

 winmostar チュートリアル

# 結晶モデリング スラブモデル編

V11.3.1

2022年11月1日 株式会社クロスアビリティ

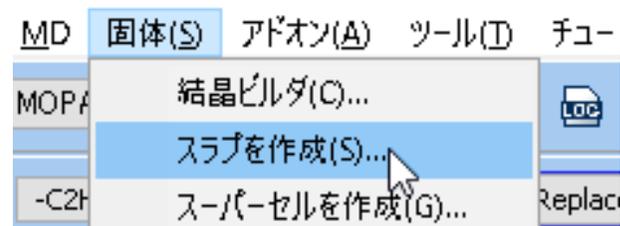
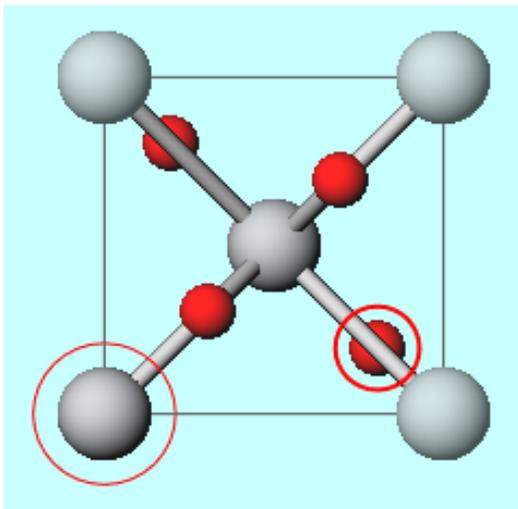
# 本書について

- 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。

# I. 単位格子の読み込み

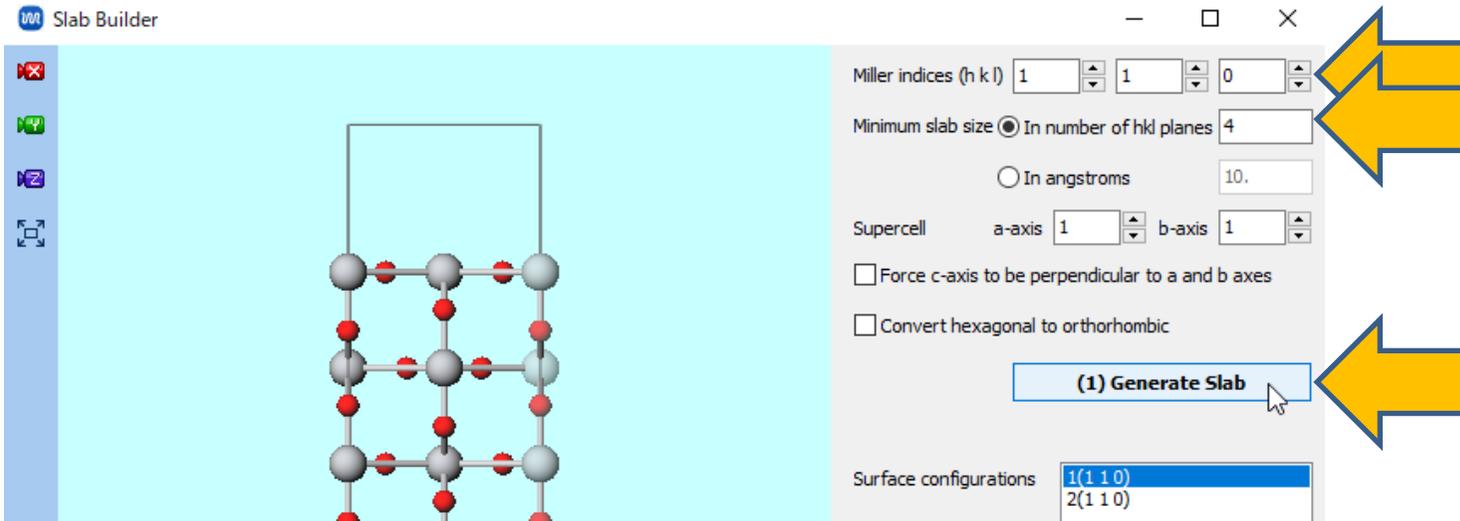
単位格子の作成方法の詳細は[結晶モデリング単位結晶編チュートリアル](#)を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

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. **ファイル | インポート | Samplesファイル | tio2\_rutile.cif**をクリックします。
  - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
3. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
  - 必要に応じてこの段階で構造最適化計算を実施します（本書では省略）。
4. **固体 | スラブを作成**をクリックすると、「Analyzing symmetry using Spglib...」と数秒表示された後、**Slab Builder**ウィンドウが出現します。



## II. スラブの作成

1. **Miller indices**の数字を切り出したい表面のミラー指数「1」「1」「0」に変更します。
2. 厚みを変更するため**Minimum slab size**の**In number of hkl planes**を「4」に変更します。
  - 後でP.7の手順でステップなどを作成したい場合は少し大きめに設定しておきます。
3. (本書では不要) 表面方向にセルを拡張する場合は**Supercell**の値を変更します。
4. (本書では不要) 必要に応じて**Force c-axis to be perpendicular to a and b axes**や**Convert hexagonal to orthorhombic**をクリックします。
5. **Generate Slab**をクリックし数秒処理が流れると左側にスラブ構造が出現します。ミラー指数、厚み、表面方向のサイズ、セル形状を変えたい場合は、1~4に戻り設定を変更した後再度**Generate Slab**をクリックします。

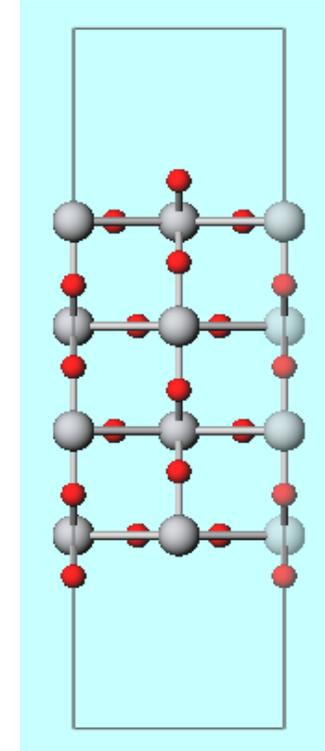
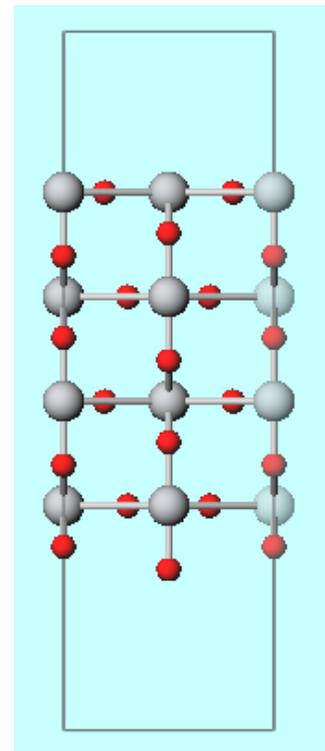
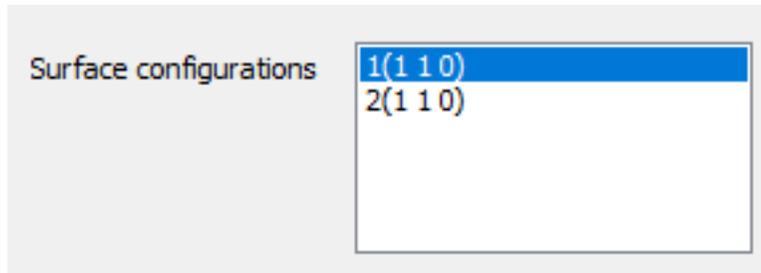


## II. スラブの作成

1. (本書では不要) 表面を切り出す位置を変えたい場合は、**Surface configurations**の選択肢を変更します。結晶によっては選択肢が1つしかない場合もあります。
  - 上下対称のスラブなど全体としての組成を変えたスラブを作成したい場合はP. 7以降の手順を使うので、ここではスラブの片側だけが最終的に作りたい構造に一致していれば問題ありません。

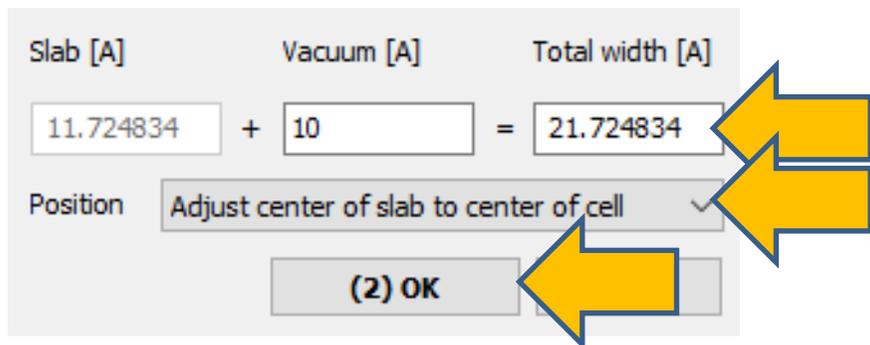
1(1 1 0)の場合

2(1 1 0)の場合

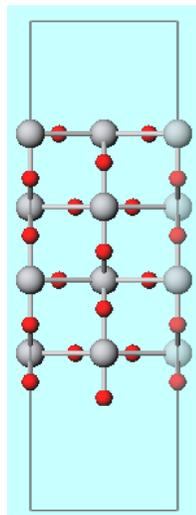


## II. スラブの作成

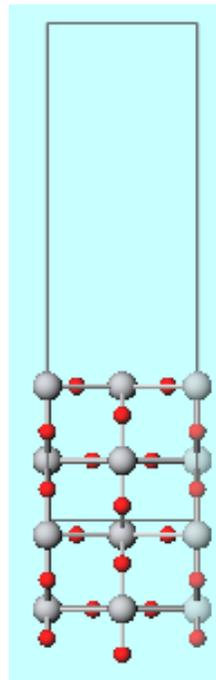
1. (本書では不要) 真空層の厚みを変更したい場合は**Vacuum**または**Total width**の値を変更します。
2. (本書では不要) スラブ位置を変える場合は**Position**を変更します (下図参照)。
3. 最後に**OK**をクリックし「正常にスラブが作成されました」と表示されたら**OK**をクリックします。



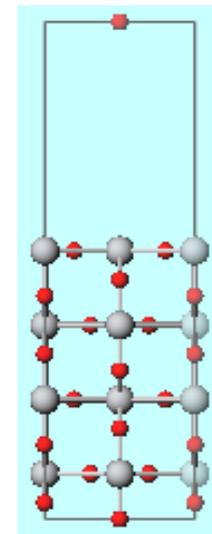
Adjust center  
of slab to  
center of cell



Adjust center  
of slab to  
origin of cell



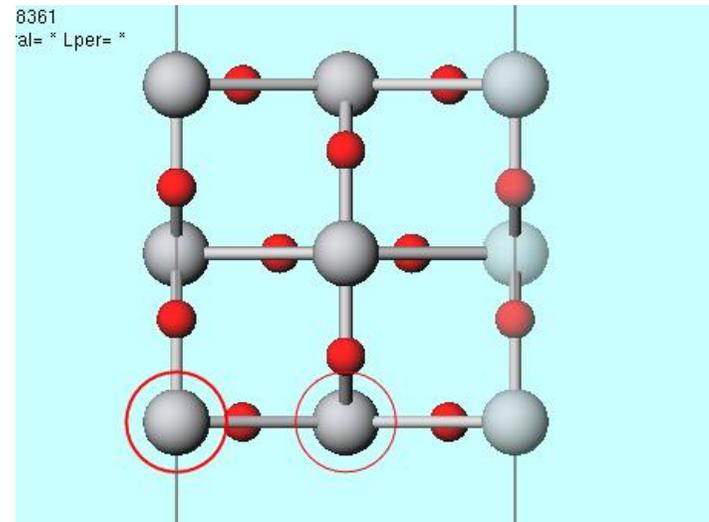
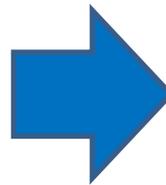
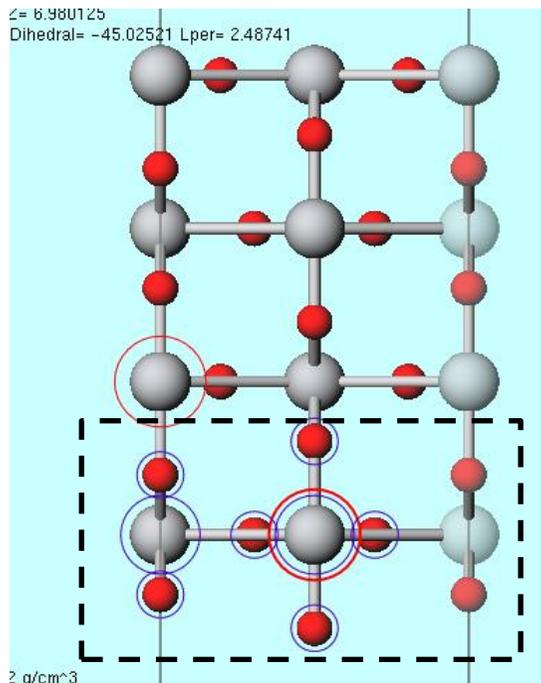
Adjust origin of  
slab to origin  
of cell



# III. 構造の調整

ここでは上下対称のスラブを作成するために構造を調整します。ステップなどを作成したい場合も同様の手順で作成できます。

1.  (X軸方向から表示) をクリックします。
2. 下図の点線の領域をCtrl+ドラッグで矩形選択します。
  - セルの両側に複製して表示されている原子については、片側にしか青丸が表示されません。
3.  (原子を削除) をクリックし、**Delete**をクリックします。



# 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