

Winmostar™ チュートリアル

表面切り出し

Fe (1 1 0)面

V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月8日

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

1. 単体格子の作成

1. チュートリアル | **samples**フォルダを開くをクリックする。
2. サンプルフォルダ内の**fe.cif**をメイン画面内にドラッグアンドドロップする。

※このCIFファイルは結晶ビルダを用いて作成することが可能である。
その際は結晶モデリングチュートリアルの手順に従い、以下の情報を元に単体格子を作成する。

Fe単体格子について

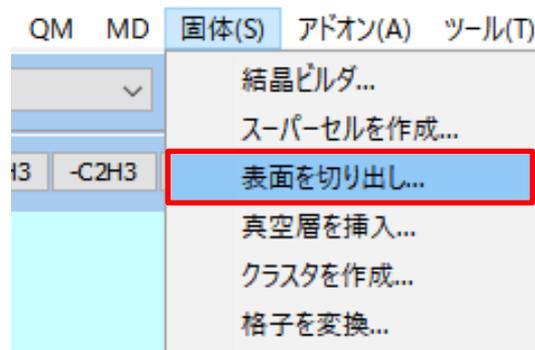
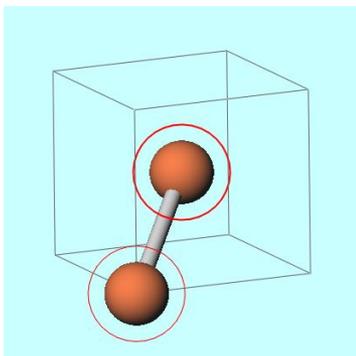
Crystal system: Cubic

Space group : Im-3m (229)

Lattice constants : a=2.8665 Å

Asymmetric unit: Fe (0.0 0.0 0.0)

3. **固体** | **表面切り出し**をクリックする。



II. (1 1 0)面の指定

ミラー指数(1 1 0)を入力し、Next >>をクリックする。

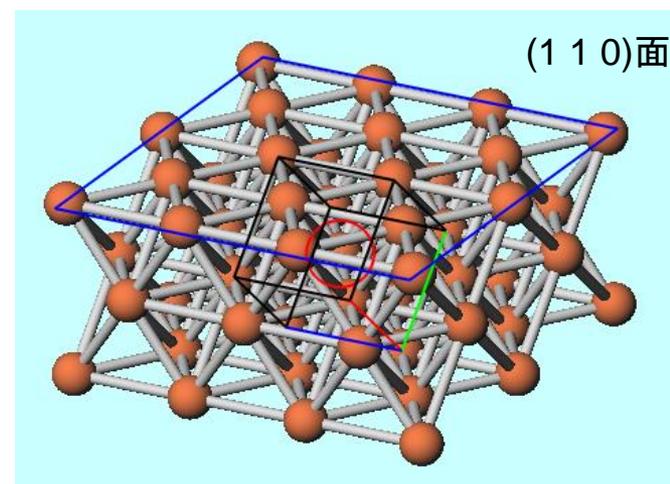
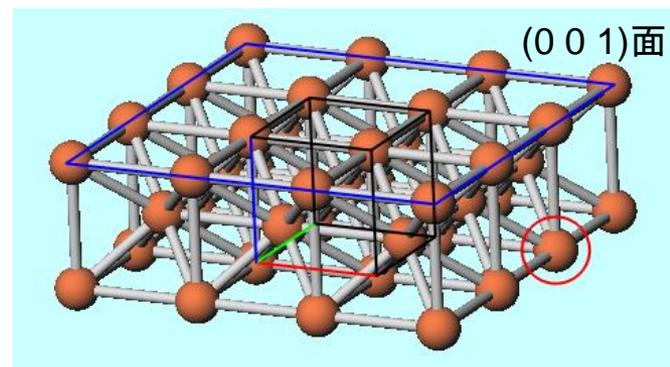
Step 1/2 : Cutting

Cleave Plane (h k l)

Offset:

Cancel

<< Back



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. 可能性のある格子が複数存在する場合は、**Candidates**から候補を選択する。

View Range

Height (-) 1.00 (+) 1.00 Thickness 1.00

Width (-) 1.00 (+) 1.00

Definition of Lattice

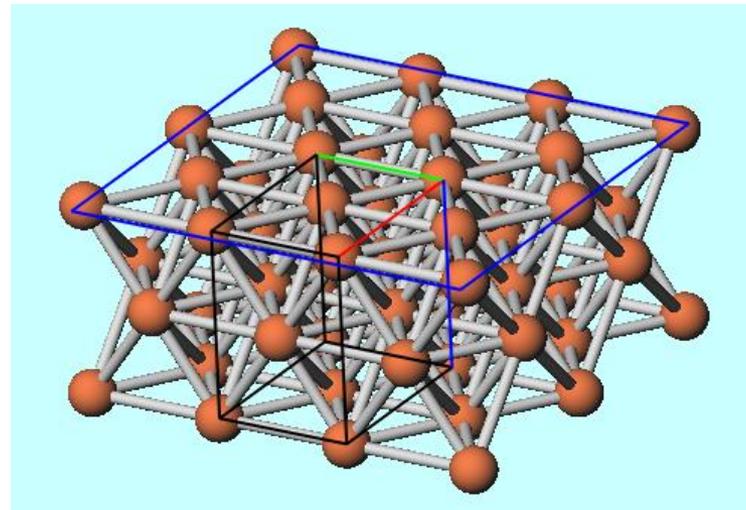
Auto (Ortho) Origin Set a Set b Set c Set

Candidates 4.05 2.87 4.05 90.00 90.00 90.00

Filter a_s 16.7144 b_s 16.7144 c_s 18.354E

α =90 β =90 γ =90

OK Cancel



- *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。**Manual**にするとユーザが格子点を指定できるようになる。

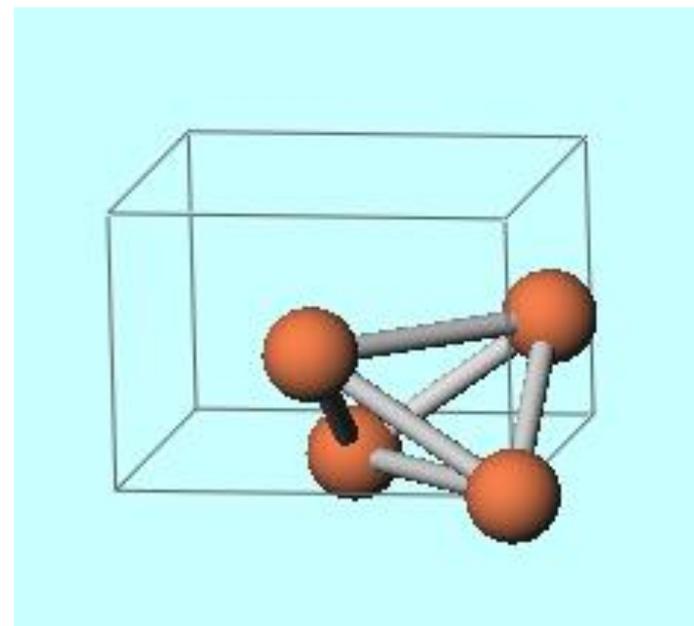
III. 直方格子への変換2

候補を選択後、**OK**をクリックすると変換後の格子をモデリングできる。

Candidates **4.05 2.87 4.05 90.00 90.00 90.00** ▼

Filter a≤ 16.7144 ▼ b≤ 16.7144 ▼ c≤ 18.354E ▼
 α =90 ▼ β =90 ▼ γ =90 ▼

OK Cancel



<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! 138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