

Winmostar™ チュートリアル
結晶ビルダ
(アナターゼ型TiO₂結晶)
V9.0.0

株式会社クロスアビリティ
2019年1月15日

Contents

I. 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)

II. スーパーセルの作成

1. 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

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
Angle [deg]	90.000000	90.000000	90.000000

1. 単位格子の作成3

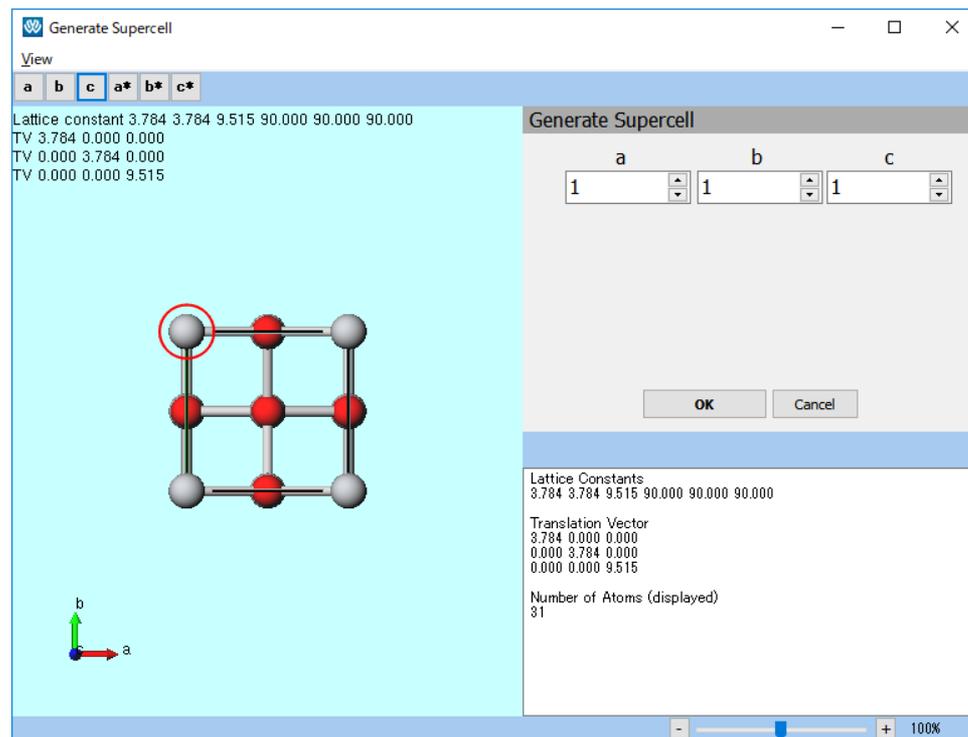
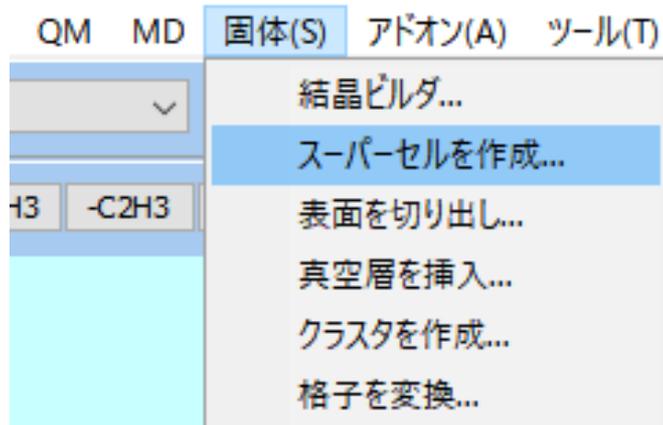
1. [Add]をクリックして原子を追加する。
2. 一番目の行を二回クリックして、元素を**C**から**Ti**に変更する。
3. 同様に二番目の行の元素を**C**から**O**に変更する。
4. 酸素原子の分率座標のZ成分を**0.2081**に変更する。

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。

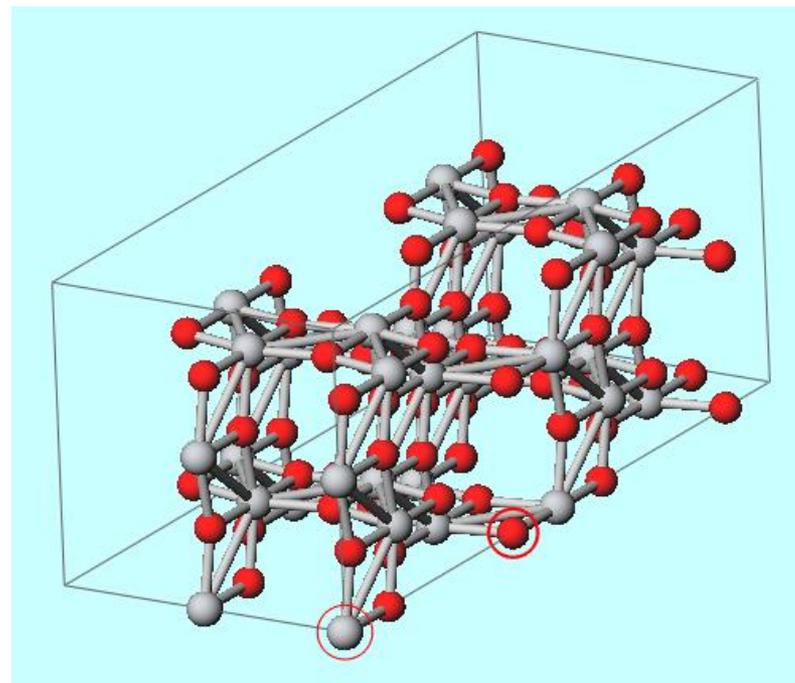
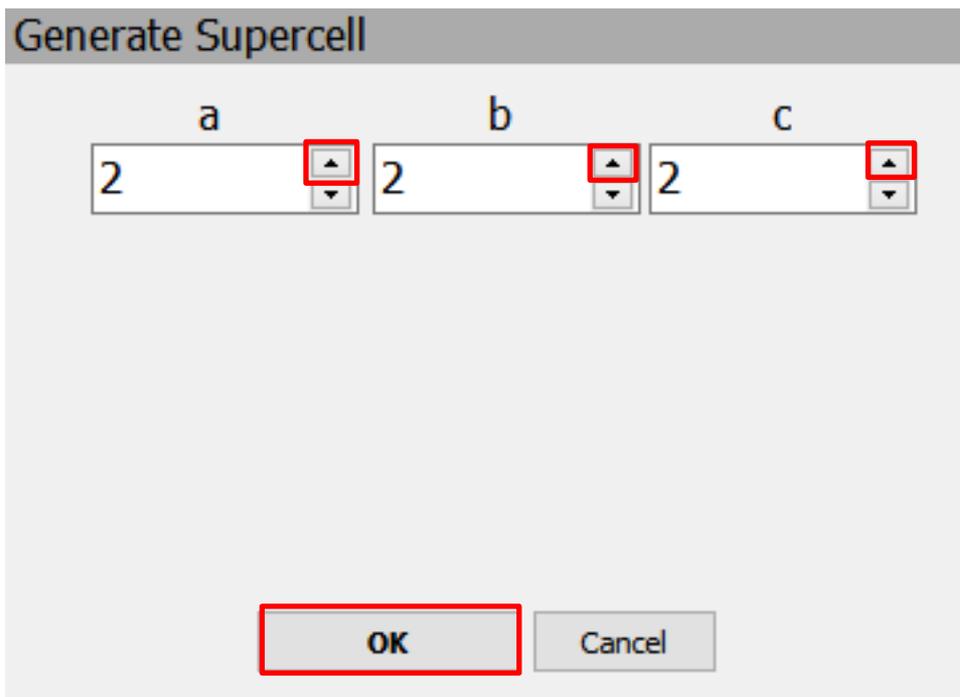
II. スーパーセルの構築1

メニューで[固体] > [スーパーセルを作成...]をクリックする。
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。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友
アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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 · 公開

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_au_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 · 公開