

結晶ビルダ

基本操作

(Ni-Al合金)

V7.000

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/10/01

Contents

I. 単位格子の作成

金属間化合物NiAl結晶について

結晶格子: 立方晶 (Cubic)

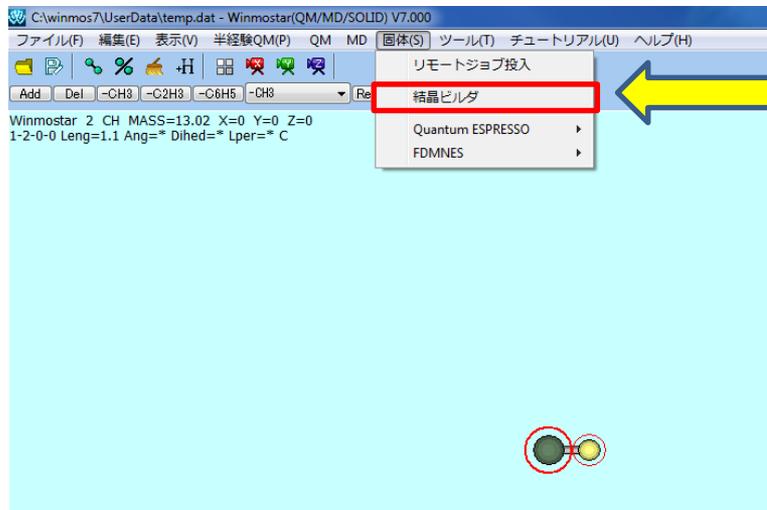
空間群: Pm-3m (221)

格子定数: $a=2.88 \text{ \AA}$

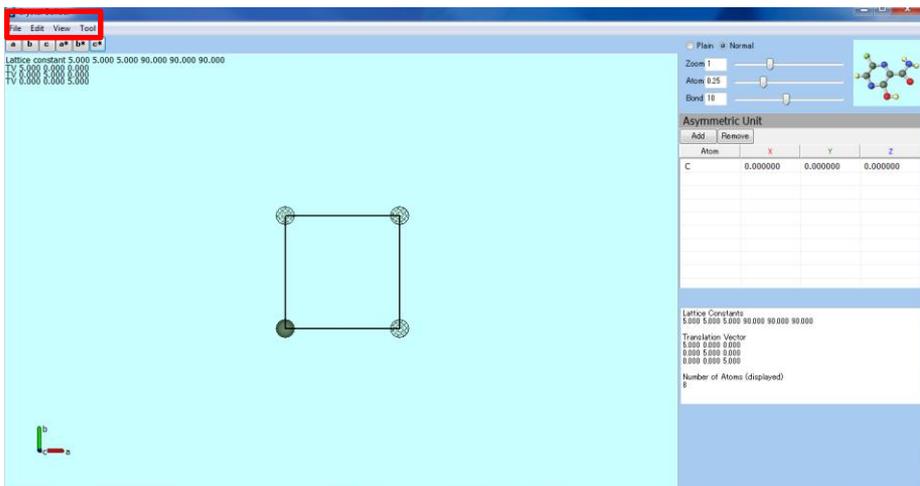
非対称単位: Ni(0.0 0.0 0.0), Al (0.5 0.5 0.5)

II. スーパーセルの作成

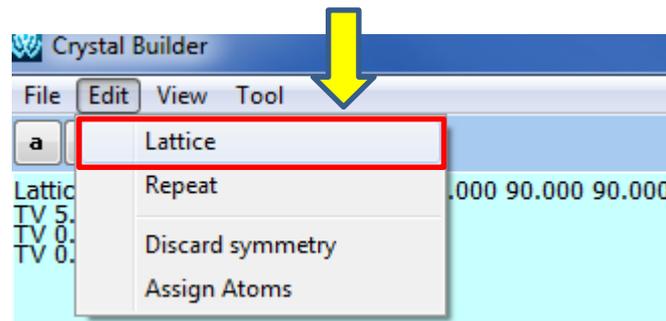
I. 単性格子の作成1



1. [固体] > [結晶ビルダ]をクリック

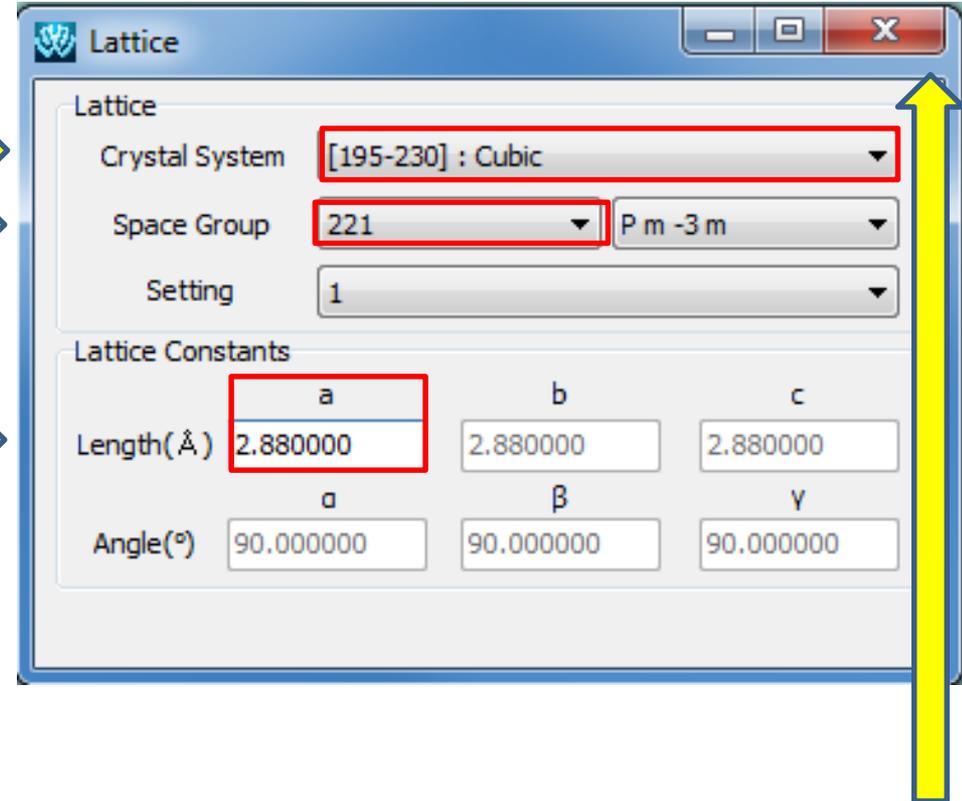


2. [Edit] > [Lattice]をクリック



1. 単位格子の作成2

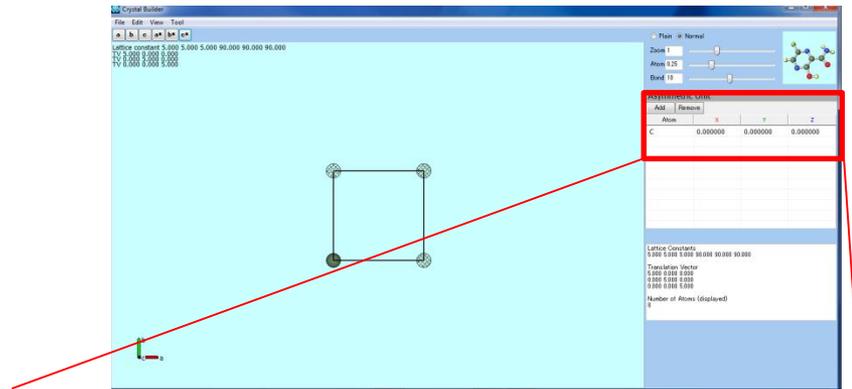
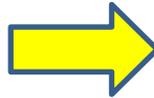
1. Crystal Systemで Cubicを選択
2. Space Group は221を選択
3. Lattice ConstantsのLengthの aに2.88を入力しEnter



4. 入力後は × ボタンで閉じる

1. 単位格子の作成3

1. [Add]をクリックして原子追加

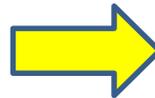


Asymmetric Unit

Add Remove

Atom	X	Y	Z
C	0.000000	0.000000	0.000000

2. Atom, X, Y, Zの項目を
右図のように変更
(X, Y, Zは分率座標)

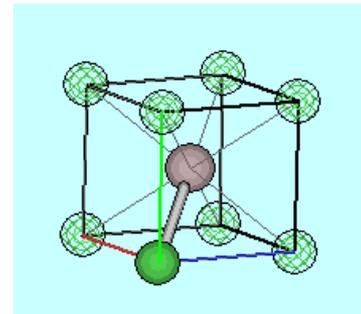


Asymmetric Unit

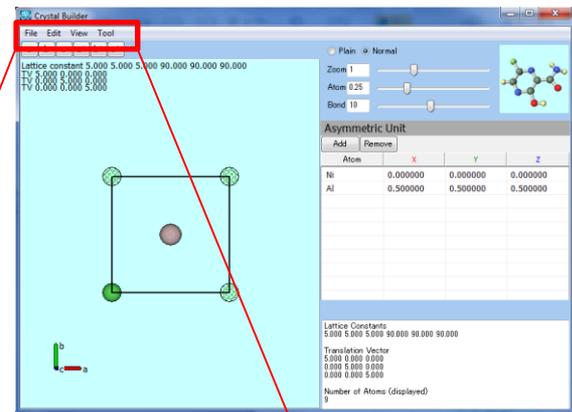
Add Remove

Atom	X	Y	Z
Ni	0.000000	0.000000	0.000000
Al	0.500000	0.500000	0.500000

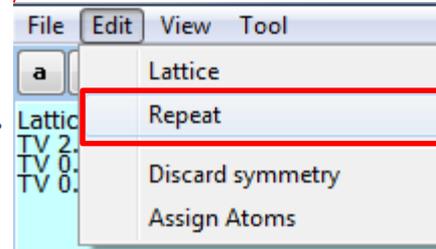
3. グラフィック画面上には、
右のような構造が表示されている



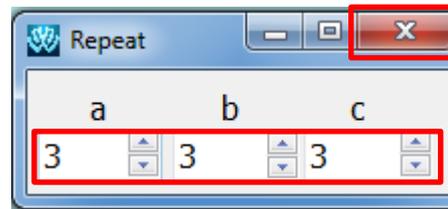
II. スーパーセルの構築



1. [Edit] > [Repeat]をクリック



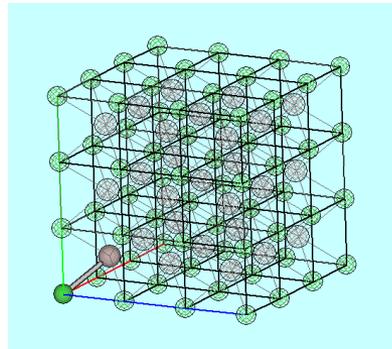
2. 図のように入力



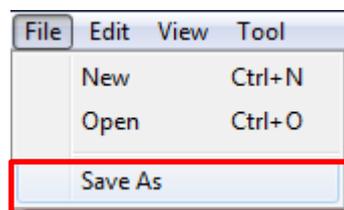
3. ×ボタンを押して閉じる



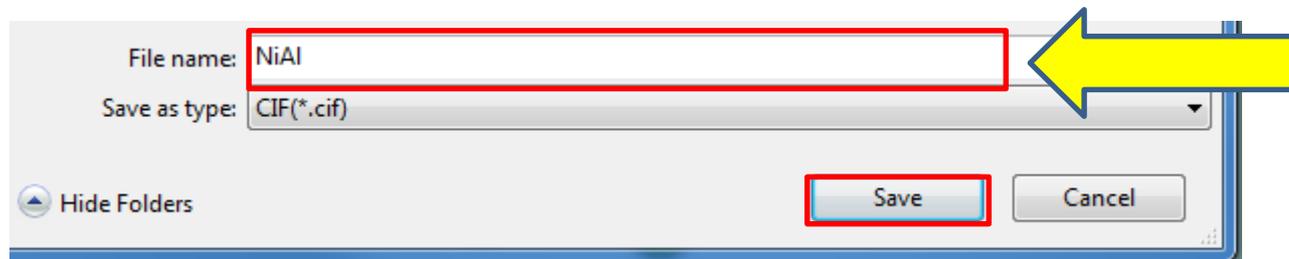
4. 3x3x3のスーパーセル完成



III. ファイルの保存



1. [Save As] をクリックする。



2. ファイル名を入力して [Save] をクリックする。

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38