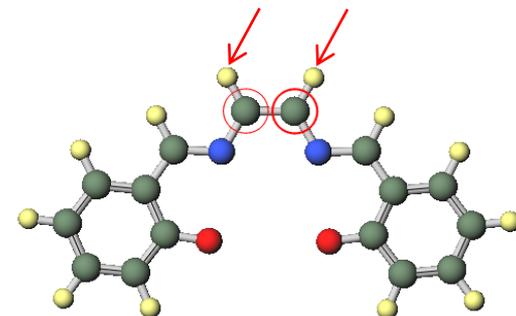
7. 編集 | キラリティ | 鏡像体を生成をクリックする。



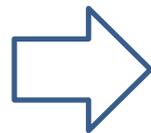
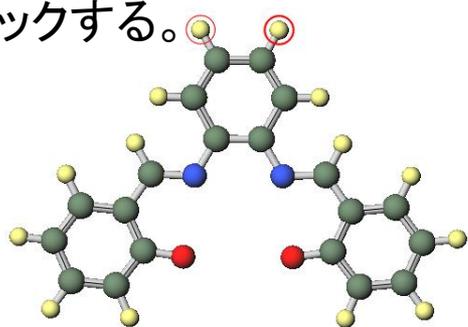
8. 矢印の炭素間に結合を作り、👉 (簡易構造最適化) をクリックする。



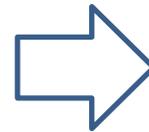
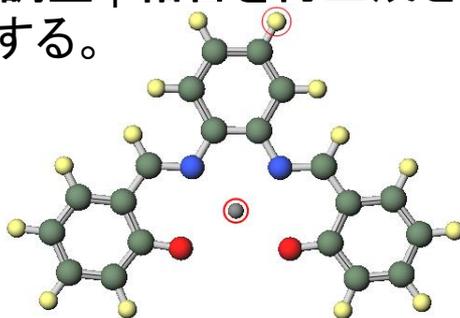
9. 二つの水素を選択し、編集 | 環構築をクリックする。



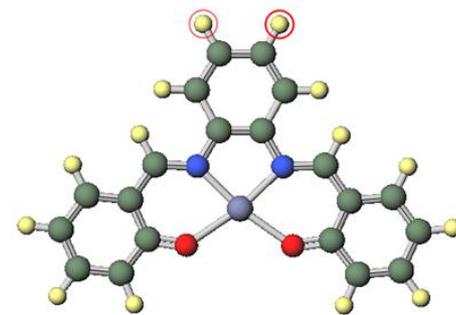
10. 全てのN, Oをグループ選択し、編集 | ダミー原子を追加 | グループの重心に追加をクリックする。



11. ダミー原子をZnで置換する。その後、編集 | 原子/結合の自動調整 | 結合を再生成をクリックする。

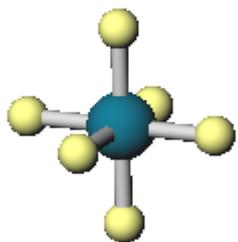


12. 必要に応じて保存

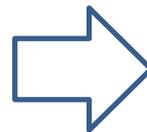
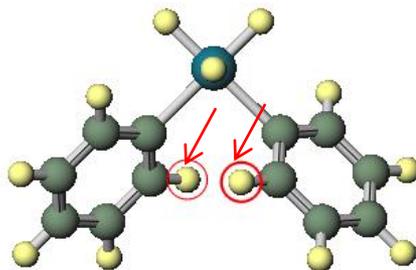


## II. $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ のモデリング

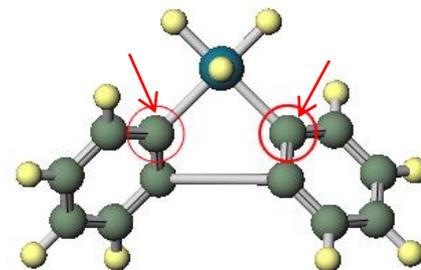
1. -PDH5フラグメントからスタート。PdはRuに置換しておく。二つのHを-C6H5で置換する。



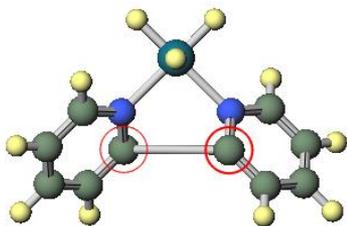
2. 矢印の水素を削除し、隣接する炭素を結合する。



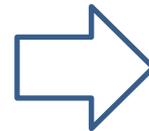
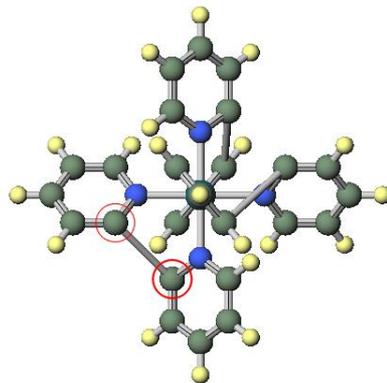
3. 矢印の炭素を窒素に置換する。



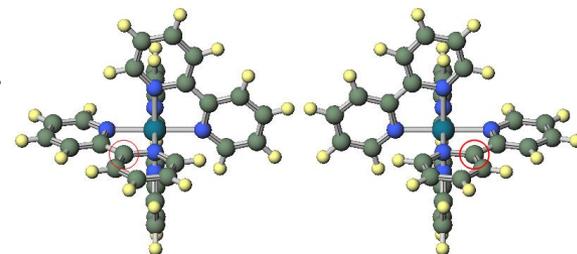
4. ここまでの操作をRuに配位する全ての水素に対して行う。



5. 🍷 (簡易構造最適化) をクリックする。



6. この錯体にはエナンチオマーが存在する。適宜、編集 | キラリティ | 鏡像体を生成を利用するとよい。



<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...](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