

 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

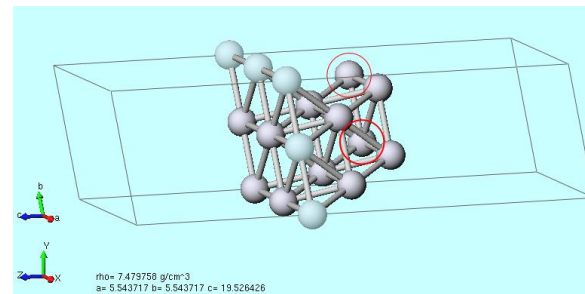
本書について

- 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. スラブの作成



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

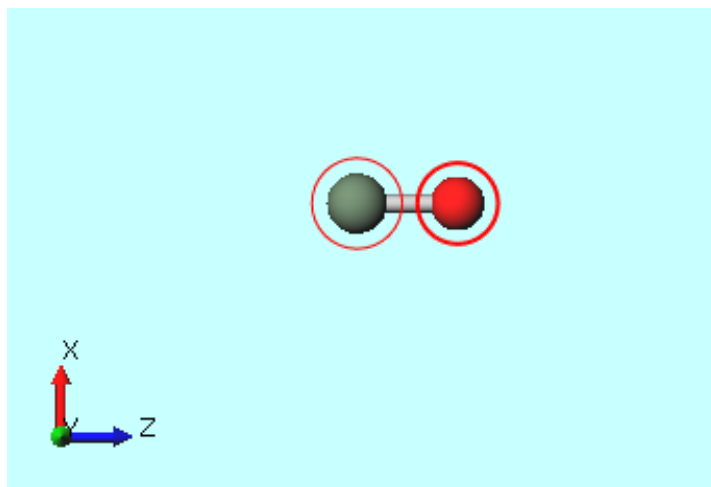
1. **ファイル** | **新規ファイル**、**新規プロジェクト**または**編集** | **構造をリセット**をクリックします。
2. **ファイル** | **インポート** | **Samplesファイル** | **pt.cif**をクリックし**破棄して読み込み**をクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル** | **ファイルをインポート**を使います。
3. **固体** | **スラブを作成**をクリックします。
4. **Miller indices**を「1」「1」「1」、**Supercell**の**a-axis**を「2」、**b-axis**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. **Vacuum**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

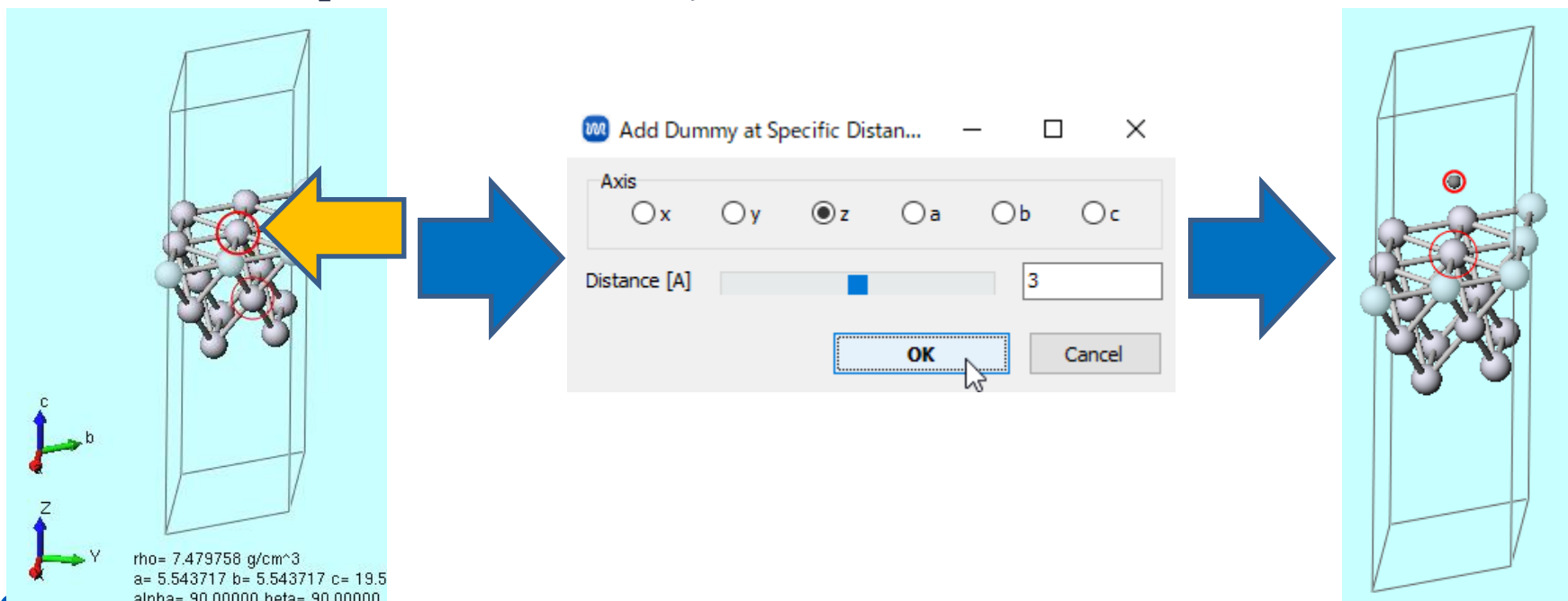
分子構造の作成方法の詳細は[分子モデリング有機分子編チュートリアル](#)を参照してください。

1. **編集 | 構造をリセット**をクリックします。
2.  **Y軸方向から表示**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 | O 8**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.  **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。



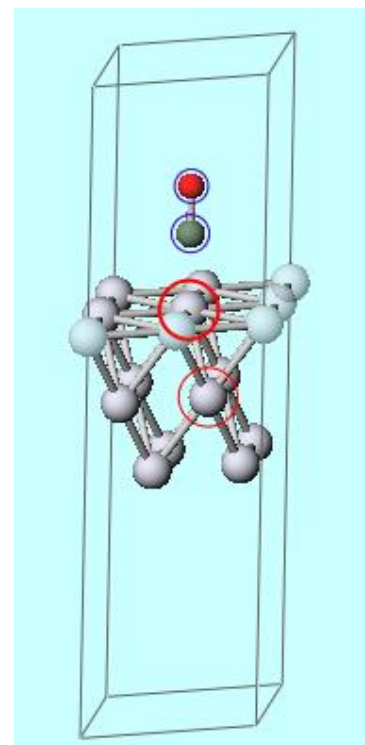
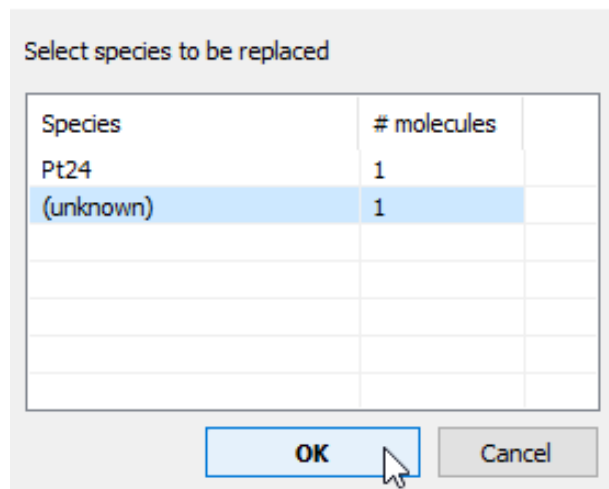
III.ontop/fcc/hcp吸着モデルの作成

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**をクリックします。
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。





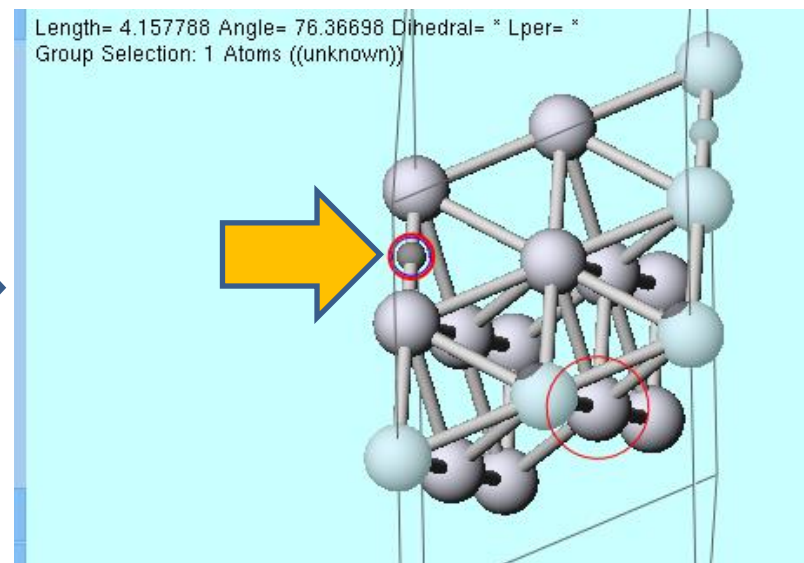
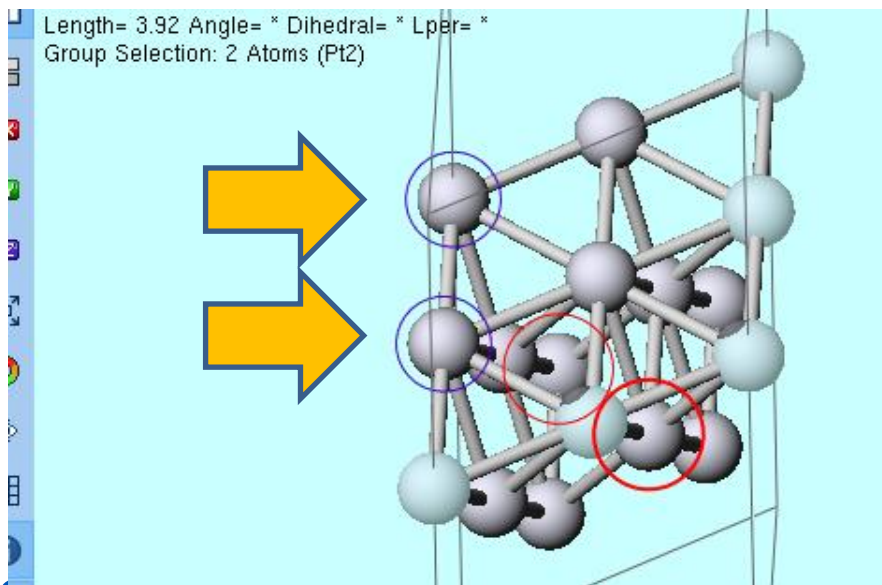
III.ontop/fcc/hcp吸着モデルの作成

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。





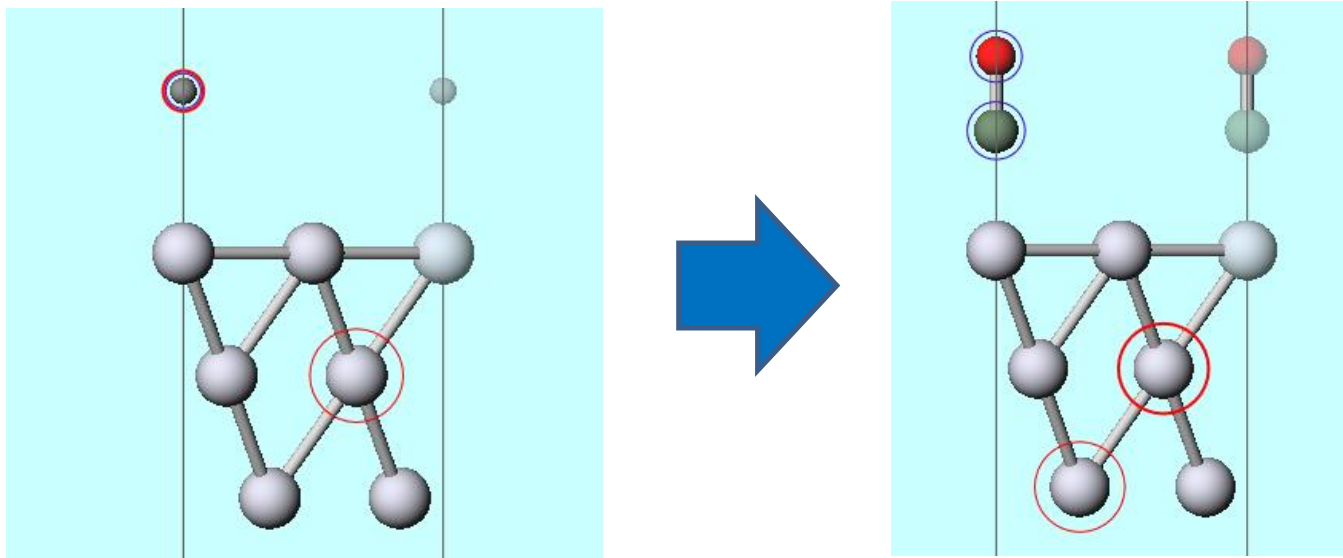
III.bridge吸着モデルの作成

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**をクリックします。
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

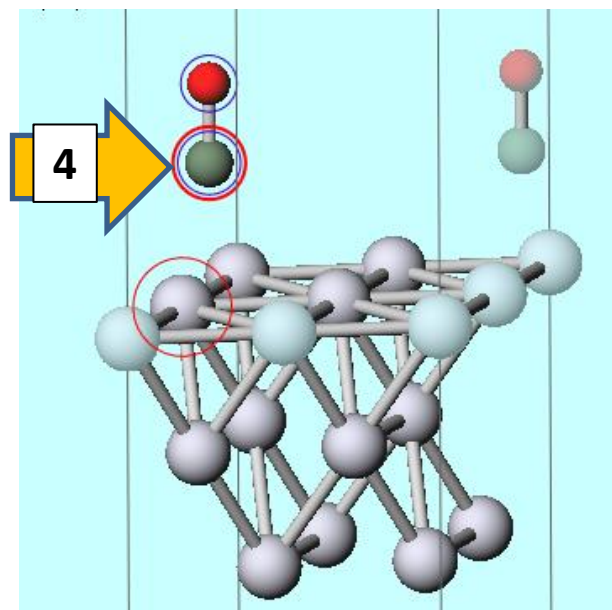
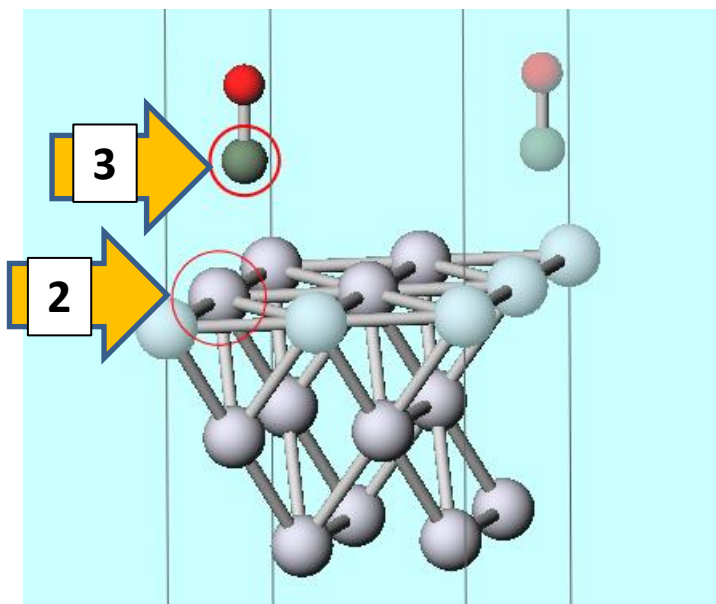
1.  X方向から表示をクリックします。
2.  グループ編集 | グループを並進移動 (数値を指定) をクリックし、Zを「3」に変更しOKをクリックします。
3. MD | 分子を置換をクリックし「(unknown)」の行をクリックしOKをクリックします。
4. 「配置する分子のファイルを選択してください」というダイアログが開いたらP. 4で保存したco.mol2を開きます。「Successfully replaced molecules」と表示されたらOKをクリックします。
5. 吸着分子の位置を調整する場合はP. 9に進みます。



IV. 吸着分子の位置調整

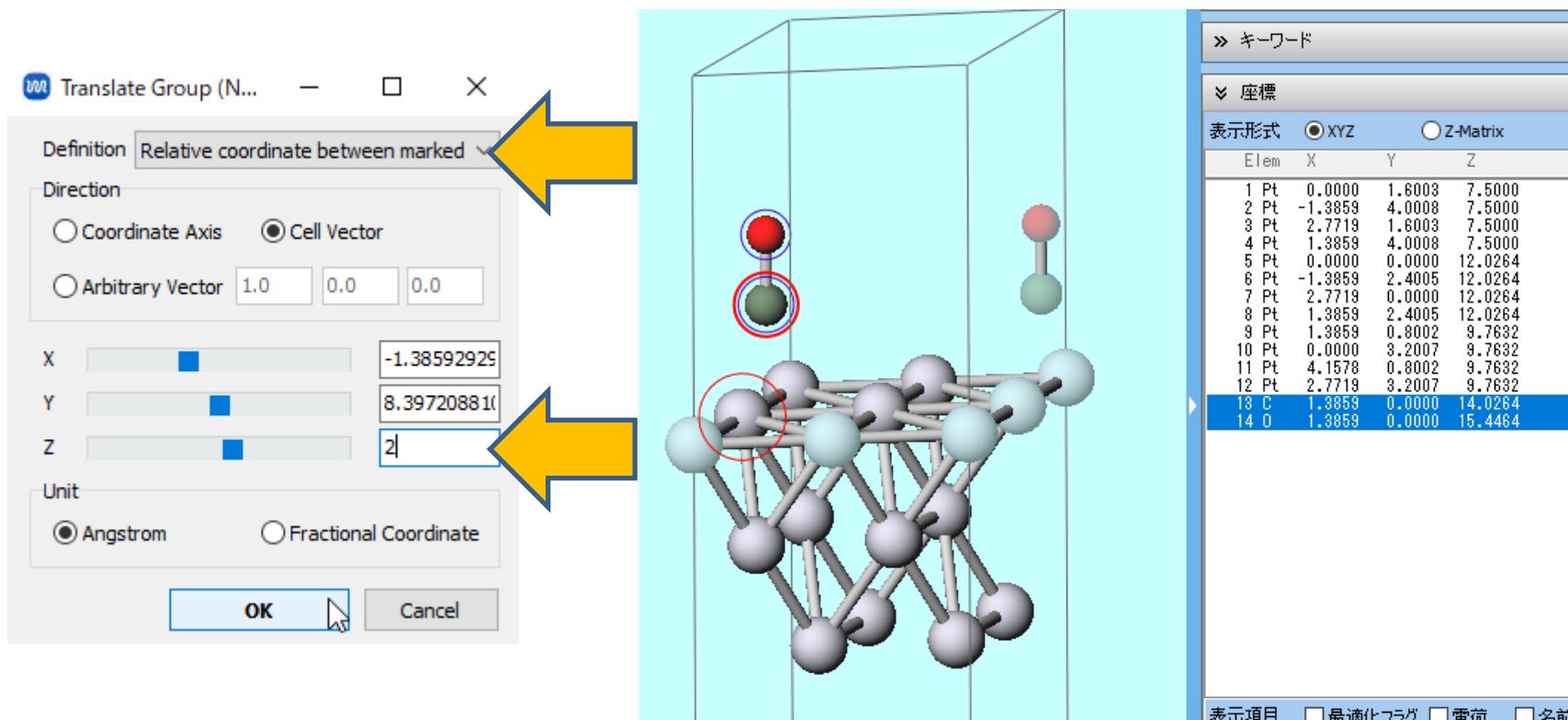
ここでは吸着分子のC原子とPtスラブ表面第1層の間の距離を2 Åに調整する方法を示します。

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。



The screenshot shows the 'Translate Group' dialog box with the following settings:

- Definition: Relative coordinate between marked atoms
- Direction: Cell Vector
- Arbitrary Vector: 1.0, 0.0, 0.0
- X: -1.38592929
- Y: 8.39720881
- Z: 2
- Unit: Angstrom

The 3D model shows a crystal structure with a group of atoms highlighted in red and green. The table on the right shows the coordinates of the atoms:

Elem	X	Y	Z
1 Pt	0.0000	1.6003	7.5000
2 Pt	-1.3859	4.0008	7.5000
3 Pt	2.7719	1.6003	7.5000
4 Pt	1.3859	4.0008	7.5000
5 Pt	0.0000	0.0000	12.0264
6 Pt	-1.3859	2.4005	12.0264
7 Pt	2.7719	0.0000	12.0264
8 Pt	1.3859	2.4005	12.0264
9 Pt	1.3859	0.8002	9.7632
10 Pt	0.0000	3.2007	9.7632
11 Pt	4.1578	0.8002	9.7632
12 Pt	2.7719	3.2007	9.7632
13 C	1.3859	0.0000	14.0264
14 O	1.3859	0.0000	15.4464

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