

 winmostar チュートリアル

スラブ作成 Fe (1 1 0)面

V10.2.4

2020年10月5日 株式会社クロスアビリティ

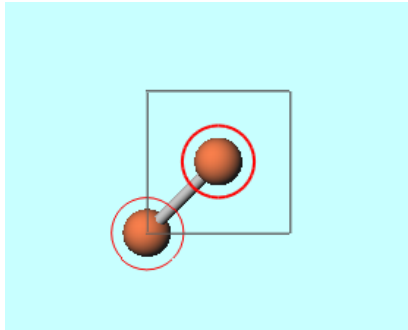
本書について

- 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。

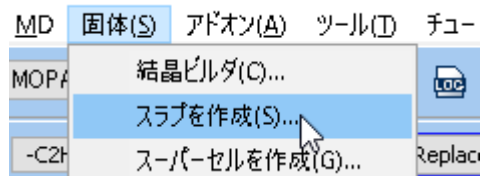
I. 単体格子の読み込み

チュートリアル | Samplesフォルダを開くをクリックする。

1. サンプルフォルダ内のfe.cifをメインウィンドウ内にドラッグアンドドロップする。
(デフォルトではC:\winmos10\Samples\fe.cif)

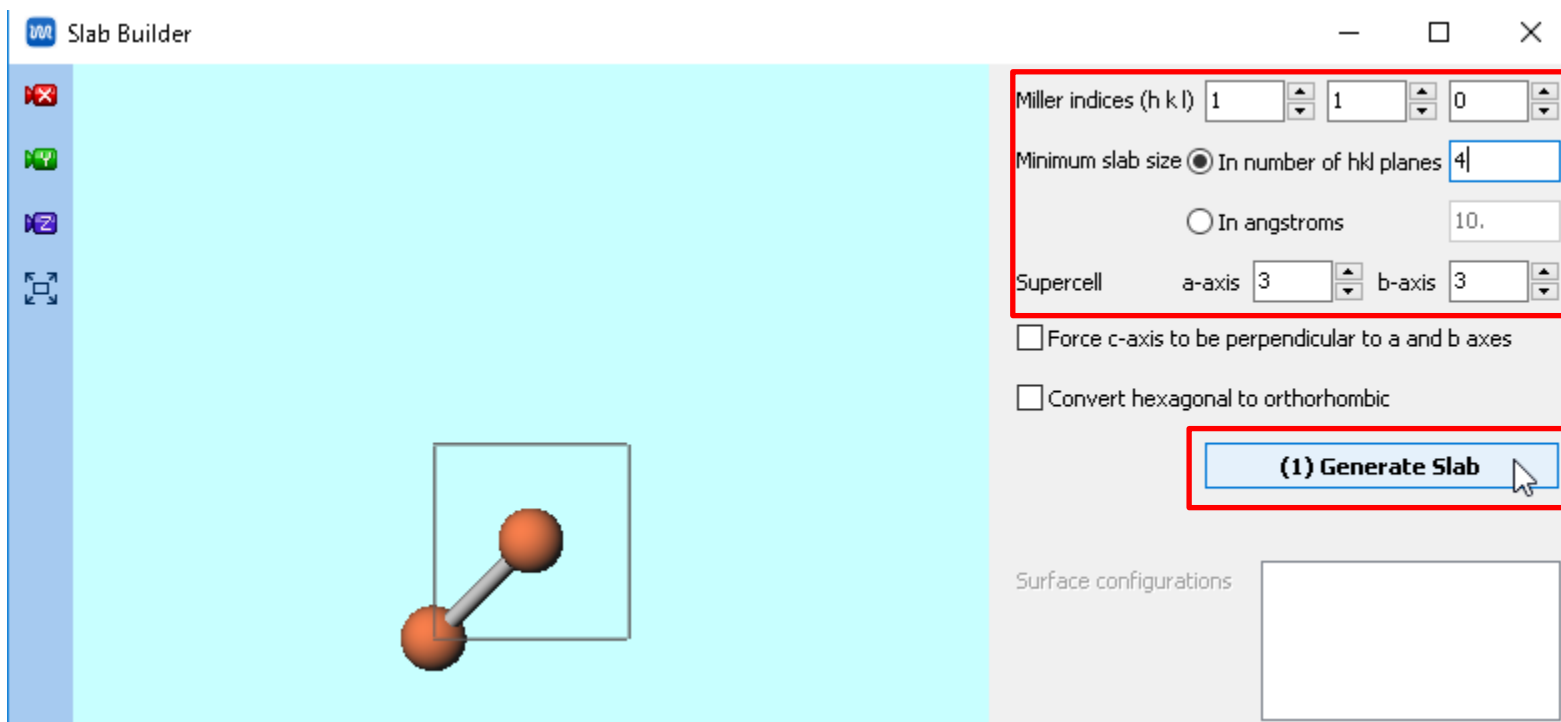


3. **固体 | スラブを作成**をクリックすると、「Analyzing symmetry using Spglib...」と数秒表示された後、**Slab Builder**ウィンドウが出現する。



II. スラブの作成

1. **Miller indices**の数字を切り出したい表面の指数「1」「1」「0」に変更する。厚みを変更するため**Minimum slab size**の**In number of hkl planes**を「4」に変更し、表面方向にセルを拡張するため**Supercell**の値を「3」「3」に変更する。そして**Generate Slab**ボタンをクリックする。「Calculating using pymatgen...」と数秒表示され、**Surface configurations**に候補構造が出現する。



II. スラブの作成

1. 必要に応じて、表面の原子層を**Surface configurations**で、真空層の厚みを**Vacuum**または**Total width**で変更する（ここでは変更せず）。シミュレーションセル内でのスラブ位置を変える場合は**Position**を変更する（下図参照）。

- □ ×

Miller indices (h k l) 1 1 0

Minimum slab size In number of hkl planes 4
 In angstroms 10.

Supercell a-axis 3 b-axis 3

Force c-axis to be perpendicular to a and b axes
 Convert hexagonal to orthorhombic

(1) Generate Slab

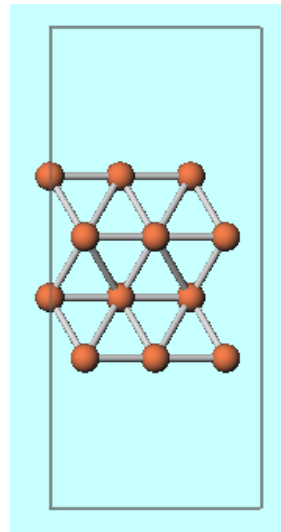
Surface configurations 1(1 1 0)

Slab [A] 6.080765 + Vacuum [A] 10 = Total width [A] 16.080765

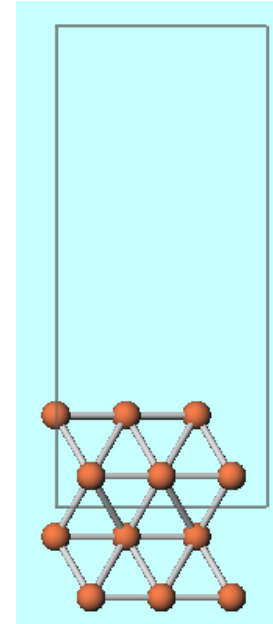
Position Adjust center of slab to center of cell

(2) OK Cancel

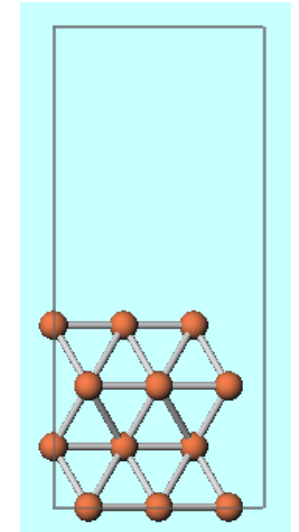
Adjust center
of slab to
center of cell



Adjust center
of slab to
origin of cell

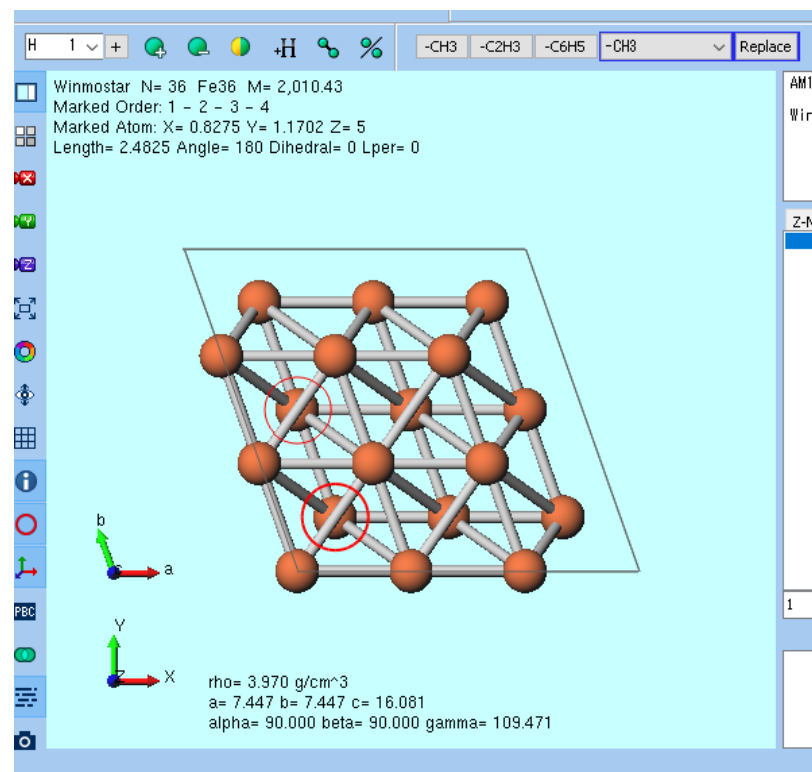
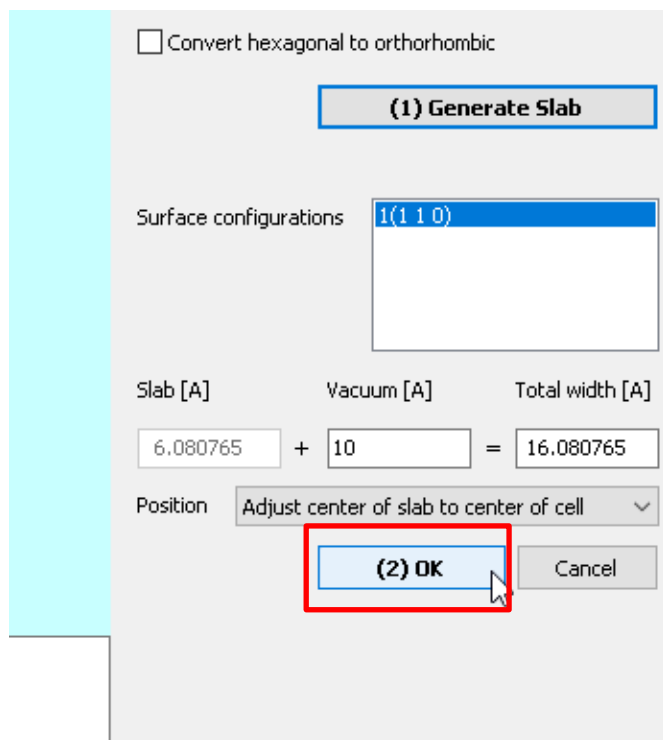


Adjust origin of
slab to origin
of cell



II. スラブの作成

1. OKボタンをクリックすると、メインウィンドウにスラブが出現する。



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