

Winmostar™ チュートリアル

真空層挿入機能

(金スラブ)

V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月8日

Contents

- I. 単位格子の作成
- II. 真空層挿入

1. 単位格子の作成

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**au.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位格子を作成する。

Au単位格子について

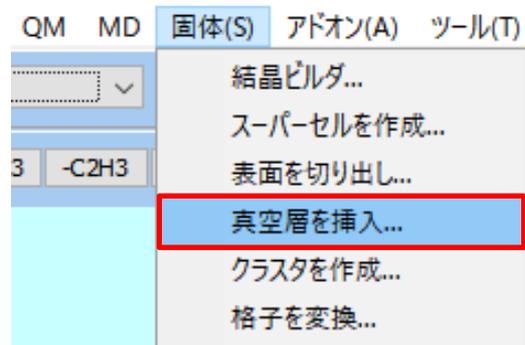
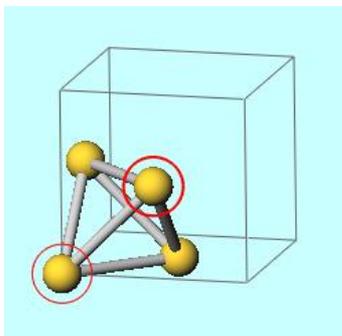
Crystal system: Cubic

Space group : Fm-3m (225)

Lattice constants : a=4.0788 Å

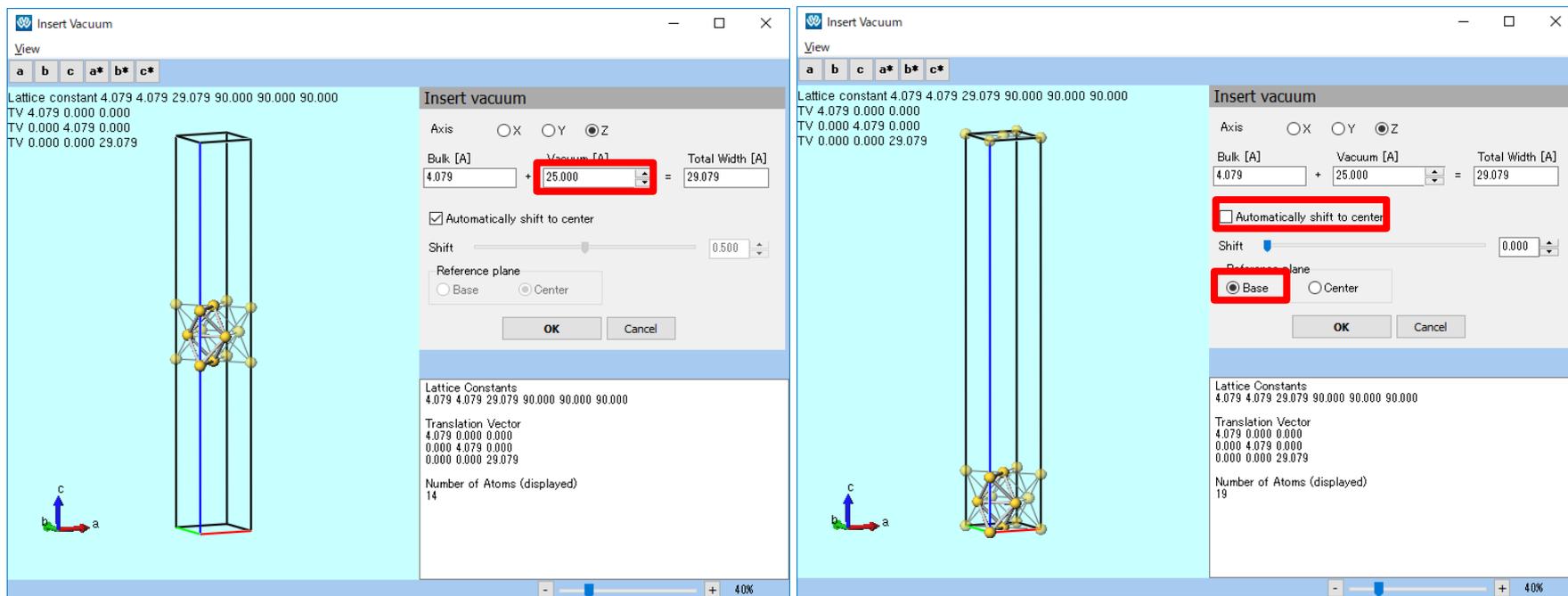
Asymmetric unit: Au (0.0 0.0 0.0)

3. 固体 | **真空層を挿入...**をクリックする。



II. 真空層挿入

1. Vacuumの項目に25と入力し、真空層の厚さを定義する。
2. **Automatically shift to center**をクリックし、Reference planeをBaseに変更するとスラブをセルの端に移動できる。
3. **OK**をクリックすると真空層挿入ウィンドウは終了し、メイン画面に遷移する。



<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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

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