

 winmostar チュートリアル

結晶ビルダ (アナターゼ型TiO₂結晶)

V10.4.3

2021年4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 V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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

1. 単位格子の作成

アナターゼ型TiO₂結晶について

結晶格子： 正方晶 (Tetragonal)

空間群： I 41/a m d (141)

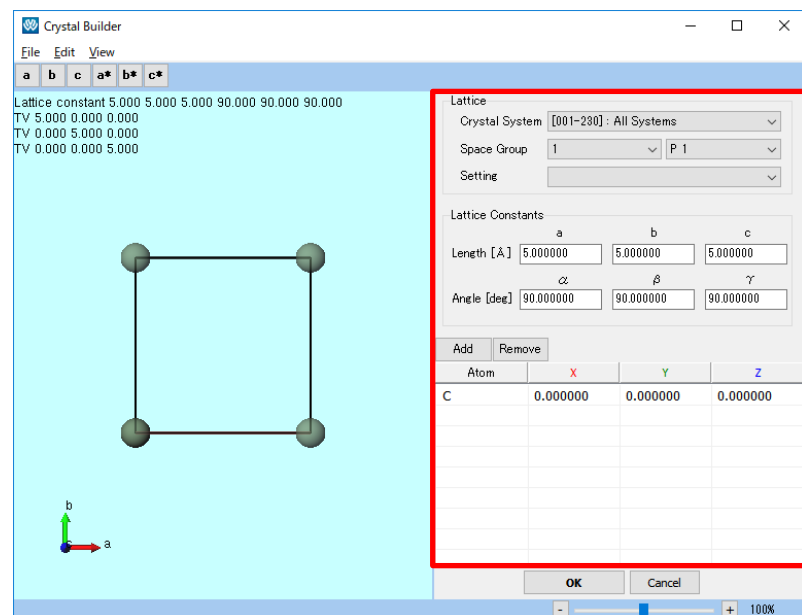
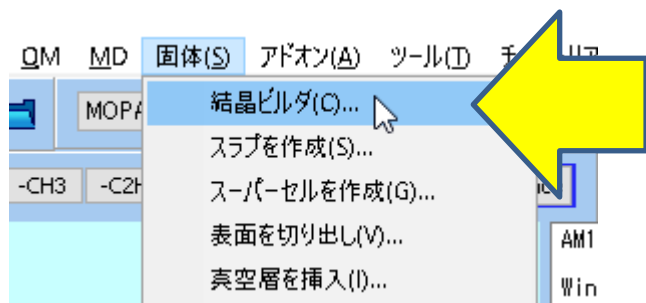
格子定数： a=3.7842 Å, c=9.5146 Å

非対称単位： Ti(0.0 0.0 0.0), O (0.0 0.0 0.2081)

2. スーパーセルの作成

I. 単位格子の作成1

1. メニューの**固体 | 結晶ビルダ(C)**をクリックする。別ウィンドウで結晶ビルダが表示される。
2. 次の5-7ページでは結晶ビルダの右側のフォームを利用して入力をしていく。



I. 単位格子の作成2

1. Crystal SystemでTetragonalを選択する。
2. Space Groupは141を選択する。
3. Lattice ConstantsのLengthのaに3.7842、cに9.5146を入力しEnterを押す。

Lattice			
Crystal System	[075-142] : Tetragonal		
Space Group	141	I 41/a m d	
Setting	1		

Lattice Constants			
	a	b	c
Length [Å]	3.784200	3.784200	9.514600
	α	β	γ
Angle [deg]	90.000000	90.000000	90.000000

I. 単位格子の作成3

1. [Add]をクリックして原子を追加する。
2. 一行一列目を二回クリックして、元素をCからTiに変更する。
3. 同様に二行目の元素をCからOに変更する。
4. 酸素原子の分率座標のZ成分を**0.2081**に変更する。

Atom	X	Y	Z
Ti	0.000000	0.000000	0.000000
O	0.000000	0.000000	0.2081

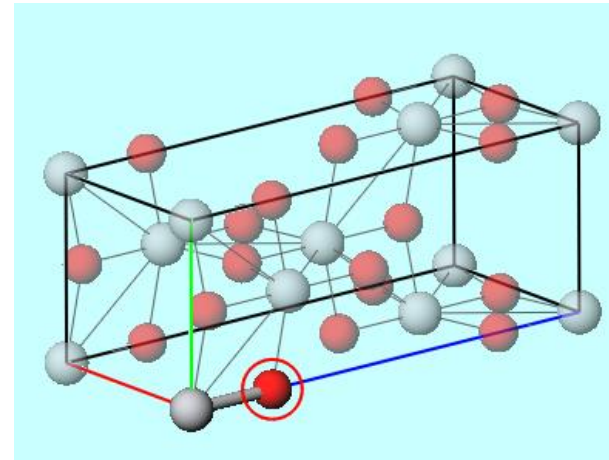
- 一回目のクリックは選択
- 二回目のクリックは編集に対応している

I. 単位格子の作成4

OKをクリックし、結晶ビルダでモデリングした構造をメイン画面に反映する。


Add		Remove		
Atom	X	Y	Z	
Ti	0.000000	0.000000	0.000000	
O	0.000000	0.000000	0.2081	

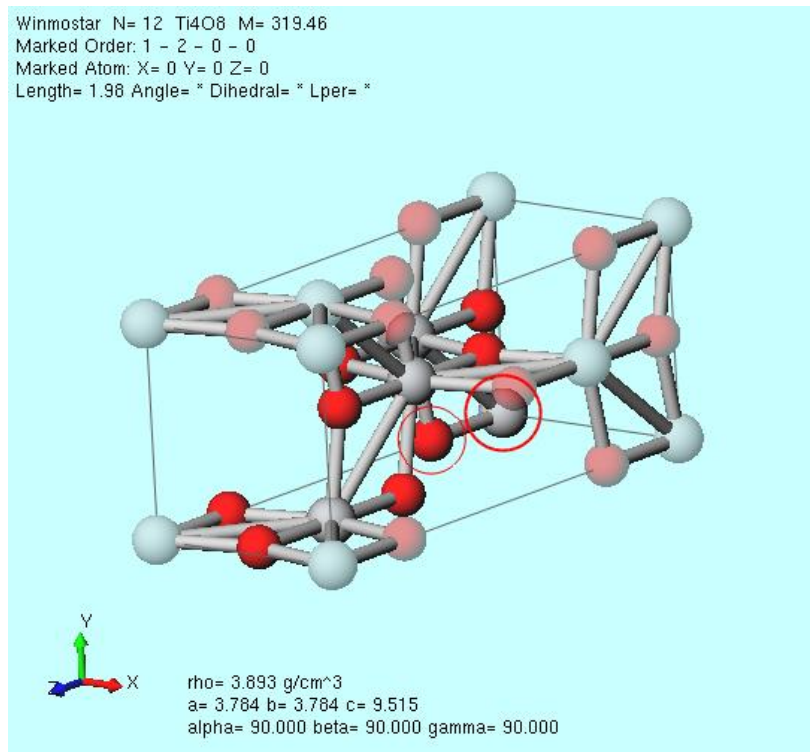
OK Cancel



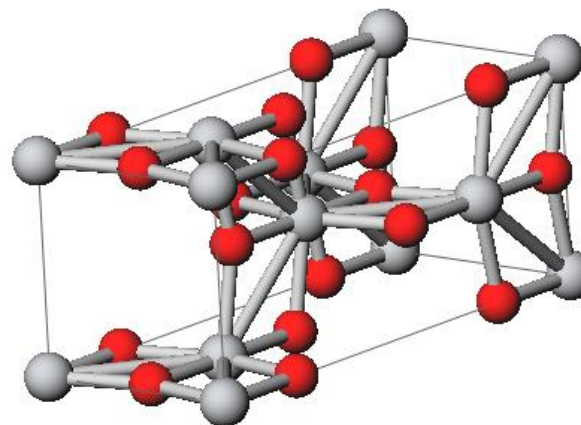
※ Winmostar V10.3系列以前では、メインウィンドウに結晶の非対称要素のみが表示されるため、上図と見た目が異なりますが、実際の構造に違いはありません。

I. 単位格子の作成4

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る。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」を選択する。あるいは、**ツール | 環境設定 | 表示 | セル境界上の原子を両端に表示**の設定を調整する。



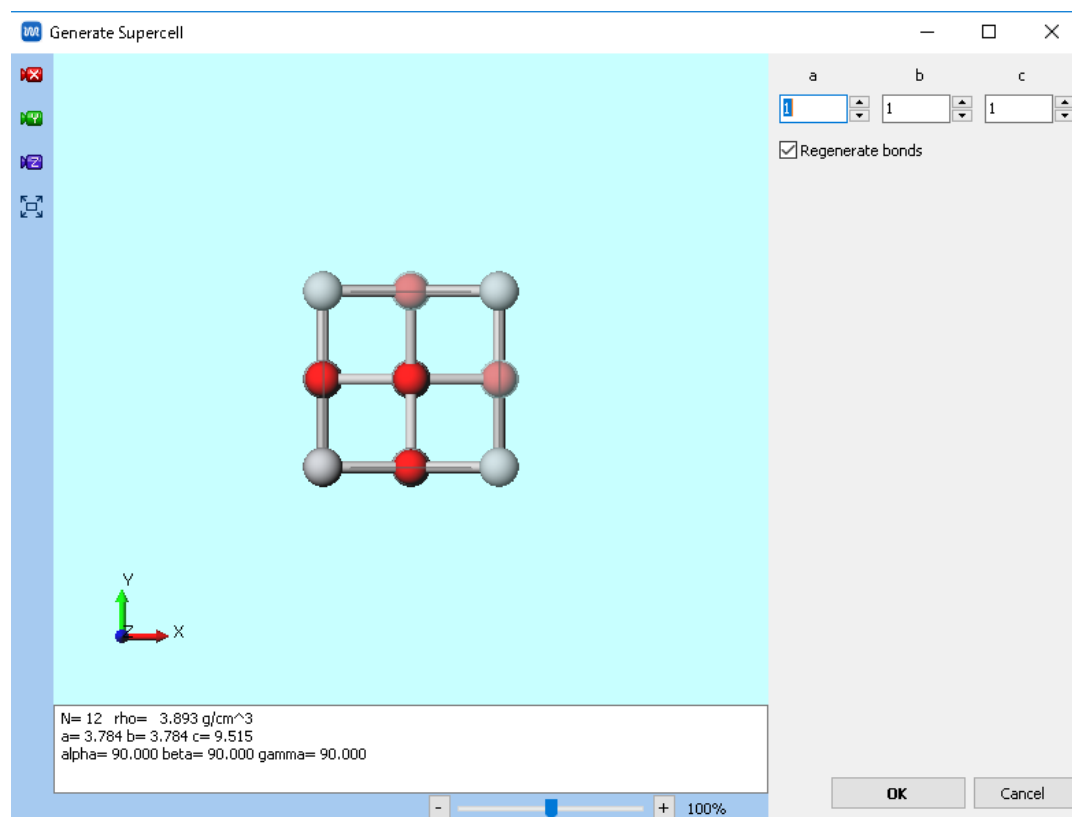
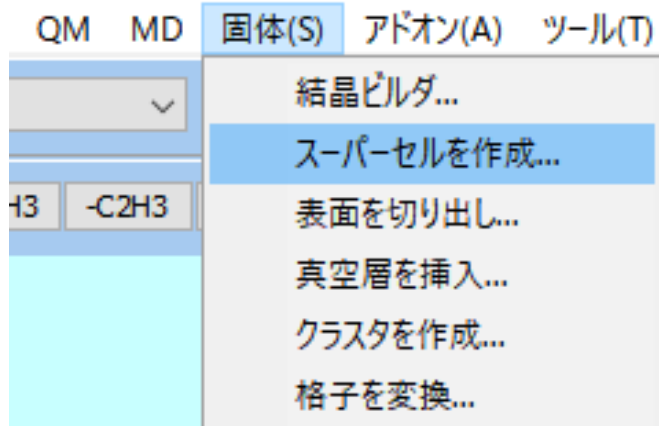
Winmostar Modelling (デフォルト)



Winmostar Report

II. スーパーセルの構築1

1. メニューで**固体** | **スーパーセルを作成**をクリックする。
2. スーパーセル作成ウィンドウが表示される。

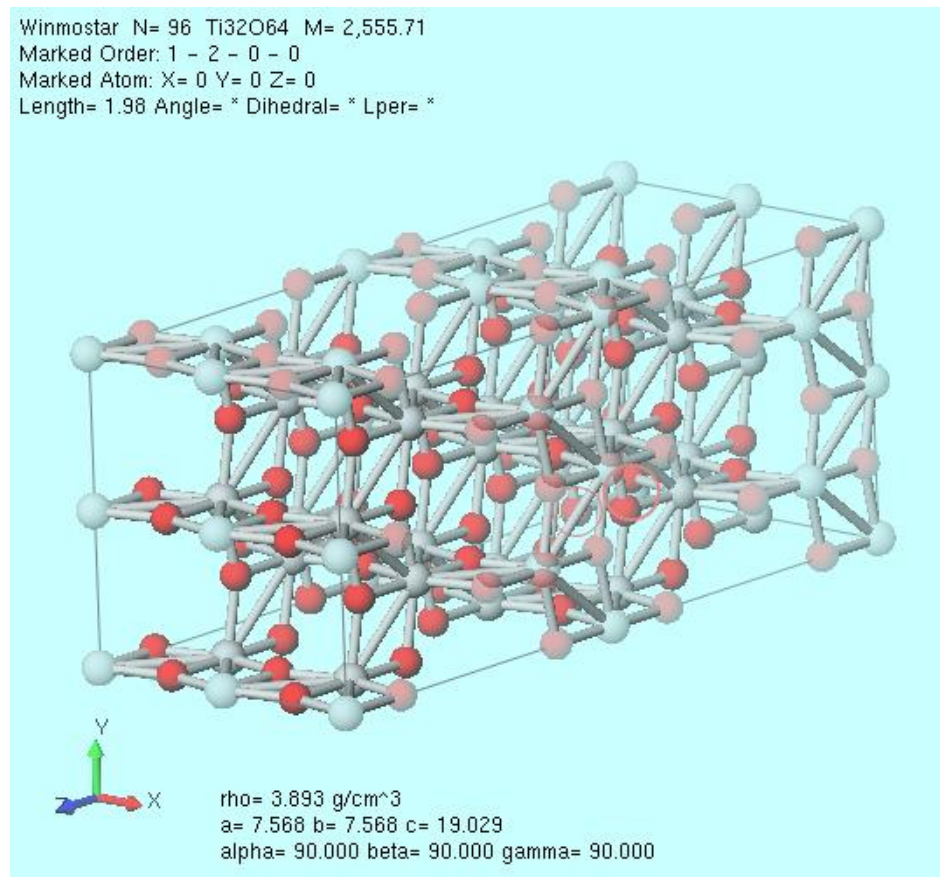


II. スーパーセルの構築2

a, b, c軸方向の反復数をそれぞれ2, 2, 2とし、**OK**ボタンをクリックする。

a	b	c
2	2	2
<input checked="" type="checkbox"/> Regenerate bonds		

OK	Cancel
-----------	--------



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