

結晶ビルダ 真空層挿入機能 (金スラブ)

V8.028

株式会社クロスアビリティ

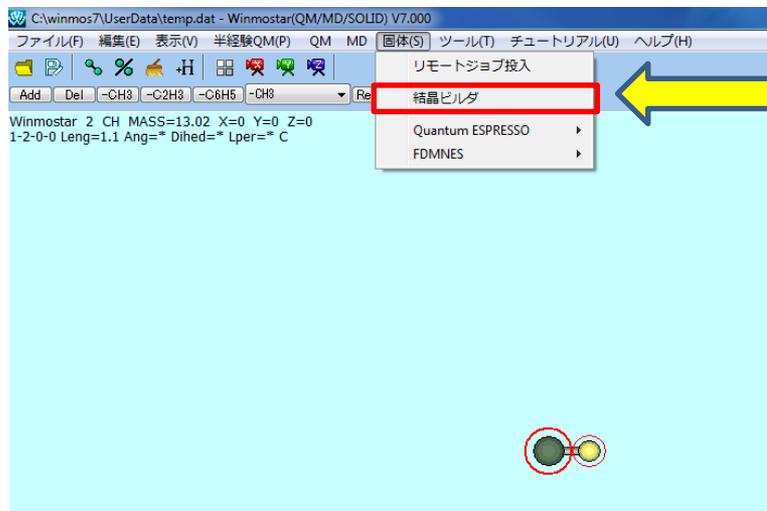
question@winmostar.com

2018/9/23

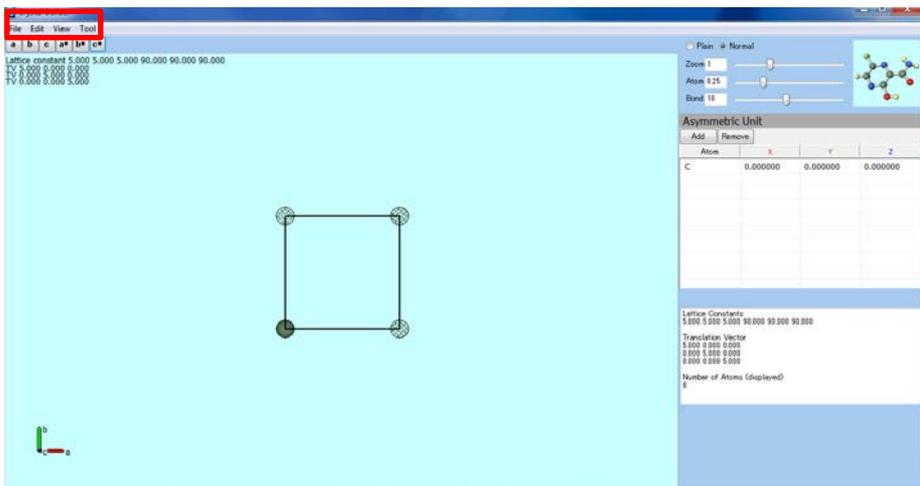
Contents

- I. 単位格子の作成
- II. 真空層挿入

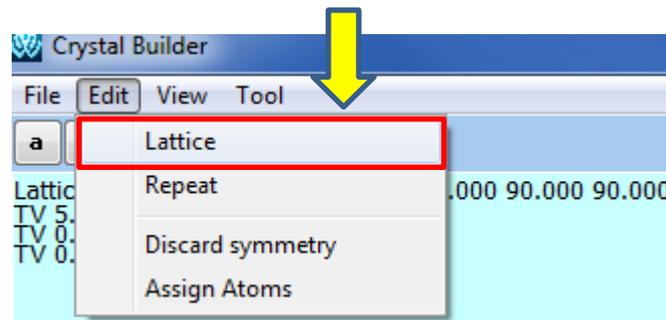
I. 単性格子の作成1



1. [固体] ->[結晶ビルダ]をクリック

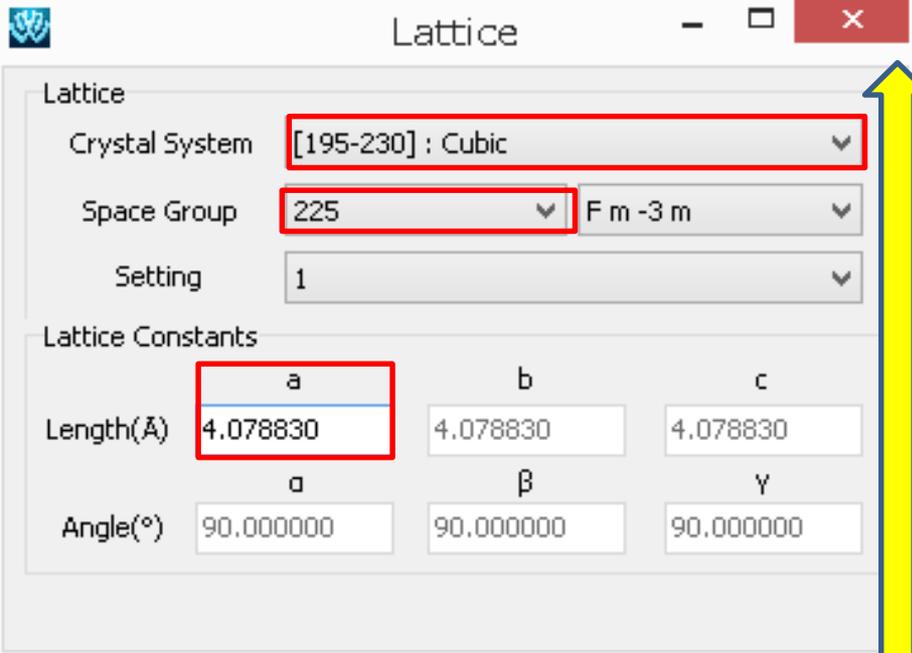


2. [Edit] ->[Lattice]をクリック



1. 単位格子の作成2

1. Crystal Systemで Cubicを選択 
2. Space Group は225を選択 
3. Lattice ConstantsのLengthの aに4.07883を入力しEnter 



Lattice

Lattice

Crystal System [195-230] : Cubic

Space Group 225 F m -3 m

Setting 1

Lattice Constants

	a	b	c
Length(Å)	4.078830	4.078830	4.078830
Angle(°)	α 90.000000	β 90.000000	γ 90.000000

4. 入力後は × ボタンで閉じる

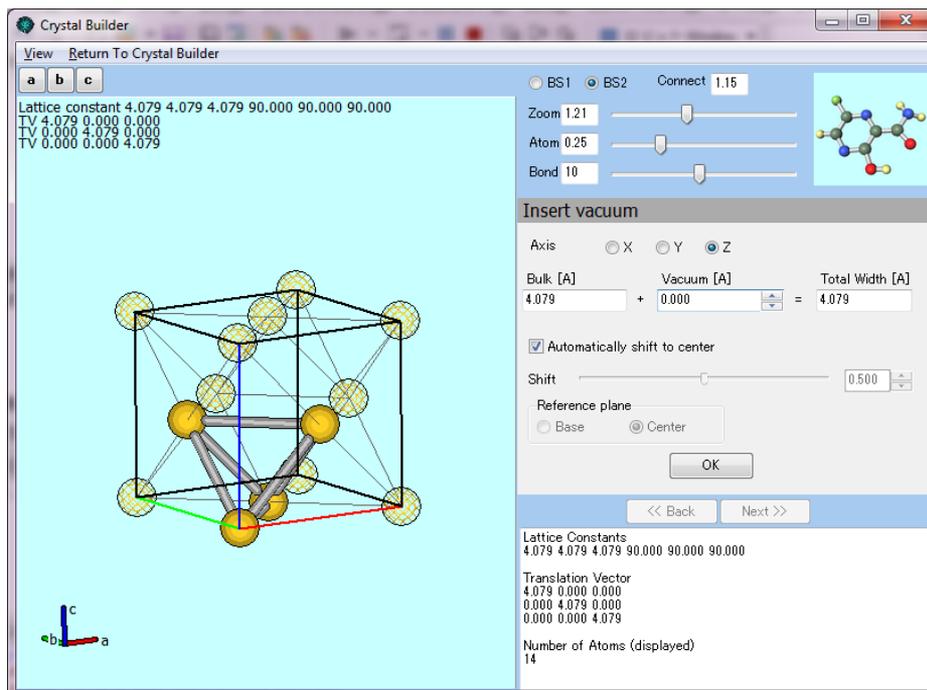
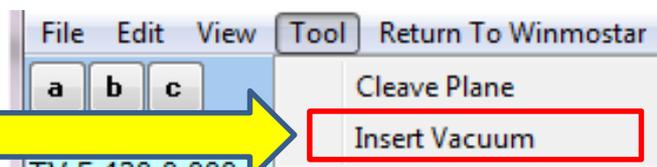
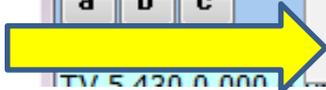
1. 単位格子の作成3

1. Auと入力

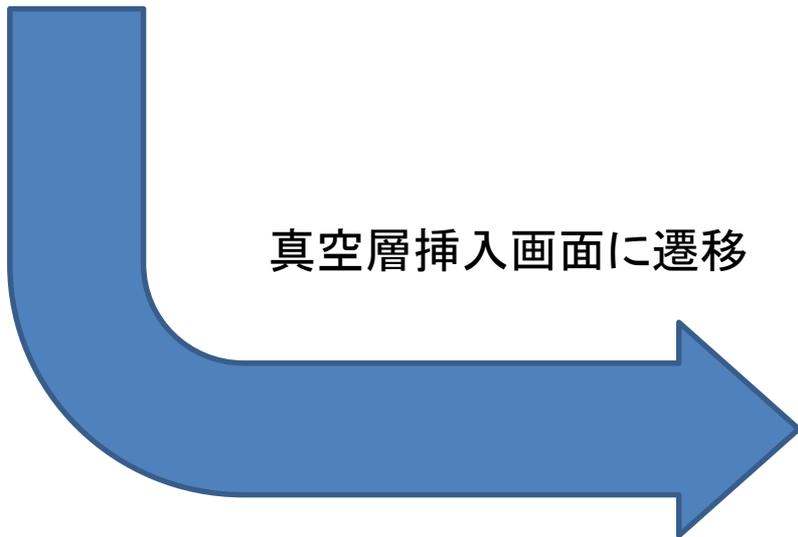


Asymmetric Unit			
Add Remove			
Atom	X	Y	Z
Au	0.000000	0.000000	0.000000

2. クリック



真空層挿入画面に遷移



II. 真空層挿入

Vacuumの項目に25と入力し、真空層の厚さを定義する。

OKを押すと真空層挿入モードは終了し、結晶ビルダ画面に遷移する。

Crystal Builder

View Return To Crystal Builder

a b c

Lattice constant 4.079 4.079 4.079 90.000 90.000 90.000
TV 4.079 0.000 0.000
TV 0.000 4.079 0.000
TV 0.000 0.000 29.079

BS1 BS2 Connect 1.15

Zoom 0.44

Atom 0.25

Bond 10

Insert vacuum

Axis X Y Z

Vacuum [A] 25.000 = Total Width [A] 29.079

Automatically shift to center

Shift 0.500

Reference plane Base Center

OK

<< Back Next >>

Lattice Constants
4.079 4.079 4.079 90.000 90.000 90.000

Translation Vector
4.079 0.000 0.000
0.000 4.079 0.000
0.000 0.000 4.079

Number of Atoms (displayed)
24

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!