

結晶ビルダ

表面切り出し

Fe (1 1 0)面

V8.017

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2018/04/10

Contents

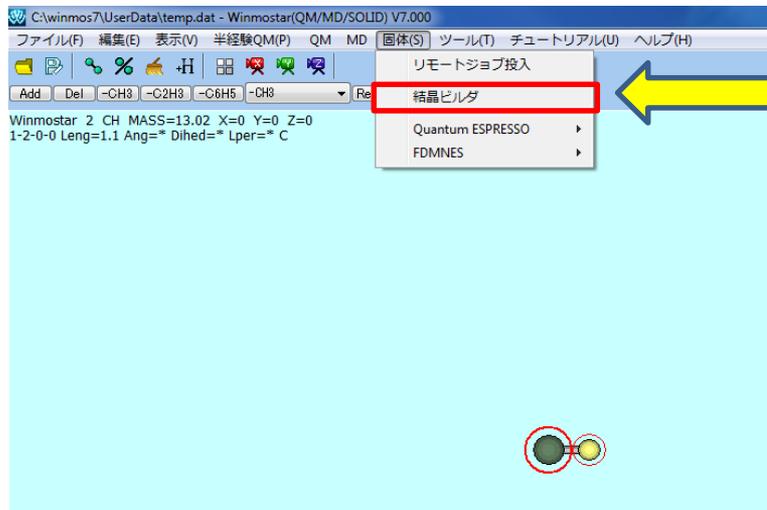
I. Fe単位格子の作成

II. (1 1 0)表面の指定

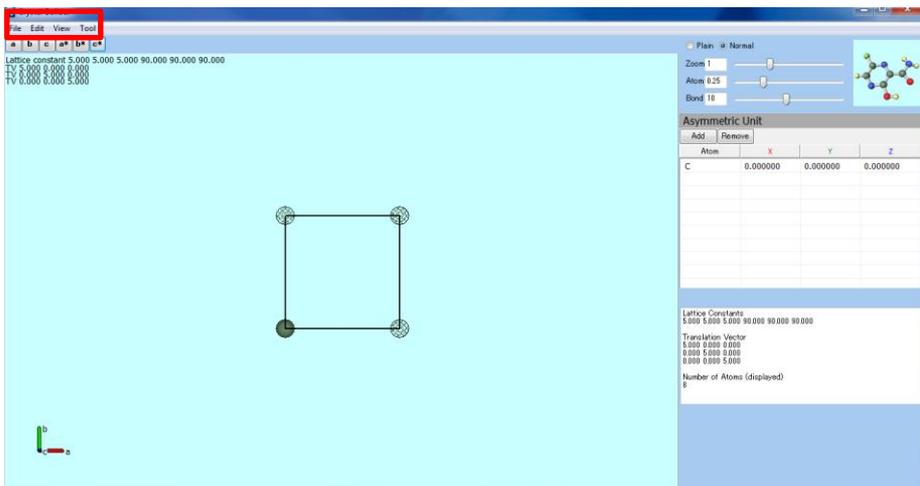
III. 直方格子への変換

Appendix マニュアルモードの使い方

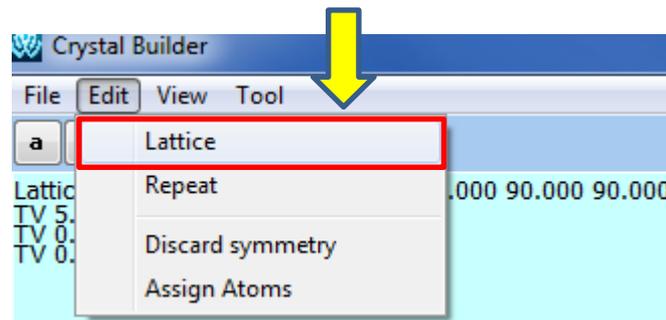
I. 単位格子の作成1



1. [固体] > [結晶ビルダ]をクリック

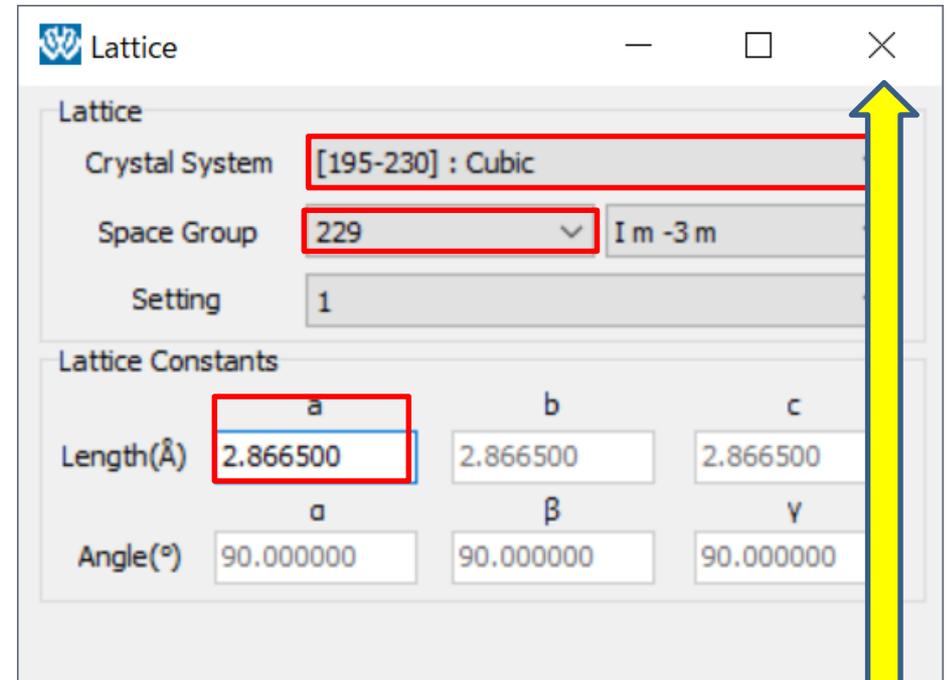


2. [Edit] > [Lattice]をクリック



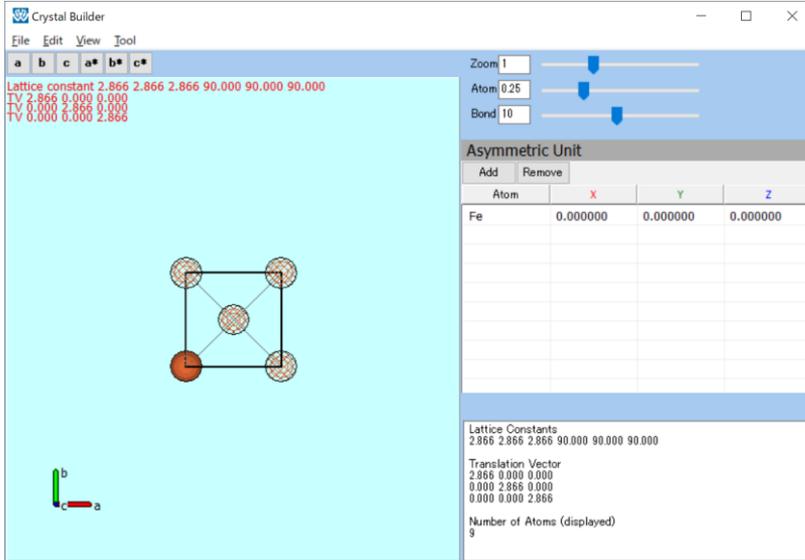
1. 単位格子の作成2

1. Crystal Systemで Cubicを選択
2. Space Group は229を選択
3. Lattice ConstantsのLengthの aに2.8665を入力しEnter

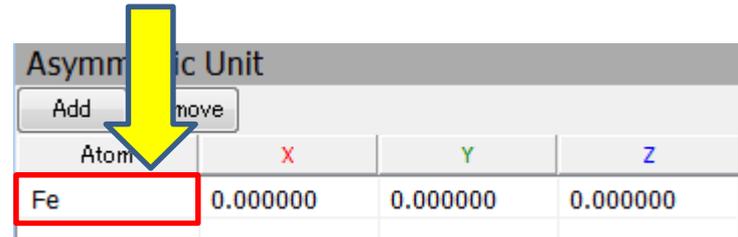


4. 入力後は×ボタンで閉じる

I. 単位格子の作成3

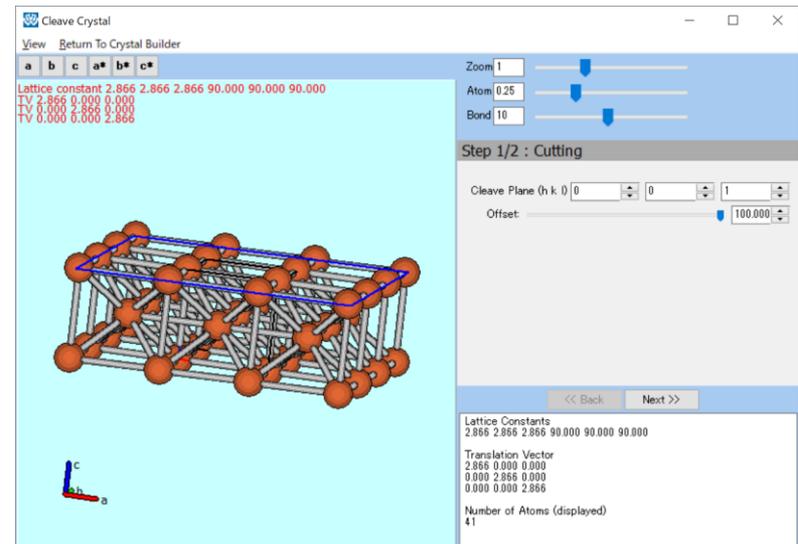


1. Feと入力

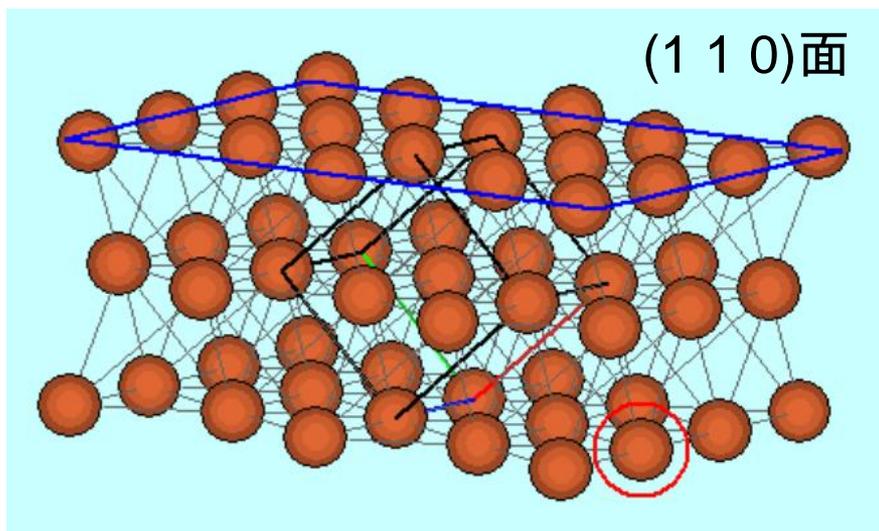
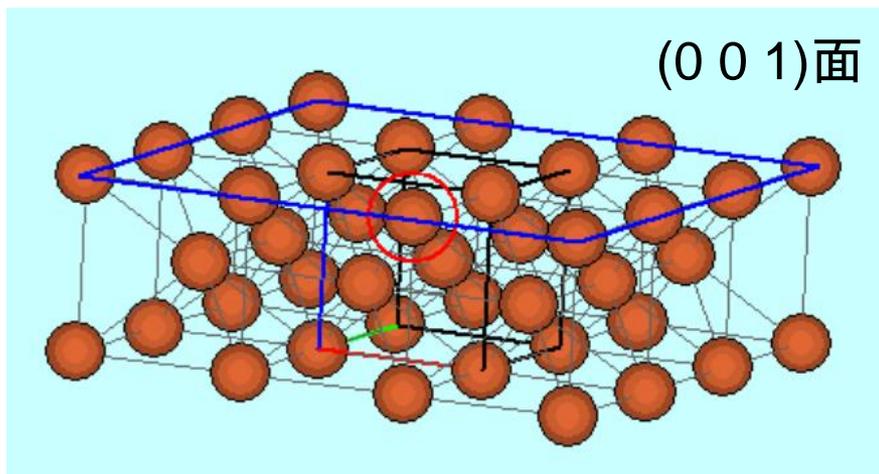


2. クリック

表面切り出し画面に遷移



II. (1 1 0)面の指定



1. ボンドが太すぎて見づらいときは、以下のように調節しボンドを細く描画できる。

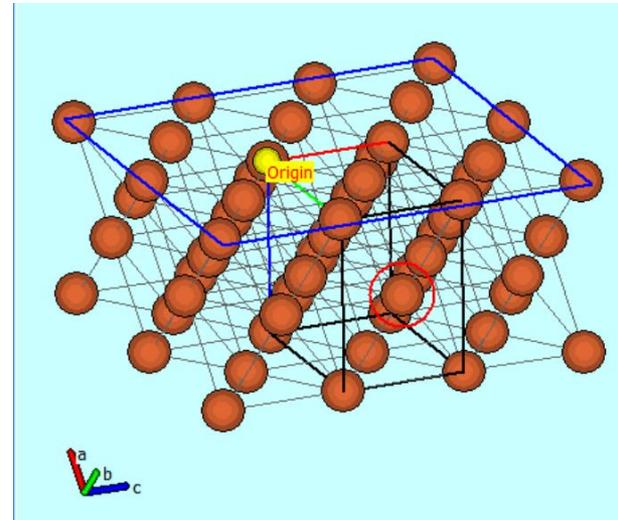
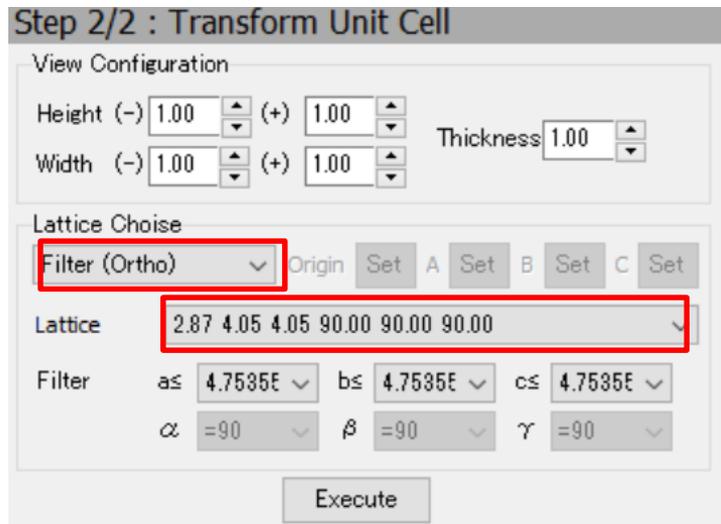


2. 以下のように入力



III. 直方格子への変換1

1. 画面が遷移した瞬間に、ミラー面に平行な格子が選択される。※1
2. Filter (Ortho)と選択すると、直方体セルが選択される。※2, 3
3. 可能性のある格子が複数存在する場合は、Latticeから候補を選択する。



- *1 ミラー指数を満たす格子の候補を自動的に探索している。
この時、格子のa, b軸はミラー面に平行、c軸はミラー面の下側になるように選ばれる。
- *2 Filterモードでは格子候補を長さや角度による制約を課すことで検索できる。
直方のセルを検索したい場合はFilter(Ortho)を、それ以外の候補も含めて検索したいときはFilter(All)を選ぶとよい。
- *3 Manualモードの使い方についてはAppendixを参照

III. 直方格子への変換2

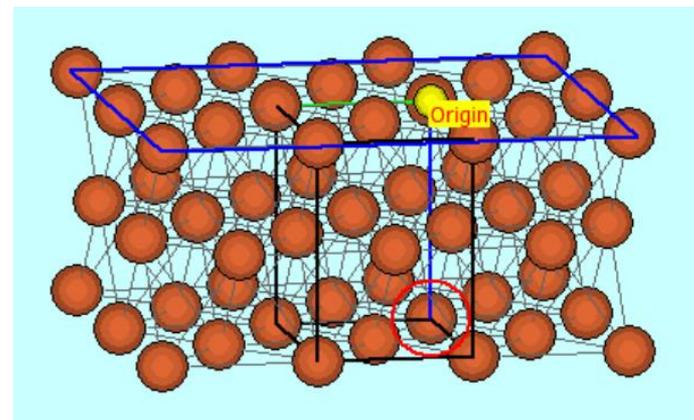
1. 右図のようになっていることを確認して「Execute」をクリック

Lattice: 2.87 4.05 4.05 90.00 90.00 90.00

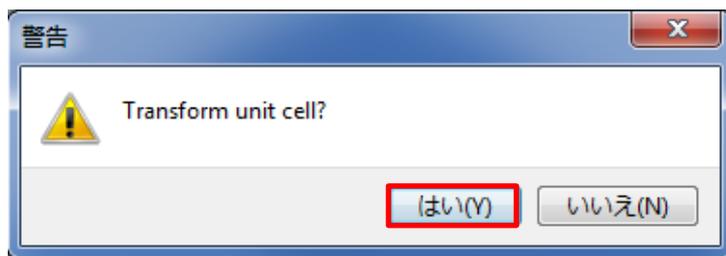
Filter: a≤ 4.7535E, b≤ 4.7535E, c≤ 4.7535E

α =90, β =90, γ =90

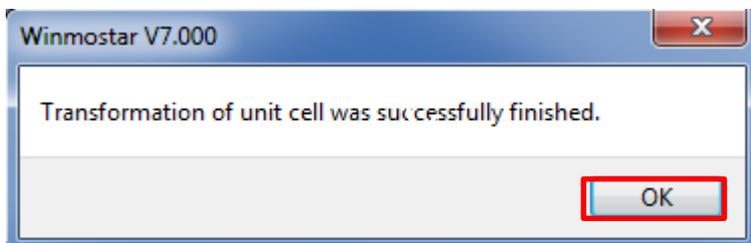
Execute



2. 「はい」をクリック



3. 「OK」をクリック



Atom	X	Y	Z
Fe	0.000000	0.500000	0.500000
Fe	0.500000	0.000000	0.500000
Fe	0.500000	0.500000	0.000000
Fe	0.000000	0.000000	0.000000

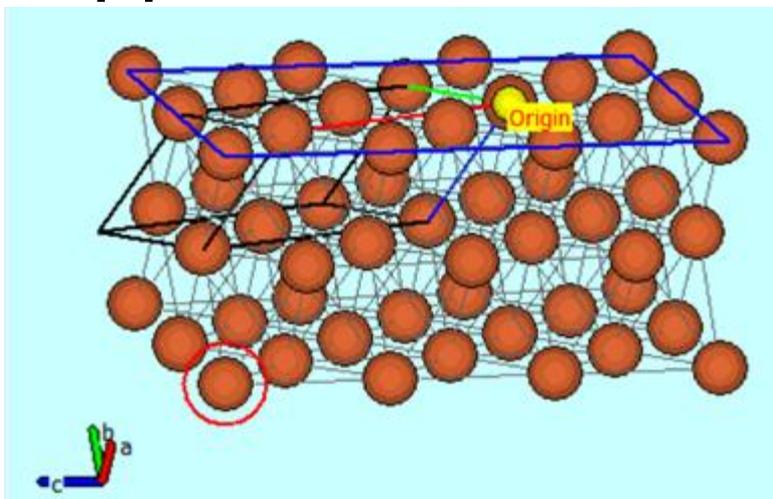
Lattice Constants: 4.054 2.866 4.054 90.000 90.000 90.000

Translation Vector: 4.054 0.000 0.000, 0.000 2.866 0.000, 0.000 0.000 4.054

Number of Atoms (displayed): 14

格子変換実行後、結晶ビルダの基本操作画面遷移する。保存を行い。右上×ボタンを押してメイン画面に戻る。

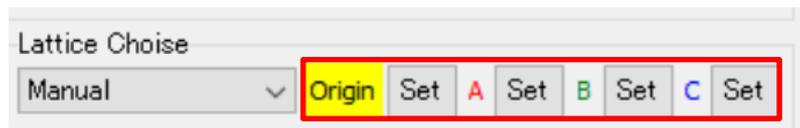
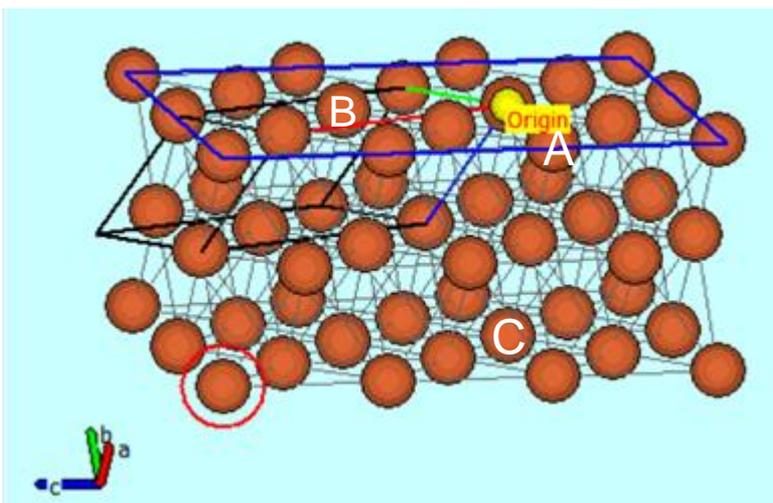
Appendix. マニュアルモードの使い方



1. 左図のようにアングルを調節

注意:

次のステップで、デフォルトで選ばれるセルから正方格子への格子の変換を行う。ここでは説明の都合上、一方方向からの静止画をもとに説明する。実際にはカメラを適宜回転させながら、格子点を選ぶ操作が必要である。



2. Aの原子を選択後、Aの右のSetクリック
3. Bの原子を選択後、Bの右のSetクリック
4. Cの原子を選択後、Cの右のSetクリック

* 図中のA, B, Cは説明のために記載している(実際のシステムには表示されない)

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

👍 いいね!