

 winmostar チュートリアル

結晶モデリング 単位結晶編

V11.2.3

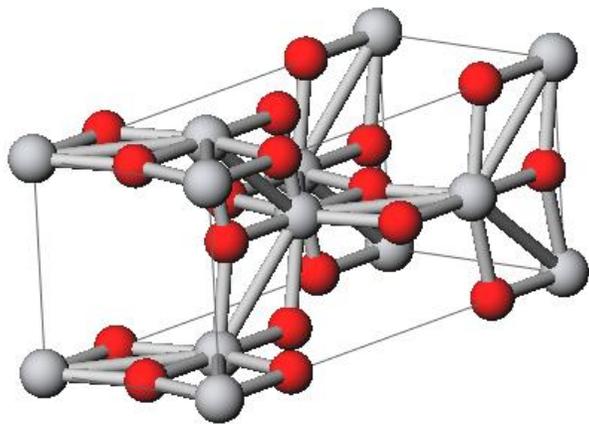
2022年10月7日 株式会社クロスアビリティ

本書について

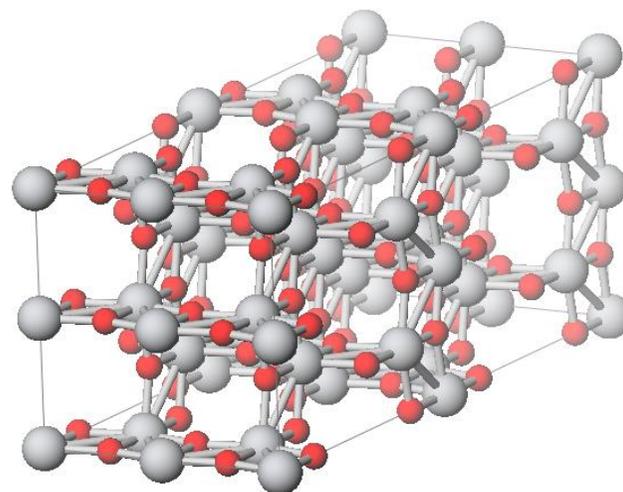
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

概要

- Winmostarでは以下に示す2つの方法で結晶構造を作成することができます。
 - ① 他のソフトで作成したファイル、各種のデータベースから取得したファイルを読み込み
 - pdb, cif, xyzなどのフォーマットに対応
 - 詳細手順は[分子モデリング有機分子編チュートリアル](#)を参照してください。
 - ② 3次元の結晶構造を直接モデリング
- 本チュートリアルでは、「② 3次元の結晶構造を直接モデリング」についてアナターゼ型TiO₂結晶を例に手順を紹介します。スーパーセルの作成方法も示します。



ユニットセル



スーパーセル (2×2×2)

I. 単位格子の作成

1. ファイル | 新規ファイル、新規プロジェクトまたは編集 | 構造をリセットをクリックします。
2. 固体 | 結晶ビルダをクリックします。
3. Crystal SystemをTetragonal、Space Groupを141、Lattice ConstantsのLengthのaを「3.7842」、cを「9.5146」に変更しEnterキーを押します。

The screenshot shows the Crystal Builder software interface. The menu path is: File (Z) > Solid (S) > Crystal Builder (C)... > Create Slab (S)... > Create Supercell (G). The main window displays the unit cell parameters and the resulting structure. The unit cell is a tetragonal lattice with a = b = 3.7842 Å and c = 9.5146 Å. The structure is shown as a 3x3x3 grid of atoms.

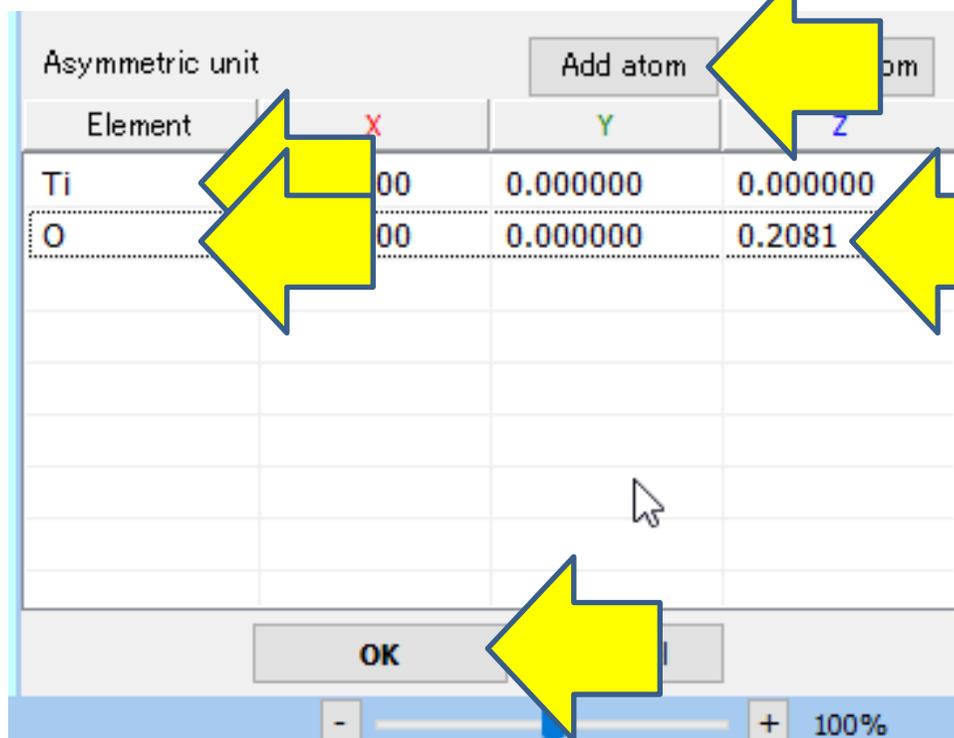
a	b	c	a*	b*	c*	
Lattice constant	3.784	3.784	9.515	90.000	90.000	90.000
TV	3.784	0.000	0.000			
TV	0.000	3.784	0.000			
TV	0.000	0.000	9.515			

Lattice			
Crystal System	[075-142]: Tetragonal		
Space Group	141	I 41/a m d	
Setting	1		
Lattice Constants			
Length [Å]	a: 3.784200	b: 3.784200	c: 9.514600
Angle [deg]	α : 90.000000	β : 90.000000	γ : 90.000000

Asymmetric unit			
Element	X	Y	Z
C	0.000000	0.000000	0.000000

I. 単位格子の作成

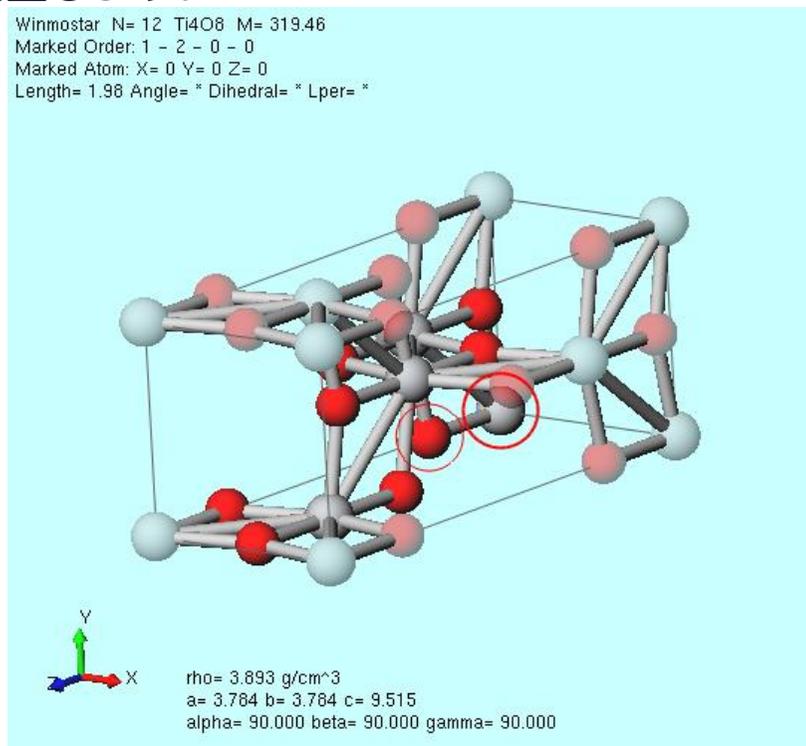
1. **Asymmetric unit**の**Add atom**をクリックします。
2. 1行目の1列目を2回クリックして、**Element**を**C**から**Ti**に変更します。
3. 同様に2行目の**Element**を**C**から**O**に変更します。
4. 2行目の**Z**を「**0.2081**」に変更します。
5. **OK**をクリックします。



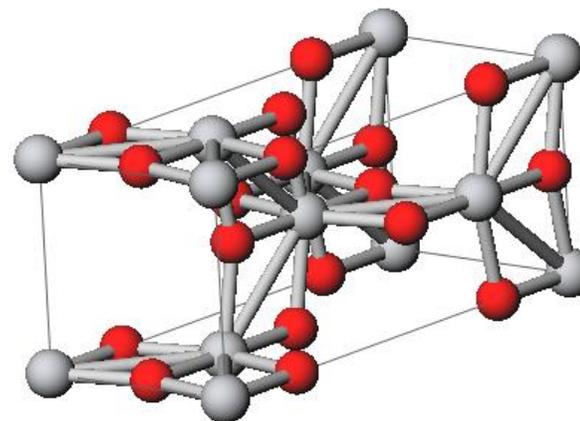
- 一回目のクリックは選択
- 二回目のクリックは編集に対応

補足 結晶の表示方法の調整

非対称要素以外のセル境界上の原子が、デフォルトでは半透明で表示されます。これらの原子も不透明で表示する場合は  (表示プリセット) ボタンをクリックし、「Winmostar Report」を選択します。あるいは、**ツール | 環境設定 | 表示 | 両端に複製されたセル境界上の原子**の設定を調整します。



Winmostar Modelling (デフォルト)



Winmostar Report

II. スーパーセルの構築

1. 固体 | スーパーセルを作成をクリックします。
2. a, b, cをそれぞれ「2」に変更しOKをクリックします。

QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T)

- 結晶ビルダ...
- スーパーセルを作成...
- 表面を切り出し...
- 真空層を挿入...
- クラスタを作成...
- 格子を変換...

13 -C2H3

Generate Supercell

a b c

2 2 2

Regenerate bonds

OK

N= 96 rho= 3.893 g/cm³
a= 7.568 b= 7.568 c= 19.029
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上