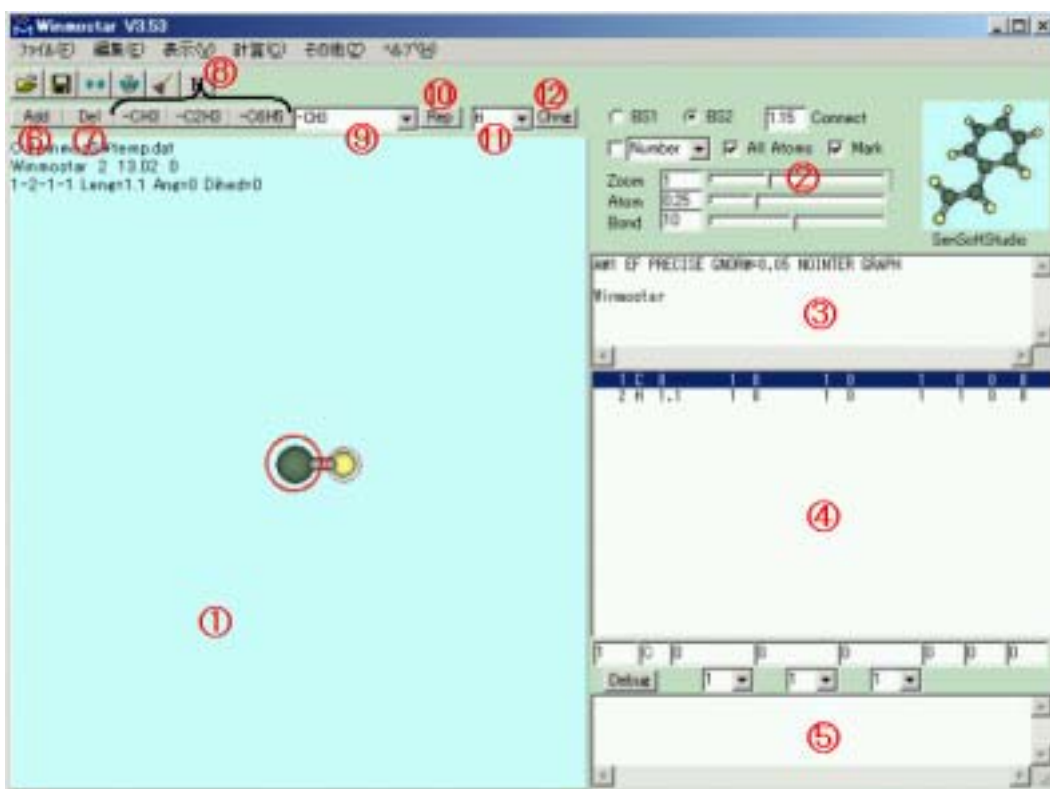


## Winmostar のダウンロード

Winmostar は、<http://winmostar.com>からダウンロードできます。メニューに従ってインストールすると、初期画面が立ち上がります。

## Winmostar の画面

以下のように、初期画面では、C,H の二原子が表示されます。



1. 分子表示ウィンドウ  
～ のボタンを使って作成する分子が表示される領域
2. 拡大・縮小スライダー
3. キーワード用テキストエリア  
分子軌道法計算のためのキーワードとタイトルを入力するエリア。
4. Z-Matrix テキストエリア
5. 第二テキストエリア  
追加の計算パラメータを入力するエリア。
6. Add ボタン  
選択された原子の上に新たな原子を追加する。
7. Del ボタン  
選択している原子（太い丸で囲まれた原子）を消去します。原子を選択するには、該当する原子を単にクリックする。-CH<sub>3</sub>の"C"のように、末端水素と水素以外の原子と一つの結合を持つ原子を選択した場合は働きが異なり、-CH<sub>3</sub>が水素に置換されません。
8. -CH<sub>3</sub>, -C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, -C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> ボタン  
置換を行うときの部品（置換基）を設定します。
9. 部品プルダウンメニュー

置換を行うときの部品（置換基）を選択して設定します。

#### 10. Rep ボタン

で選択した置換基で、選択した原子を置換します。マウスの右クリックで、原子の選択と置換を同時にすることもできます。

#### 11. 元素プルダウンメニュー

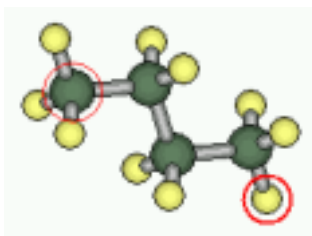
元素変更を行うときの元素を設定します。

#### 12. Chng ボタン

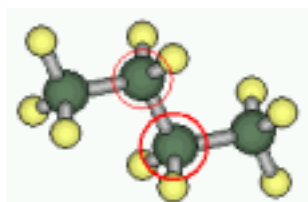
選択している原子の元素を、 で設定した元素に変更します。

### 分子のモデリングとファイルの保存

起動直後、またはファイルメニューから「新規」を選択し、-CH3 ボタンを押してから、Rep ボタンを1回押すとメタンができます。さらに Rep ボタンを3回押すと、エタン、プロパン、n-ブタンができる。左マウスを押しながらドラッグして図のような見やすい角度にする。置換する位置を変えたり、部品プルダウンメニューで部品を変更することで、さまざまな分子を作成できます。



下図のように2原子を指定した状態で、編集メニューから部分回転や部分移動などで、分子を変形できます。



ファイルメニューから「名前を付けて保存」を選択します。適当な場所に、ファイル名「test.dat」等として保存します（注：ファイル名は"test"だけを入力すればよい）。



### Web 解答について

本書の演習を行うには、これだけの説明では分かり難いところがあると思われます。そのような時は、[http://winmostar.com/stereo/stereo\\_index.html](http://winmostar.com/stereo/stereo_index.html)の Web 解答を参考にしてください。Web 解答には、実際に演習問題を解くための操作方法が示されています。