M winmostar チュートリアル

結晶モデリング 分子吸着モデル編

V11.3.2

2023年2月6日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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. スラブの作成

スラブの作成方法の詳細は<u>結晶モデリングスラブモデル編チュートリアル</u>を参照してください。

- 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 | pt.cifをクリックし破棄して読み込みをクリック 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. 固体 | スラブを作成をクリックします。
- **4. Miller indices**を「1」「1」「1」、**Supercell**のa-axisを「2」、b-axisを「2」に変更し Generate Slabをクリックします。
 - 必要に応じて厚み(Minimum slab size)やx, y方向のサイズ(Supercell)を調整します。本書では例として最低限のサイズで作成します。
- 5. Vaccuumを「15」に変更しOKをクリックします。「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。

↑ 必要に応じてVacuumを調整します。

6. ファイルをエクスポートをクリックし、「pt111.mol2」として保存します。



II. 吸着分子の作成

分子構造の作成方法の詳細は<u>分子モデリング有機分子編チュートリアル</u>を参照してください。

- 1. 編集 | 構造をリセットをクリックします。
- 3. 水素原子(黄)を右クリックし**元素を選んで変更|08**をクリックします。
- 4. Z-方向が吸着する方向となるように適宜分子を回転します。本書では編集 | 座標軸の取り直し | 座標軸を交換(XYZ→ZXY)をクリックします。
- 5. **1** ファイルをエクスポートをクリックし、「co.mol2」として保存します。



III.ontop/fcc/hcp吸着モデルの作成

- 1. **ファイルをインポート**をクリックしP.3で保存したpt111.mol2を開き破棄して読み込みを クリックます。
- 2. 🛛 X方向から表示をクリックします。
- 3. Z軸を上に向けてかつ表面が見えるよう視野を適当に変更し、吸着分子の真下に来る原子 (ontop: 第1層、hcp: 第2層、fcc: 第3層)をクリックします。(下図)
- 4. 編集 | 原子を追加 | ダミー原子を指定距離に追加をクリックします。
- 5. Distanceに「3」と入力しOKをクリックします。

| | 🎯 Add Dummy at Specific Distan — 🔲 🗙 | |
|-------------|--------------------------------------|--|
| | Axis Ox Oy @z Oa Ob Oc | |
| | Distance [A] | |
| z z | | |
| <pre></pre> | 008-2023 X-Ability Co., Ltd. | |

III.ontop/fcc/hcp吸着モデルの作成

- 1. MD | 分子を置換をクリックし「(unknown)」の行をクリックしOKをクリックします。
- 2. 「配置する分子のファイルを選択してください」というダイアログが開いたらP. 4で保存した co.mol2を開きます。「Successfully replaced molecules」と表示されたら**OK**をクリックし ます。
- 3. 吸着分子の位置を調整する場合はP.9に進みます。

| Select species t | o be replaced | |
|------------------|---------------|-------------|
| Species | | # molecules |
| Pt24 | | 1 |
| (unknown) | | 1 |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | ОК | Cancel |



III.bridge吸着モデルの作成

- 1. **ウ ファイルをインポート**をクリックしP.3で保存したpt111.mol2を開き破棄して読み込みを クリックます。
- 2. 🛛 🛛 X方向から表示をクリックします。
- 3. Z軸を上に向けてかつ表面が見えるよう視野を適当に変更し、表面第一層の半透明で表示されていない原子の中から隣接する2つの原子を続けてCtrl+クリックします。(下図)
- 4. 編集 | 原子を追加 | ダミー原子をグループの幾何中心に追加をクリックします。
- 5. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。
- 6. 4で追加されたダミー原子をCtrl+クリックします。



III.bridge吸着モデルの作成

- 1. 🛛 X方向から表示をクリックします。
- 3. MD | 分子を置換をクリックし「(unknown)」の行をクリックしOKをクリックします。
- 4. 「配置する分子のファイルを選択してください」というダイアログが開いたらP. 4で保存した co.mol2を開きます。「Successfully replaced molecules」と表示されたら**OK**をクリックし ます。
- 5. 吸着分子の位置を調整する場合はP.9に進みます。



IV.吸着分子の位置調整

ここでは吸着分子のC原子とPtスラブ表面第1層の間の距離を2 Åに調整する方法を示します。

- 1. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。
- 2. 表面第1層のいずれかのPt原子をクリックします。(Pt原子に太赤丸のマークが移動)
- 3. 吸着分子のC原子をクリックします。(C原子に太赤丸のマークが移動)
- 4. 吸着分子のC原子をShift+クリックし吸着分子をグループ選択します。





IV.吸着分子の位置調整

- 1. **グループ編集|グループを並進移動(数値を指定)**をクリックし、**Definition**を 「Relative coordinate between marked atoms」に変更します。
- 2. Zの値を「2」に変更しOKをクリックします。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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