

 winmostar チュートリアル

# 結晶モデリング 表面修飾編

V11.13.2

2025年9月29日 株式会社クロスアビリティ

# 本書について

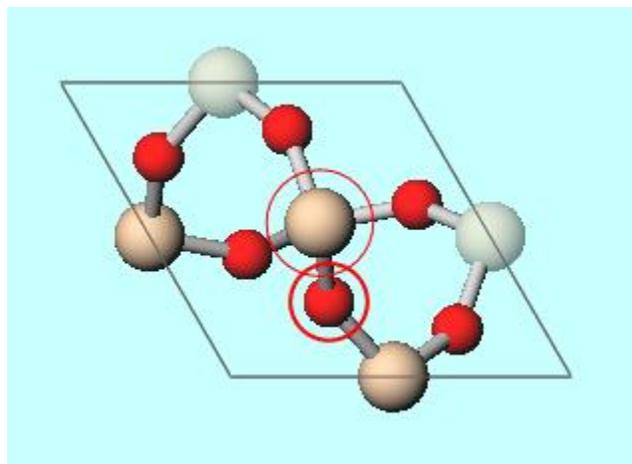
- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：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

本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。

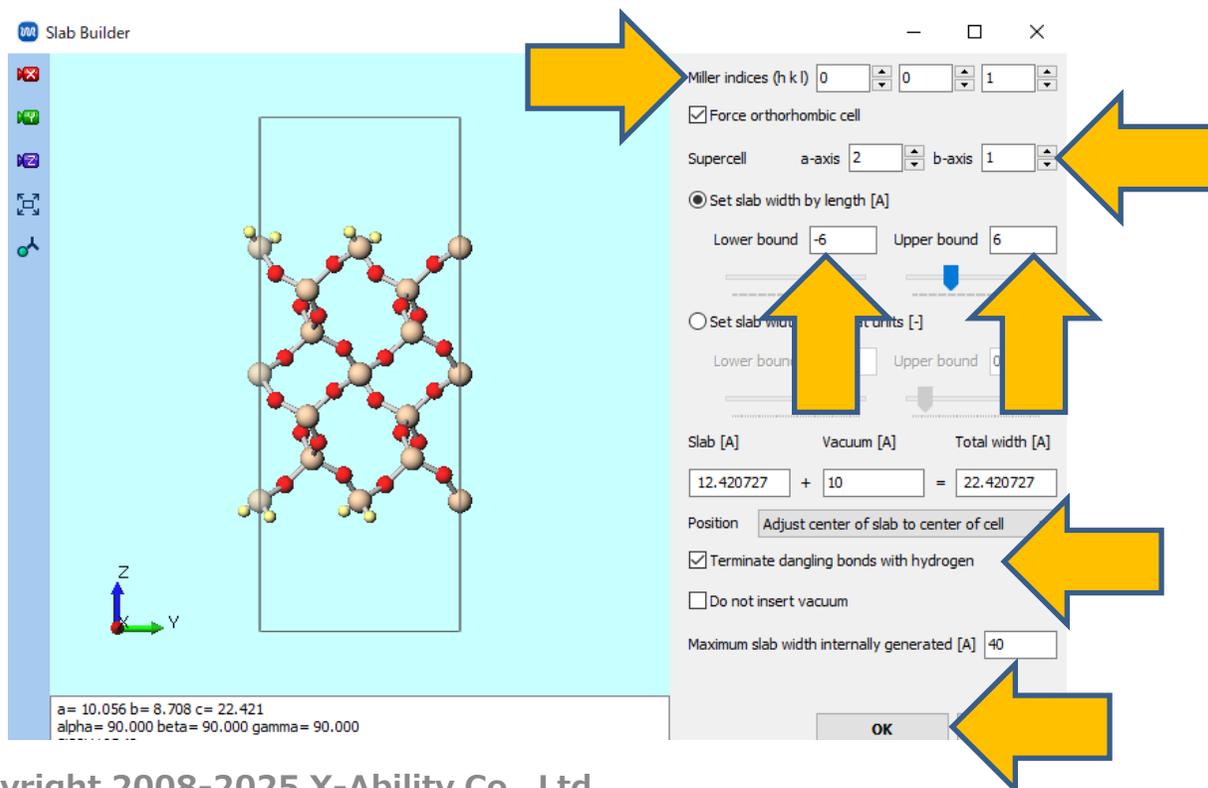
スラブの作成方法の詳細は[結晶モデリングスラブモデル編チュートリアル](#)を参照してください。

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** | **sio2\_alpha\_quartz.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。



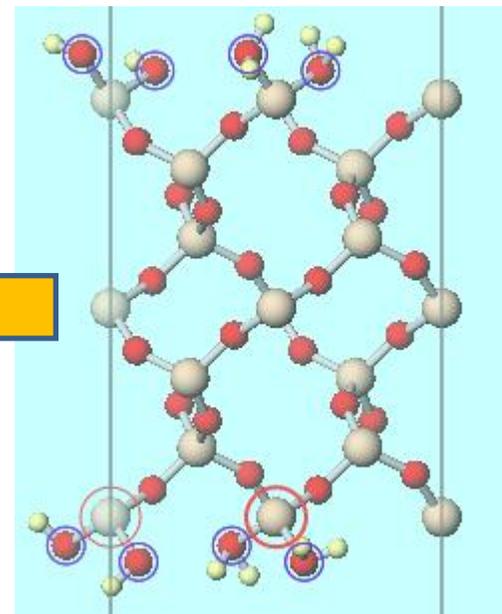
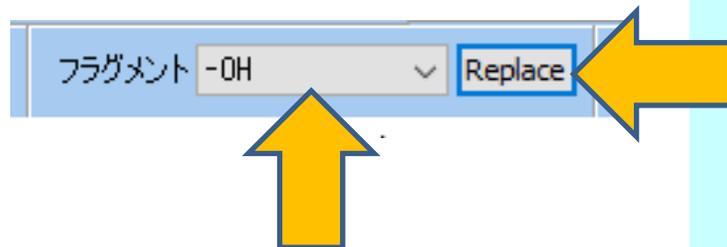
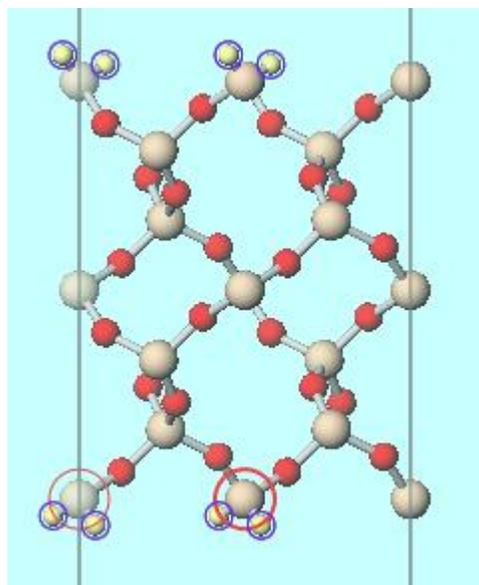
# I. スラブの作成

1. **Force orthorhombic**にチェックを入れ、**Supercell**の**a-axis**を「2」、**Lower bound**を「-6」、**Upper bound**を「6」に変更し**Terminate dangling bonds with hydrogen**にチェックを入れ**OK**をクリックします。
  - **Lower bound, Upper bound**の値によってはこの段階でP.5の構造を作成できますが、本書では任意の置換基での修飾方法を示すために敢えて上記のパラメータを使用します。



## II. 表面の修飾

1.  X軸方向から表示をクリックし  ウィンドウに合わせるをクリックします。
2. 選択 | 元素によるグループ選択をクリックし「3 H 16」の行をクリックしCloseをクリックします。
3. ツールバーのフラグメントで「-OH」を選択しReplace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