



パソコンでできる分子の計算

2008/11/23

分子計算と視覚化研究会
テンキューブ研究所 千田範夫

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2(2) その他(Z) ヘルプ(H)



Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -NH2 [Rep] H Chng

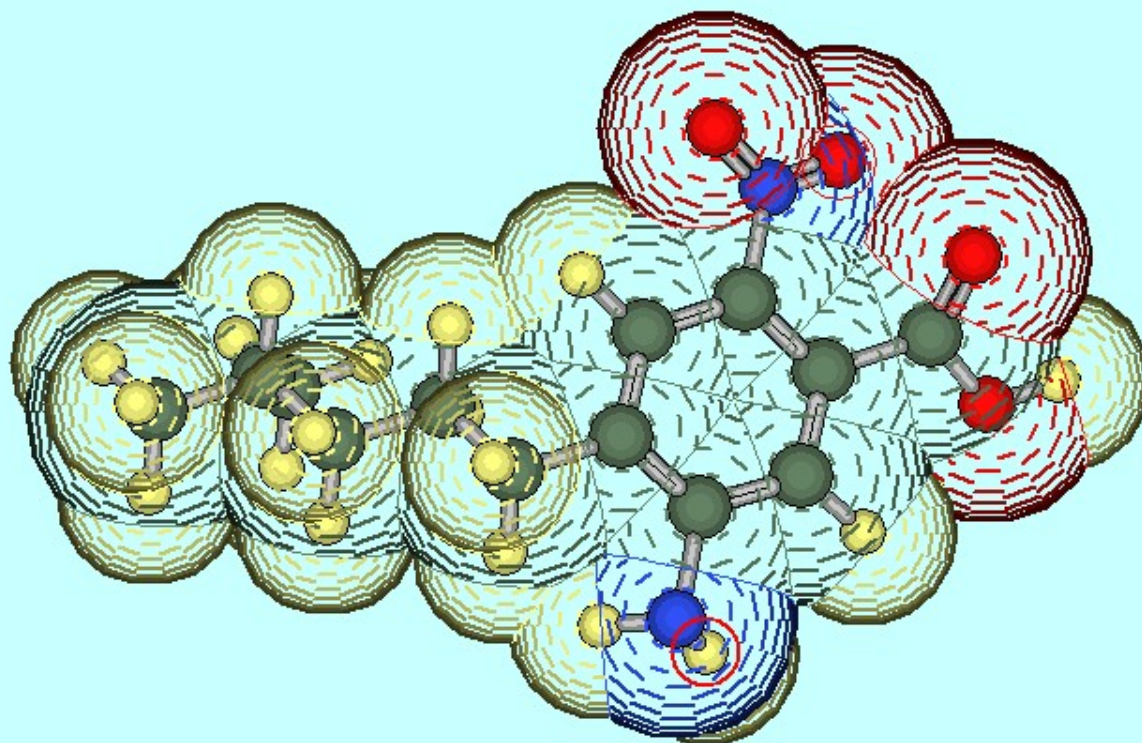
BS1 BS2 1.15 Connect



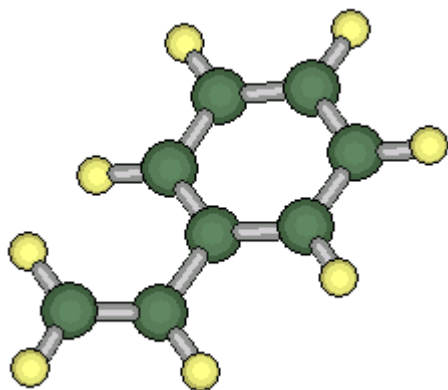
E:\home\ccs\winmos\temp.dat

Winmostar 37 266.3 0

37-35-33-29 Leng=6.6096 Ang=60.5 Dihed=330.1 Lper=0.548 H



Winmostarは計算化学のGUI



分子モデリング

初期座標作成

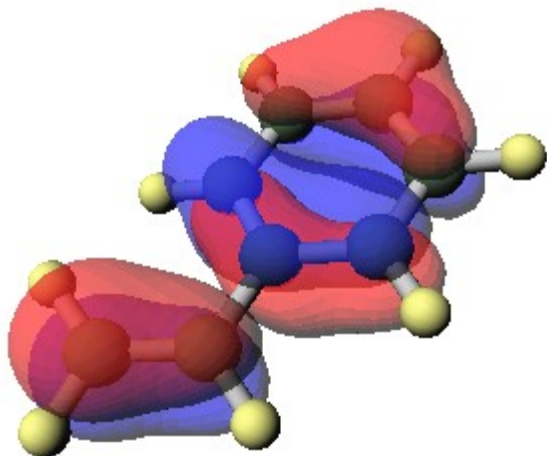
MOPAC内蔵

GAMESS

Gaussian

分子力場法
分子軌道法
分子動力学法

分子計算



解析結果の視覚化

- ・分子構造
- ・電子状態
- ・諸物性

<http://winmostar.com/>

Winmostar Home Page

[English](#) (by [Excite Translations](#))

[\[Top\]](#) [\[Download\]](#) [\[Manual\]](#) [\[Link\]](#) [\[BBS\]](#) [\[About\]](#)

0114589 [view](#) [アクセス解析](#)

アカデミックフリー

since 2002/02/09

E-mail support@winmostar.com

2008/3/13 商用版の [Tencube/WM](#) の販売を開始しました。

[サイエンスアゴラ2008](#)(11/22-24)に出展します。事前参加登録(先着順)受付中！

2008/10/14 [新化学発展協会](#)で講演しました。

2008/10/6 [CBI学会](#)で講演しました。MOPACの [Stewart博士](#)と。

2008/9/26 [日本コンピュータ化学会](#)で発表しました。

2008/9/13 [ESPer2008](#)で講演しました。

2008/8/22 [分離技術会](#)で講演しました。

2008/6/14 [PIO研究会](#)で発表しました。

2008/2/5 [CACフォーラム](#)で講演しました。

[サイエンスアゴラ2007](#)(11/23-25)に出展しました。

多数のご参加ありがとうございました。

[発表資料](#)、[参加記録](#)、[オーガナイザー通信](#)。

分子設計とコンピュータ

もっと青い材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子計算

物性の予測

合成方法の提案

分析データの解析

等

合成ターゲット

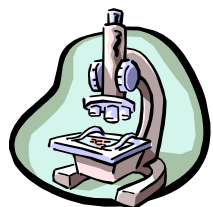
合成

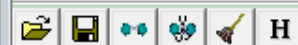
分析

測定

製品化

回る回数を減らす
回るスピードを上げる





Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep

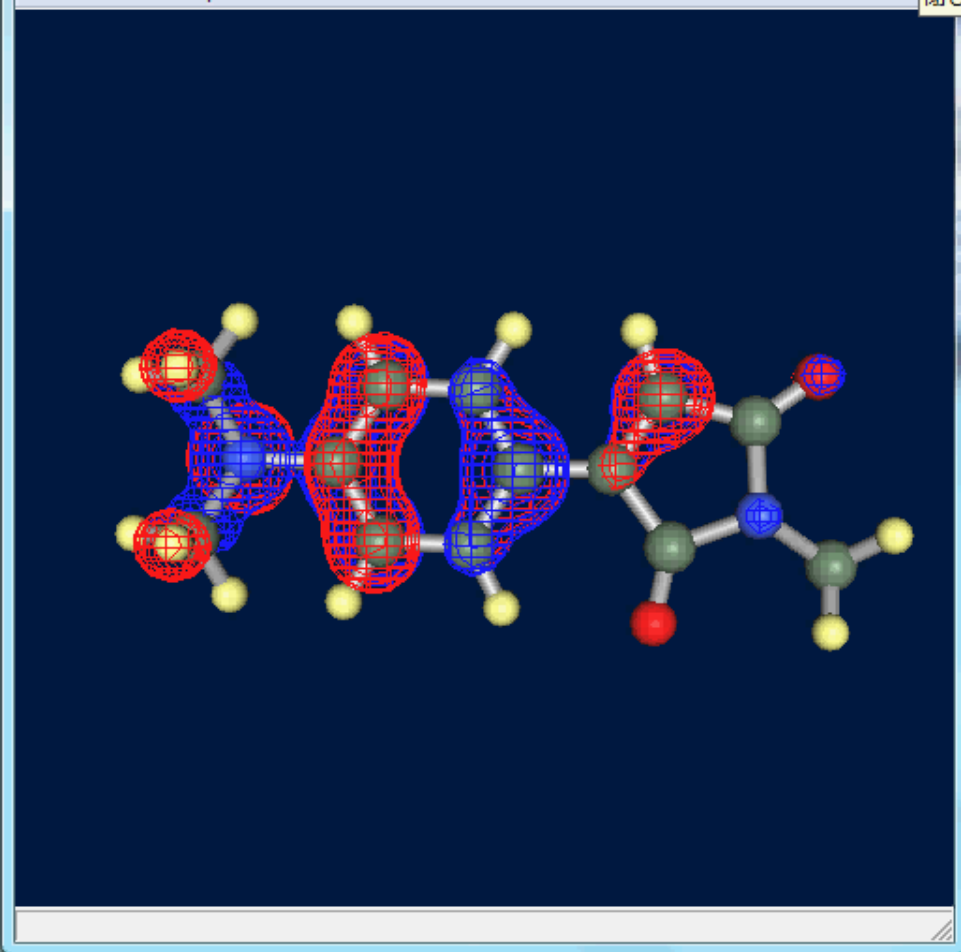
E:\home\ccs\winmos\3h_pm3.mgf
 Winmostar 31 230.27 0
 31-1-1-31 Leng=5.8811 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 H

Quit au.
 eV

HOMO=44

68	0.1496
67	0.1489
66	0.1452
65	0.1442
64	0.1360
63	0.1341
62	0.1330
61	0.1319

File View Help



File(F)

E:\home\ccs\winmos\3h_pm3.mgf
 HOMO :44 LUMO :45
 MO #44

 Mesh Contour Map

透明 0.0

Number of MO 44 Energy Level

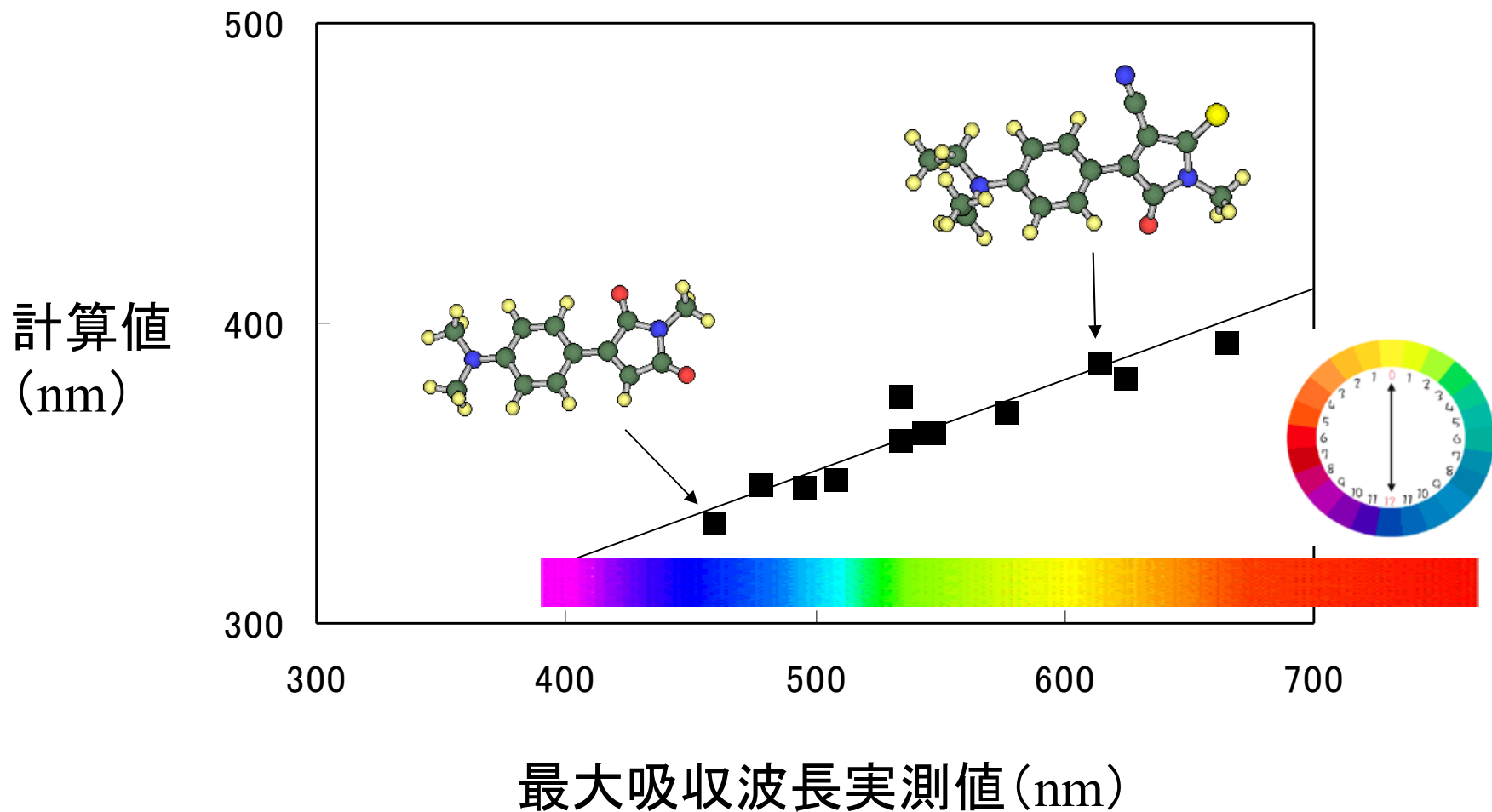
Iso. Level 0.03

Scale 15

F-max,F-min .314764 -.454903

可視吸収スペクトル予測

Winmostar(CNDO/S)//PM3



分子設計とコンピュータ

もっと青い材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子計算

物性の予測

合成方法の提案

分析データの解析

等

合成ターゲット

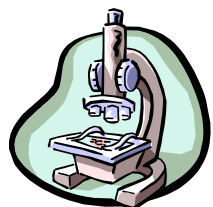
合成

分析

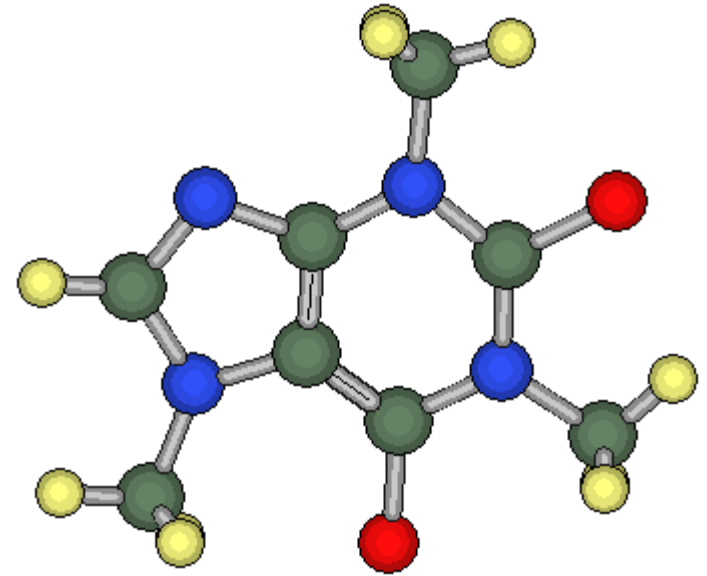
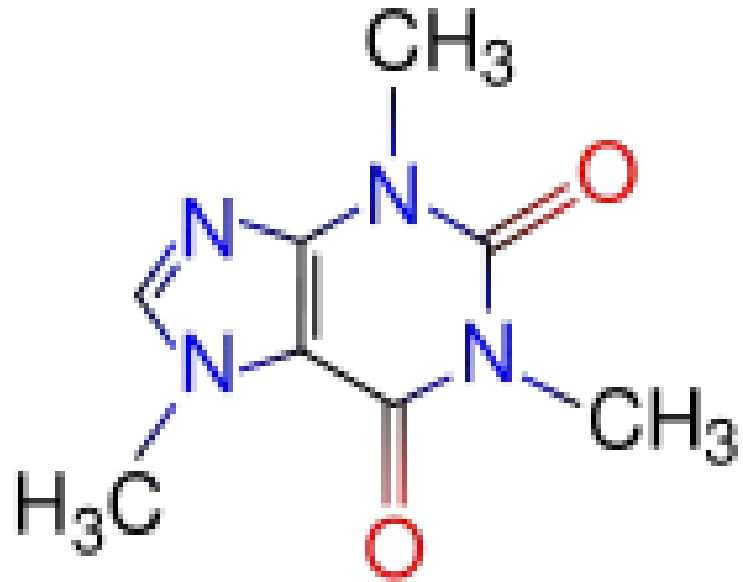
測定

製品化

回る回数を減らす
回るスピードを上げる



カフェイン



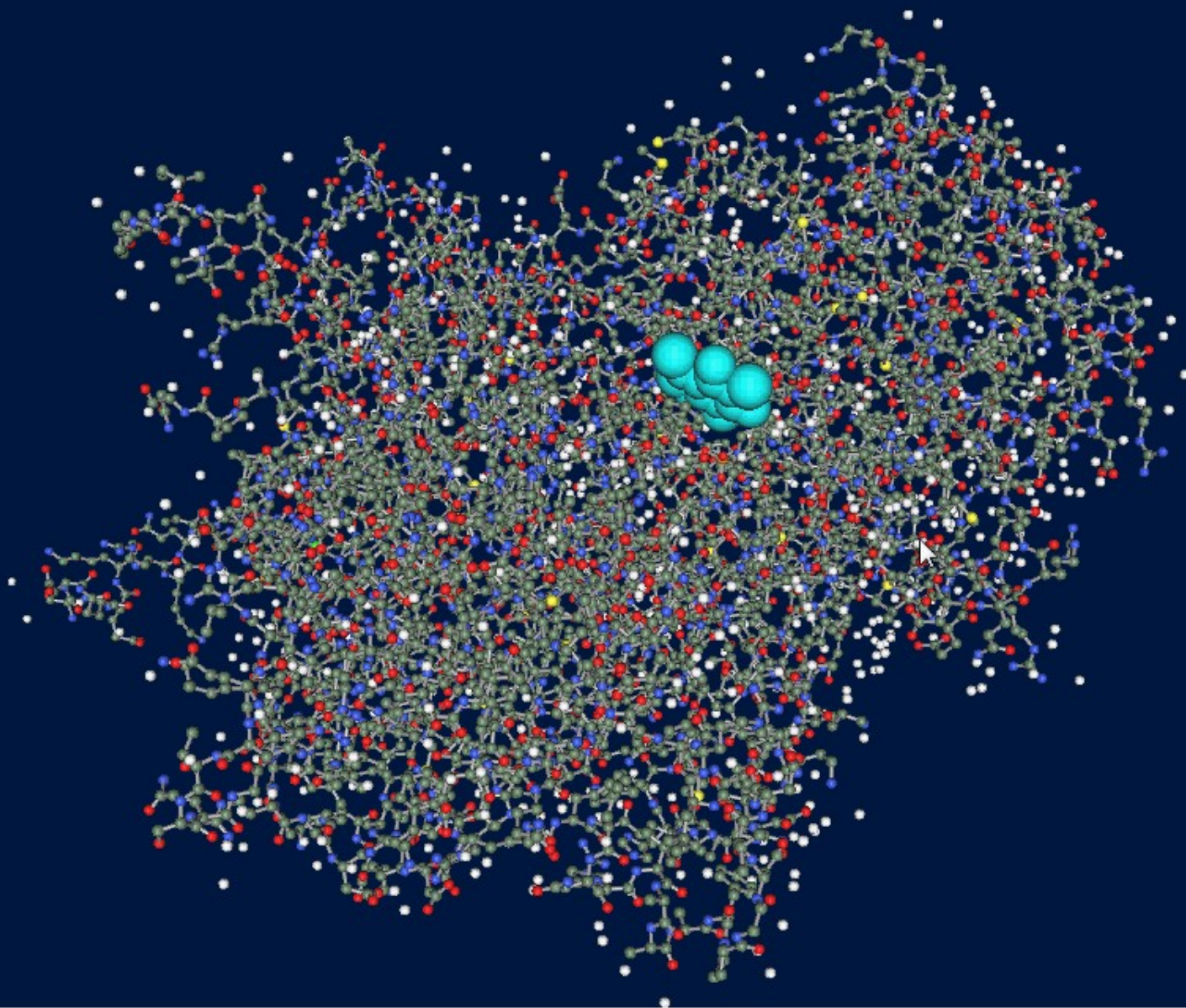
パソコンで見る動く分子事典、P96

アデノシン拮抗作用

＝アデノシン(神経を鎮静させる)の替りに
受容体にとりついて邪魔をする
＝覚醒・興奮興奮作用

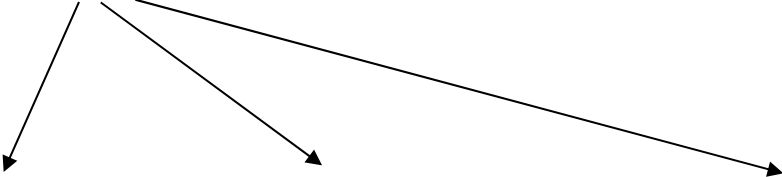
Flash動画

http://winmostar.com/movie/caffeine_model.htm

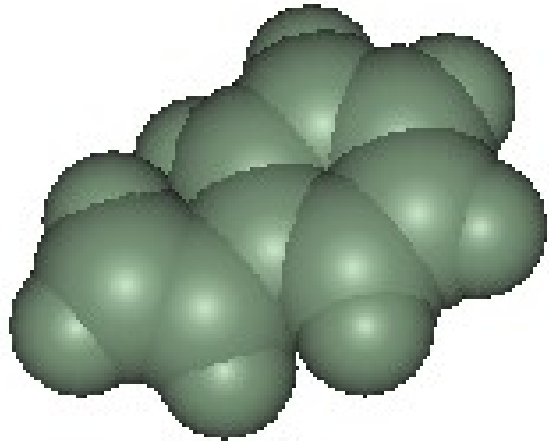


薬剂活性予測

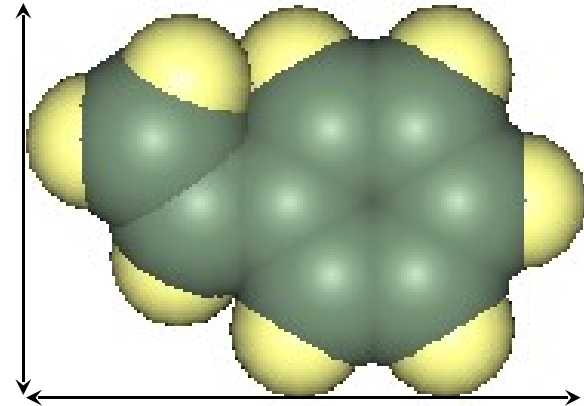
記述子(説明変数)


$$\text{活性予測値} = a(\text{疎水性}) + b(\text{分子体積}) + c(\text{分子表面積}) \\ + d(\text{分子長}) + e(\text{原子電荷}) + , , , + \text{その他}$$

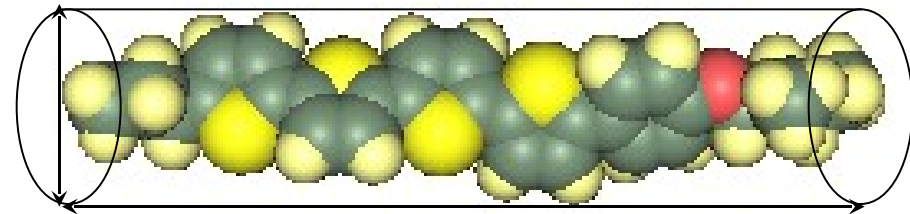
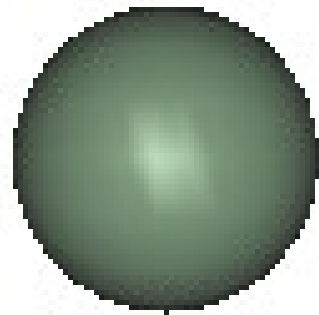
構造物性相関の記述子



1.27



1.43



L/D=4.22

Ovality (卵形度) = 表面積の比

$$Ovality = S / [4 \pi (\frac{3}{4} V \pi)^{2/3}]$$

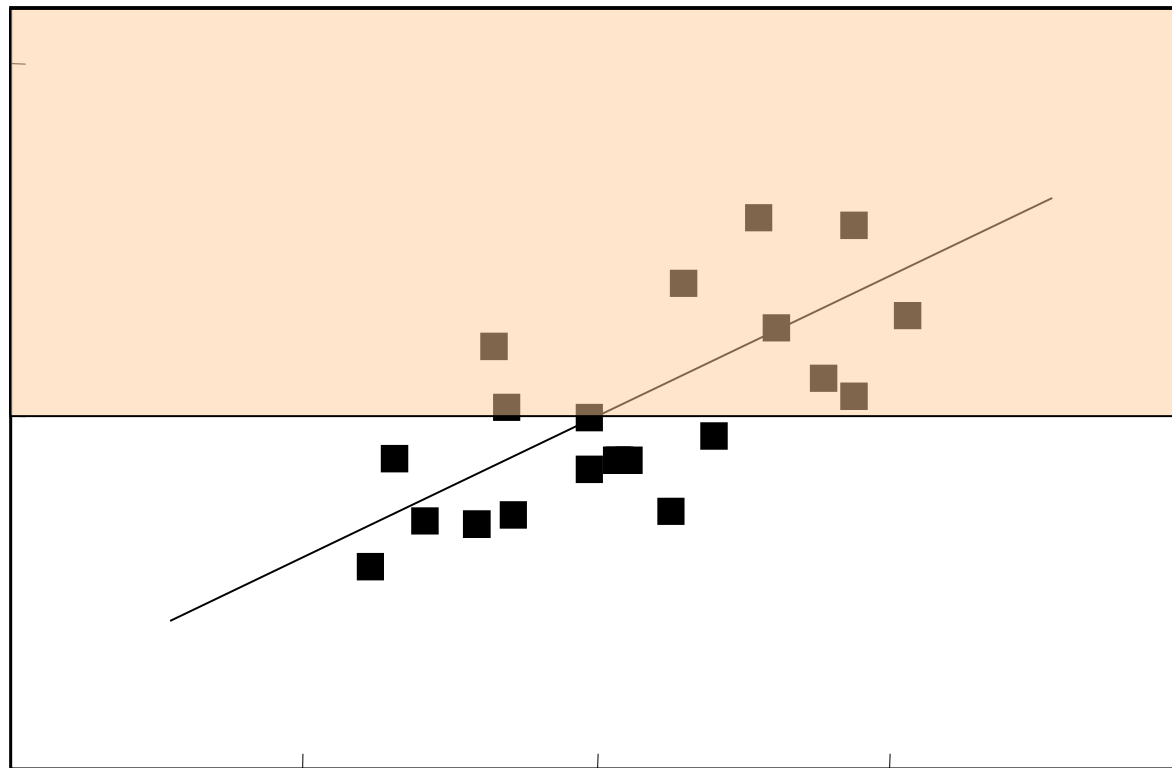
アスペクト比 = 長軸と短軸の比

Aspect Ratio

薬剤活性予測

活性予測値 = a(疎水性) + b(分子体積) + c(分子表面積)
+ d(分子長) + e(原子電荷) + , , , + その他

予測値



活性実測値

分子設計とコンピュータ

もっと青い材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子計算

物性の予測
合成方法の提案
分析データの解析
等

合成ターゲット

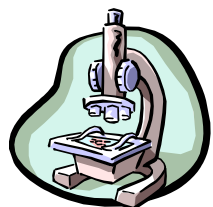
合成

分析

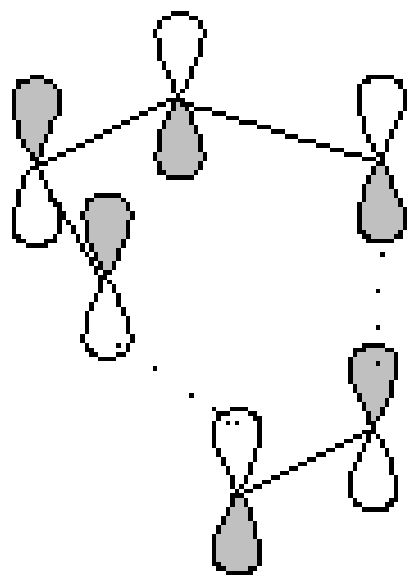
測定

製品化

回る回数を減らす
回るスピードを上げる

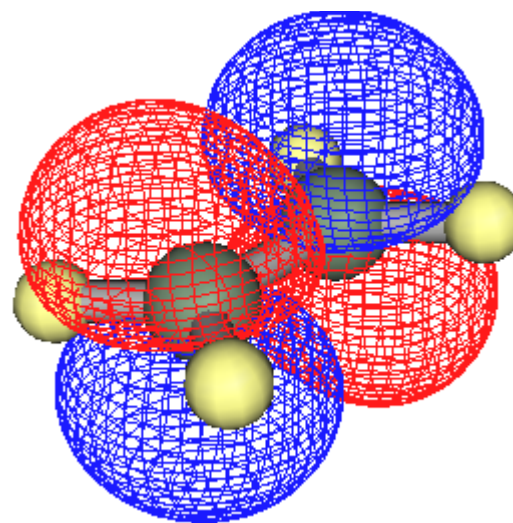
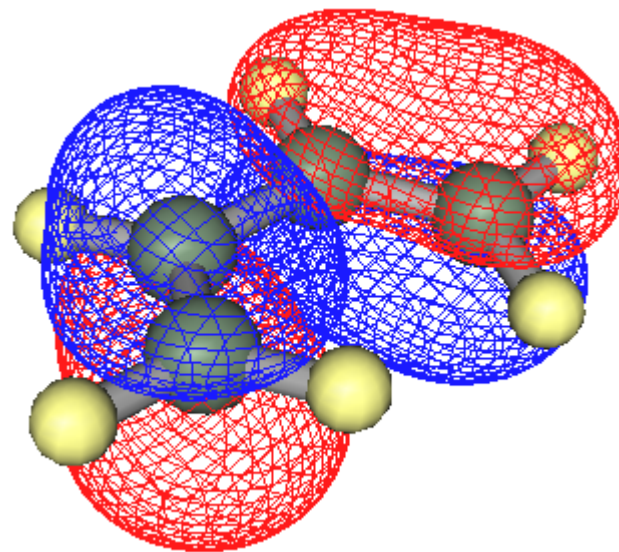


フロンティア軌道理論 (福井謙一, 1981年ノーベル化学賞)

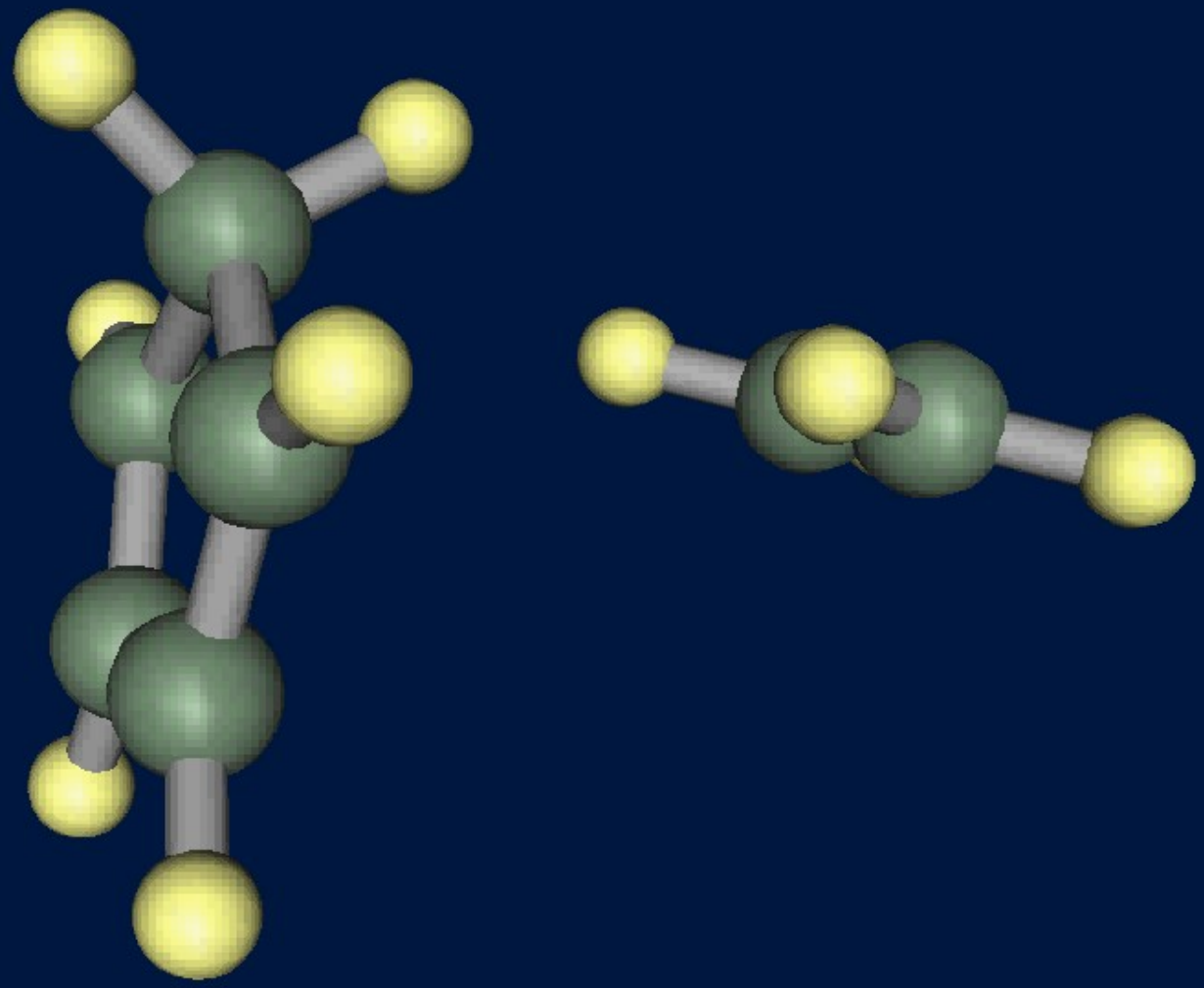


HOMO

LUMO



1 48 48
 once rew. round
▶ * ◀ ▶▶ ◻ ◻
 Jpeg Close



分子設計とコンピュータ

もっと青い材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子計算

物性の予測
合成方法の提案
分析データの解析
等

合成ターゲット

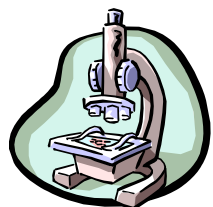
合成

分析

測定

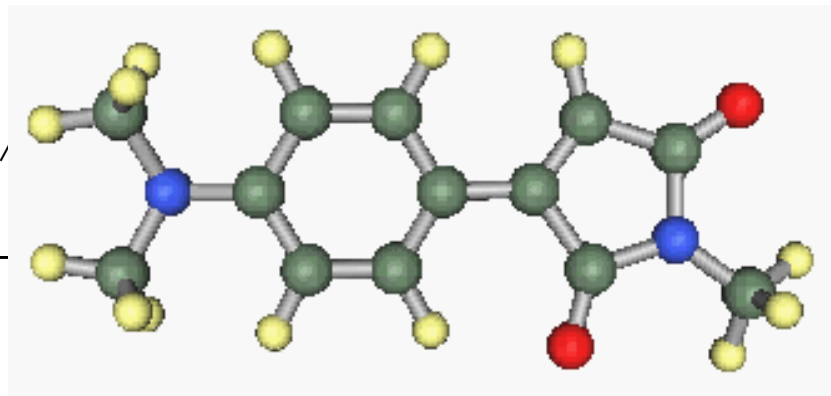
製品化

回る回数を減らす
回るスピードを上げる

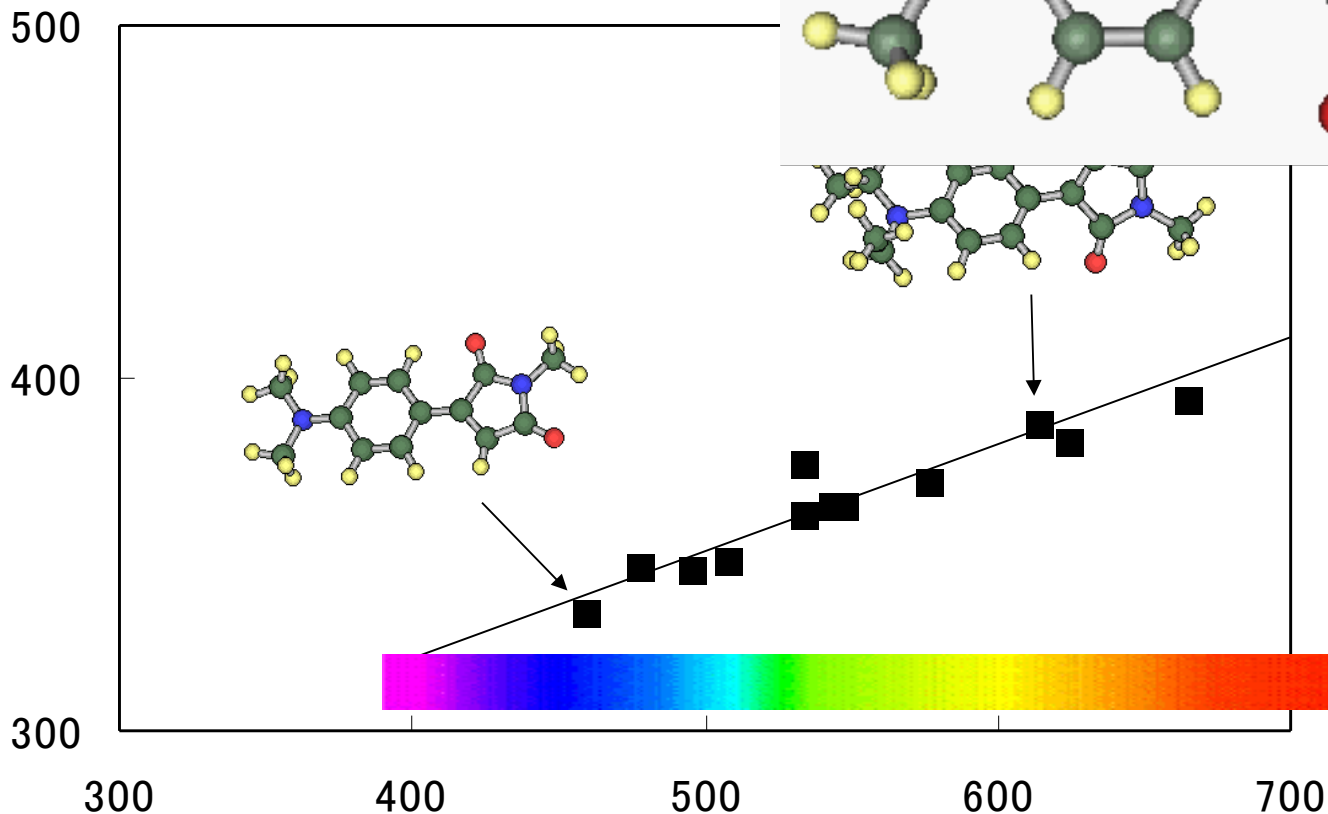


可視赤外線吸収スペクトル予測

Winmostar(CNDO,



計算値
(nm)

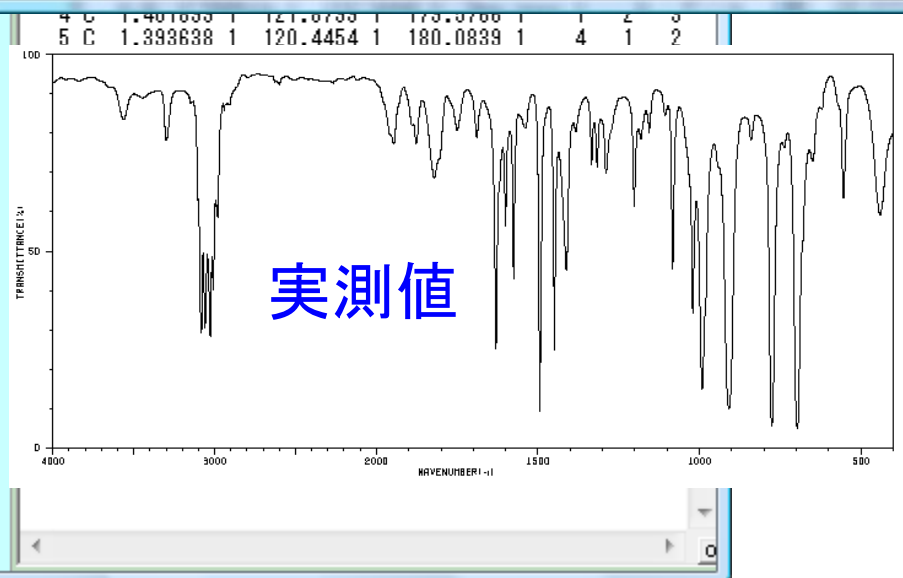
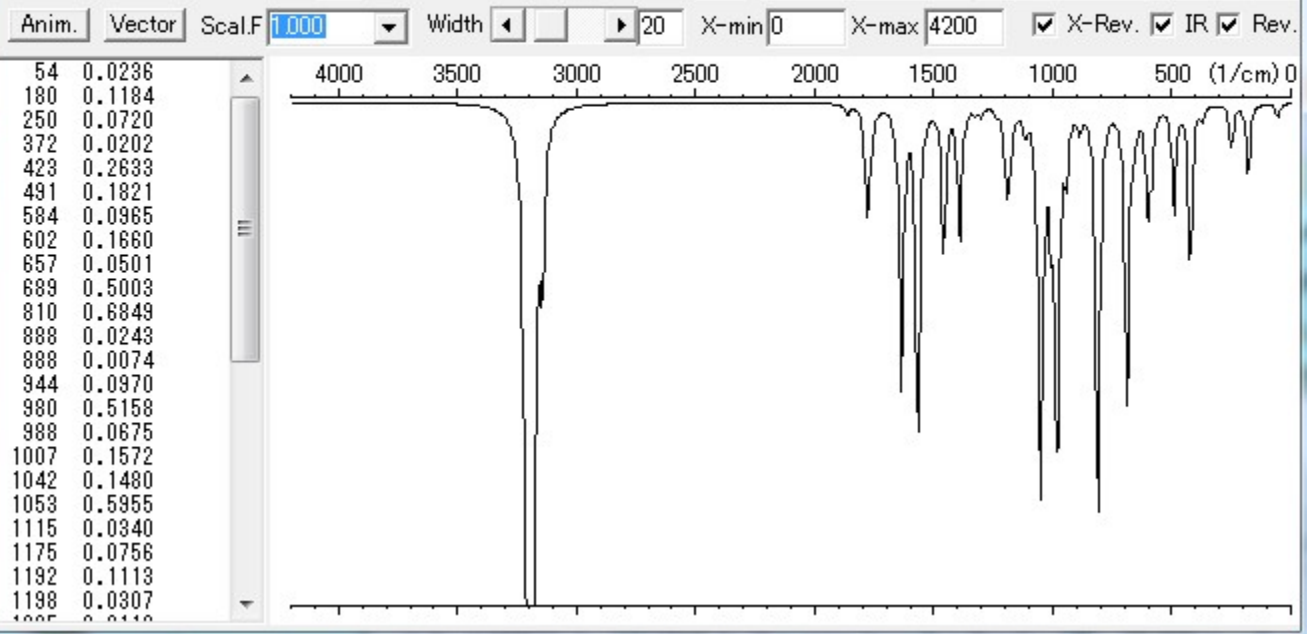
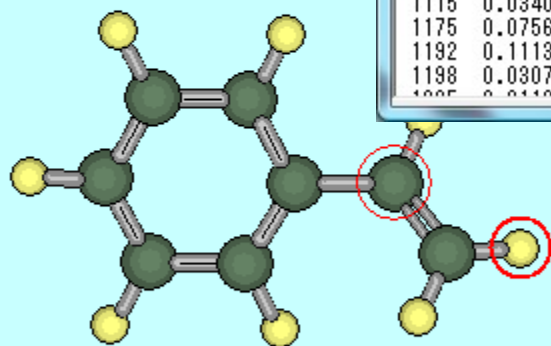


赤外線

最大吸収波長実測値 (nm)

赤外線吸収スペクトル

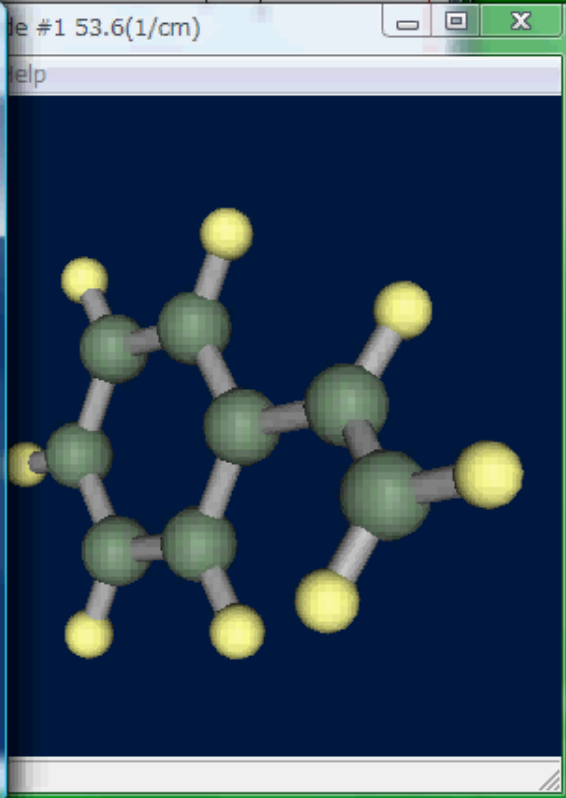
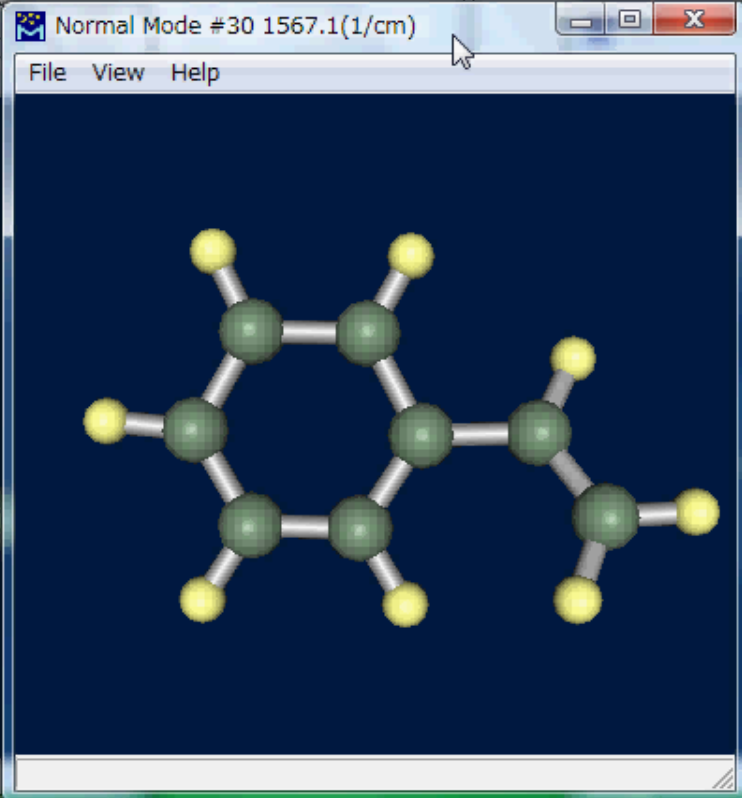
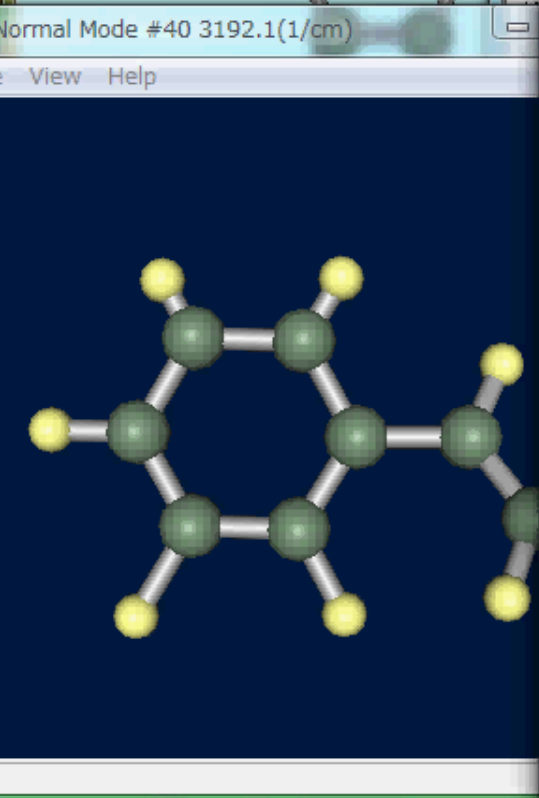
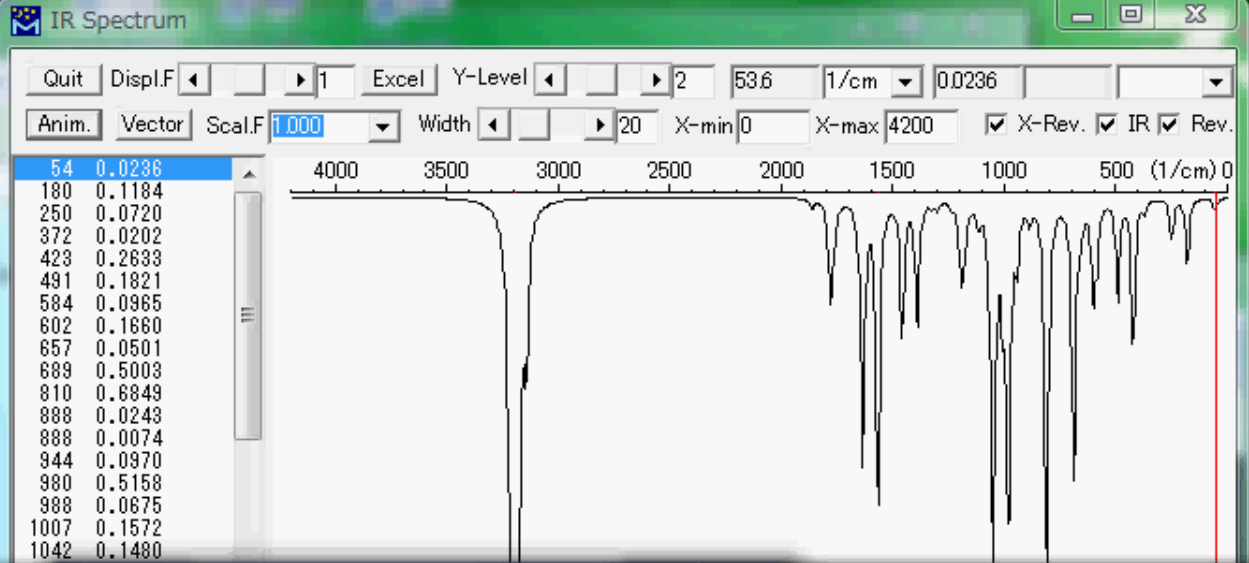
Tencube/WMN3 V3.76e
ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2(2)
Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3
E:\home\ccs\winmos\temp.out
Winmostar 16 13.02 0
16-2-1-1 Leng=2.1274 Ang=151.3 Dihed=0 Lper=



Tencube/WMNB V3.76e

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算

E:\home\ccs\winmos\temp.out
 Winmostar 16 13.02 0
 16-2-1-1 Leng=2.1274 Ang=151.3 Dihed=0



分子設計とコンピュータ

もっと青い材料？

もっと効く薬？

経験と勘で

分子計算

物性の予測
合成方法の提案
分析データの解析
等

合成ターゲット

合成

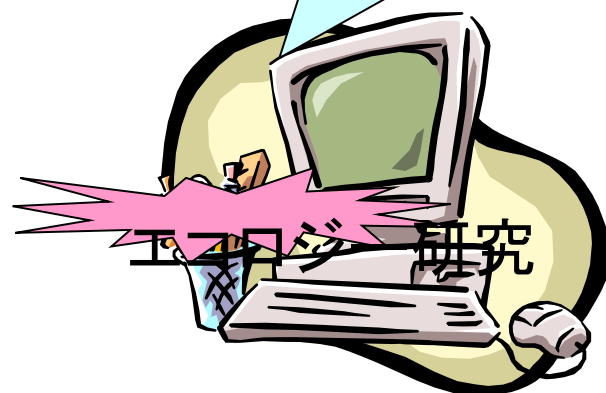
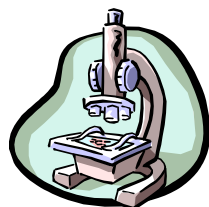
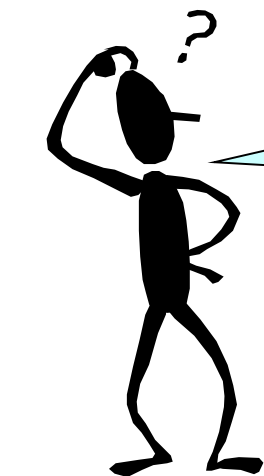
分析

測定

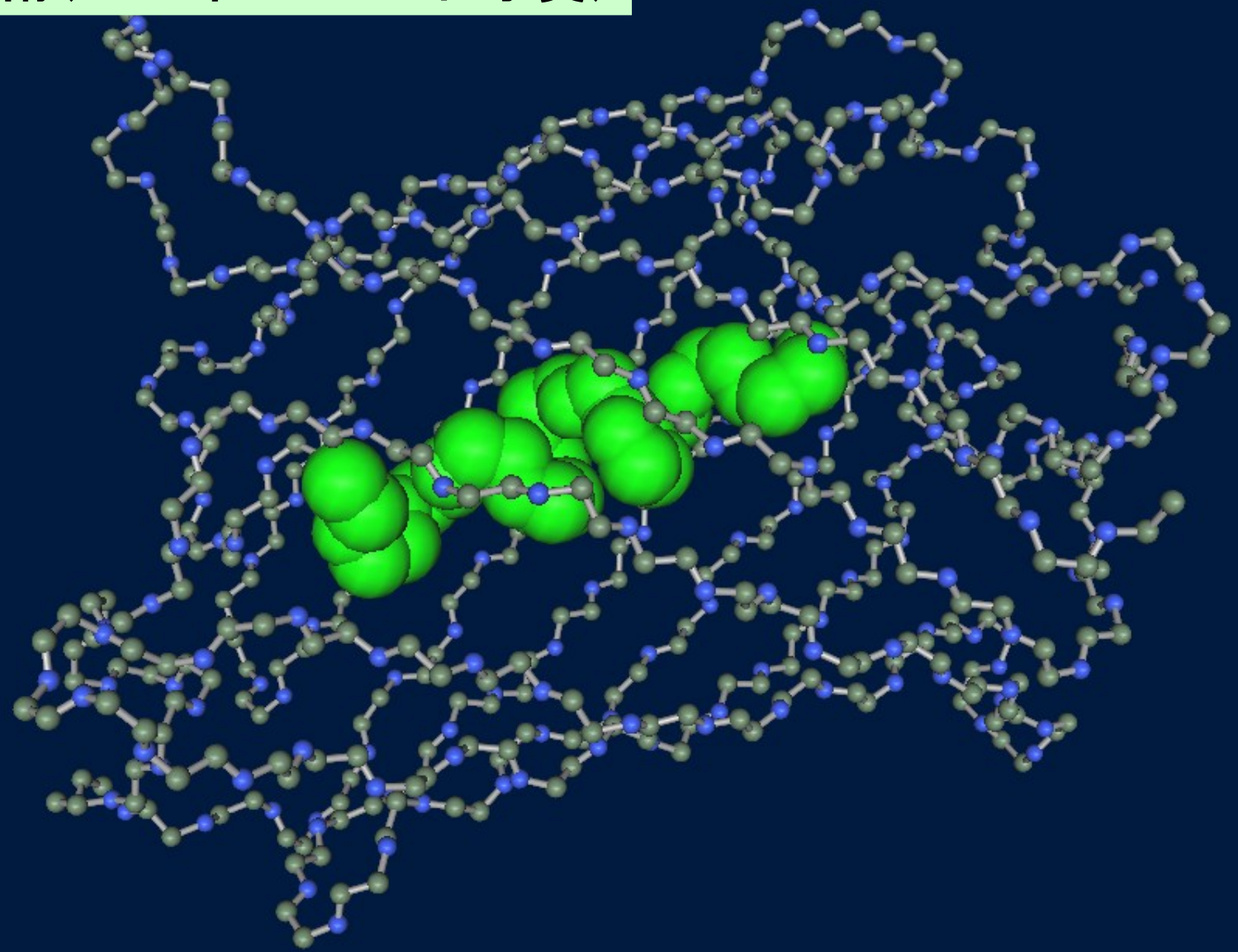
製品化

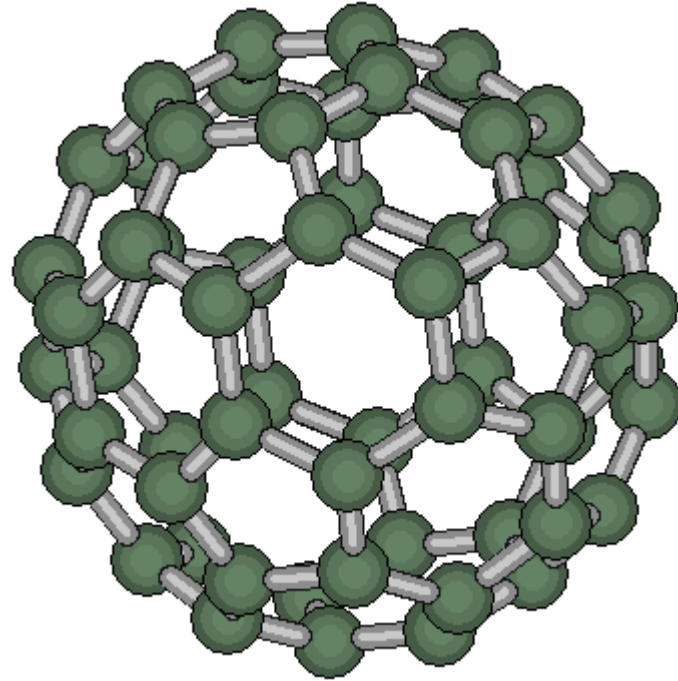
回る回数を減らす
回るスピードを上げる

エレクトロニクス研究



Eil
GFP(緑色蛍光タンパク質)
下村 脩(2008年ノーベル化学賞)



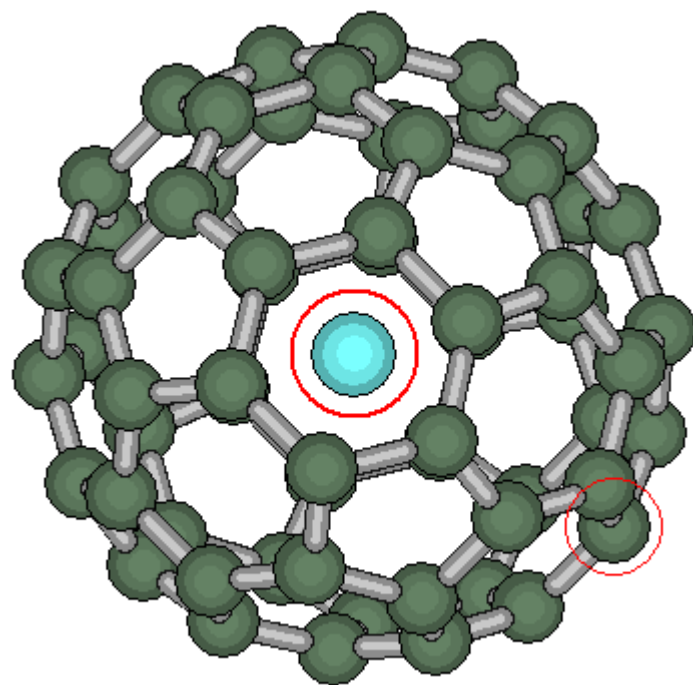


C60 フラーレン

パソコンで見る動く分子事典、P173

Flash動画

http://winmostar.com/movie/c60_model1.htm

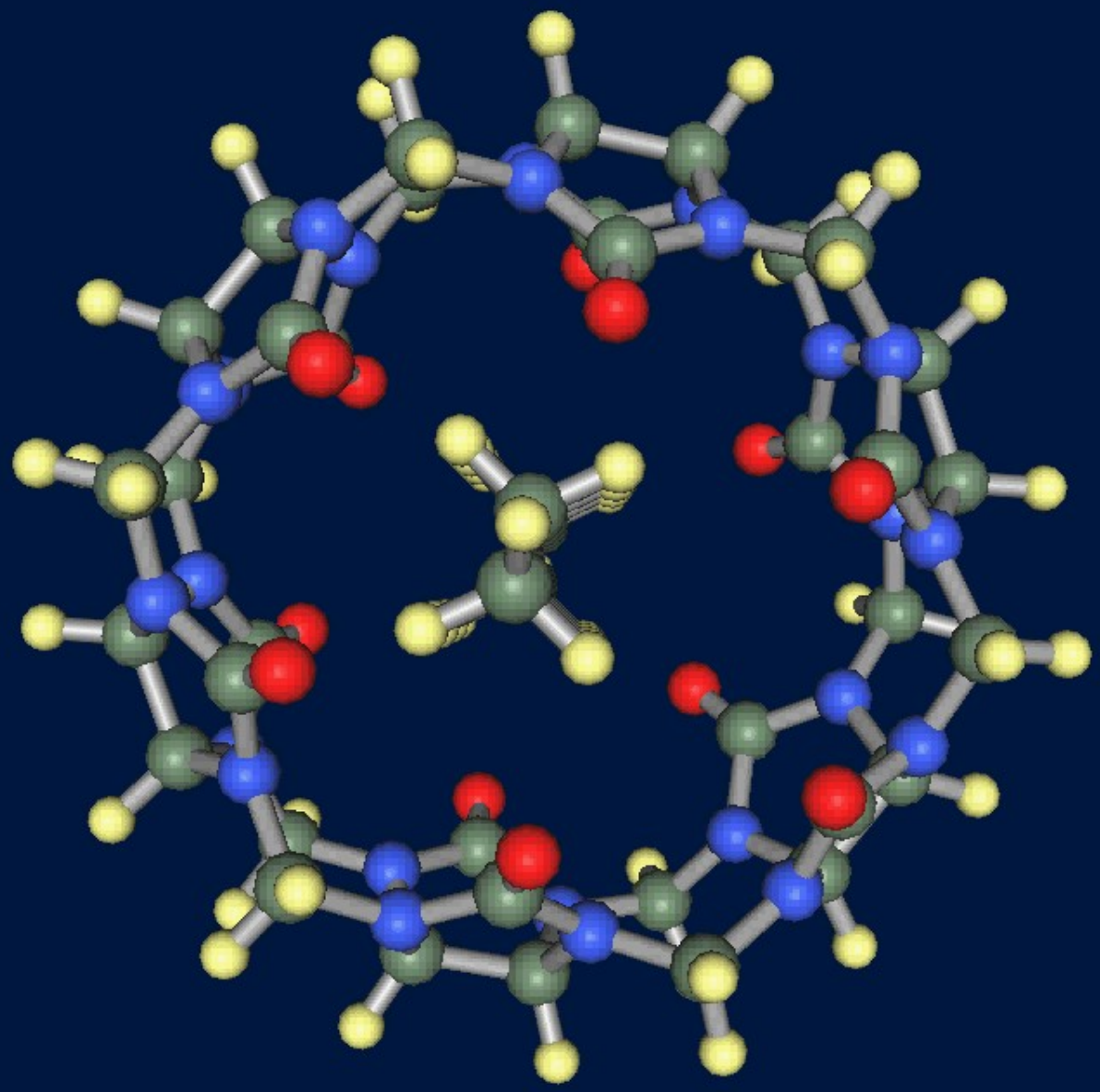


金属内包フラーレン

パソコンで見る動く分子事典、P173

Flash動画

http://winmostar.com/movie/c60_metal.htm



<http://winmostar.com/>

Winmostar Home Page

[English](#) (by [Excite Translations](#))

[\[Top\]](#) [\[Download\]](#) [\[Manual\]](#) [\[Link\]](#) [\[BBS\]](#) [\[About\]](#)

0114589 [view](#) [アクセス解析](#)

since 2002/02/09

[E-mail](#) support@winmostar.com

2008/3/13 商用版の [Tencube/WM](#) の販売を開始しました。

[サイエンスアゴラ2008](#)(11/22-24)に出展します。 **事前参加登録(先着順)受付中!**

2008/10/14 [新化学発展協会](#)で講演しました。

2008/10/6 [CBI学会](#)で講演しました。MOPACの [Stewart博士](#)と。

2008/9/26 [日本コンピュータ化学会](#)で発表しました。

2008/9/13 [ESPer2008](#)で講演しました。

2008/8/22 [分離技術会](#)で講演しました。

2008/6/14 [PIO研究会](#)で発表しました。

2008/2/5 [CACフォーラム](#)で講演しました。

[サイエンスアゴラ2007](#)(11/23-25)に出展しました。

多数のご参加ありがとうございました。

[発表資料](#)、[参加記録](#)、[オーガナイザー通信](#)。

マニュアル

[マニュアル 更新履歴](#)

[ギャラリー](#)

[動画マニュアル](#)

[Winmostarを用いた計算化学実験](#) 著者 貞富博喬、木原 寛

[木原先生のページのWinmostarによる計算化学実験](#)

[PIO使用法、WinmostarによるPIO解析](#)

[Return](#)