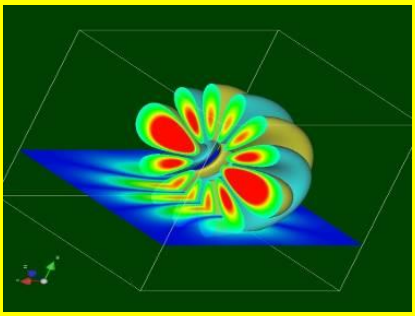
はじめての DV−Xα 法 分子軌道計算支援環境



111Rg の 7i 軌道→

■タブエディタ(秀丸エディタ)上で使う DV−Xα 法計算支援環境利用の手引き■

2024. 03. 25（月）版

Windows-PC (Windows XP, Vista, 7, 8.1, 10, 11) Version

∞ ∞ ∞ 目 次 ∞ ∞ ∞

1．**DV−Xα** 法計算支援環境 …… 2
　インストール方法 …… 4
　使い方 …… 15

2．三次元可視化システム
　VENUS …… 99
　使い方 …… 104

3．教育用分子軌道計算システム
　eduDV …… 126
　インストール方法 …… 129
　使い方 …… 130

4．**MAKEF05SCFS** …… 146

5．**Auto-eduDV** …… 150
　授業での活用例 …… 170

©Copyright 2006-2024 岡山理科大学 教育推進機構 基盤教育センター 無機元素化学研究室 坂根弦太 gsakane@ous.ac.jp

DV−Xα 法計算支援環境

DV−Xα 法計算支援環境は，泉富士夫氏によって開発されました．

DV−Xα 分子軌道計算プログラムはこれまで一般的な **Windows** パソコンで使う場合，コマンドプロンプト画面を起動してキーボード入力によって作業していく **CUI**(**C**haracter **U**ser **I**nterface)をベースとしたシステムとなっており，ユーザは作業ディレクトリを作成したり，ファイルをコピーしたりなど，必要最低限の **MS−DOS** コマンドを修得している必要がありました．

しかし **MS−DOS** の各種コマンド類の名称や使い方(**DIR**, **MD**, **RD**, **CD**, **COPY**, **MOVE**, **RENAME**, **TYPE**, **MORE** など)は，**Windows** が出現する以前，**CP/M−86** や **MS−DOS** を経験している世代にとっては違和感なく馴染み深いものですが，**Windows 95** が出現してから 25 年以上経過した現在，**CUI** に馴染みのない **GUI**(**G**raphical **U**ser **I**nterface)世代にとっては使いにくい環境であり，**DV−Xα 分子軌道計算プログラム**を動かす以前の問題として **MS−DOS コマンドの名称や機能，そして CUI での作業を理解・修得することが比較的大きな障壁となっています**．

また **DV−Xα 分子軌道計算プログラム**は，**SCAT** 本体を実行するバッチプログラム **DVSCAT**，**DVSCAT2** をはじめ，**SCAT** の入力ファイルを準備するプログラム **MAKEF05**，マリケンのポピュレーション解析を行うプログラム **POPANL**，**POPANLS**，**有効電荷(Net Charge)**を求めるプログラム **NETC**，**有効共有結合電荷(Bond Overlap Population)**を求めるプログラム **BNDODR**，**エネルギー準位図(Energy Level Scheme)**を作成するプログラム **LVLSHM** およびその入力ファイルを準備するプログラム **MAKEL04**，**状態密度(Density of States)図**を作成するプログラム **DOS** およびその入力ファイルを準備するプログラム **MAKED04**，**電子遷移スペクトル（X線光電子分光，蛍光X線分光，電子線エネルギー損失分光，逆光電子分光など）**を作図するプログラム **XPS**，**Overlap Population Diagram** を作成するプログラム **LVLBNDS**，**原子基底関数（動径関数）**を作図するプログラム **BASEF**，**LVLSHM** や **DOS** や **XPS** や **BASEF** で作成した **DXY−GL** コマンドで記述された出力ファイルを実際に図として表示するためのプログラム **DVPLOT**，**波動関数の番号**を求めるプログラム **WAVNUM**，**クラスターモデルの原子の構成に関する情報**を表示するプログラム **ATLIST**，**クラスターモデル中の原子間距離**を種類ごとに第５近接距離まで表示するプログラム **BLLIST**，**指定した２原子間の原子間距離**を求めるプログラム **ATOMLEN**，**指定した原子の近接原子**を表示するプログラム **NSCH**，収束の確認に使用する **F36**(Orbital Population)を繰り返し回数ごとではなく原子軌道ごとに並べ替えて出力するプログラム **VLINN**，**結晶のデータからクラスターモデルを作成**する **MAKEUNIT**，**MAKELAT**，**DISPLAT** など，実に数多くのプログラムから構成されており，コマンドプロンプト画面を起動してキーボード入力によって作業していく **CUI** で **DV−Xα 分子軌道計算プログラム**を使いこなすには，**これらのプログラム名および機能を覚える必要があり，初心者にとってはこれら複雑なプログラム名を覚えることが DV−Xα 分子軌道計算プログラムを動かすにあたっての障壁となっています**．

さらに **LVLSHM**: **energy LeVeL ScHeMe**(エネルギー準位スキーム)，**BNDODR**: **BoND OrDeR**(結合次数)，**LVLBNDS**: **LeVeL BoNDS**(Overlap Population Diagram)など**本来の英語のスペルを短縮しているプログラム名はこれから DV−Xα 分子軌道計算プログラムをはじめようという初心者にとってはなかなか覚えにくく，CUI でキーボード入力する際の障壁となっています**．

また，これら数多くのプログラムが読み込む入力するファイル名，出力されるファイル名を把握することも初心者にとっては障壁となっています．**DV−Xα分子軌道計算プログラム**は主に **Fortran 77** で記述されており，大型汎用機時代の装置番号に基づくファイル名が未だにそのまま使われています（拡張子がありません）．最初に用意する原子種（原子番号）と原子位置（座標）のデータが記述されたファイル F01，次に MAKEF05 で作成する SCAT の一般入力ファイル F05，SCAT の出力ファイル F26，eduDV で F01 を作成したときに自動的に準備される対称軌道ファイル F25，Orbital Population が出力される F36，分子軌道のエネルギー準位（各分子軌道のエネルギー固有値）が出力されている F08E，バイナリ形式で SCAT の計算結果が保存されている F09 や F39，POPANL や POPANLS の出力ファイル F08P，NETC の出力ファイル I08，BNDODR の出力ファイル BN8，LVLSHM の入力ファイル L04 および L05，LVLSHM の出力ファイル L07，DOS の入力ファイル D04 および D05，DOS の出力ファイル D07，D07S および DD7，XPS の入力ファイル X04 および X05，XPS の出力ファイル X07，X07S および XX7，LVLBNDS の入力ファイル LB4S および LB5S，LVLBNDS の出力ファイル LB7S，LB7SDT，LB7SKG，LB8S および LB8SKG，BASEF の入力ファイル B05，BASEF の出力ファイル B07，WAVNUM の出力ファイル WAVNUM などなど，拡張子のない単調な入出力ファイルの名称は初心者にとっては覚えにくく，それぞれのプログラムを実行するにあたって何を準備したら良いのか，実行した後にはどのファイルを見れば良いのか，慣れるまでは混乱を来します．

もう一点，Windows という GUI を基本とする OS 上で **DV−Xα分子軌道計算プログラム**を動かすにあたって大きな問題となるのは，前述のように **DV−Xα分子軌道計算**の各種プログラムの入出力ファイルに拡張子がないという事実です．拡張子のない F01，F05，F25，F26，F08E，F36，BN8，I08，F08P，L04，L05，D04 などのファイルはアイコンのダブルクリックによるエディタでの読み込みができず，編集作業するにあたって作業者にストレスを与えます．

泉富士夫氏によって開発された**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**は，前述の数々の障壁を見事に取り除くことに成功しています．**Windows** 上で **DV−Xα分子軌道計算プログラム**を使うにあたって，ユーザはコマンドプロンプト画面を起動する必要も **MS−DOS** コマンドを使う必要もありません．タブエディタ（秀丸エディタ）を起動するだけで計算作業を開始できます．

タブエディタ（秀丸エディタ）の画面にはボタン（ツールバー，ファンクションキー），プルダウンメニュー，ポップアップメニュー（ユーザーメニュー），ショートカットキーという形で **DV−Xα分子軌道計算プログラム**に関する一般的なプログラム類が予めほぼ全て登録されています．ユーザは予め登録・配置されているプログラムを順番に選択・実行（クリック）していくだけで **DV−Xα分子軌道計算プログラム**のほぼ全ての機能を使いこなすことができます．

それぞれのプログラムを起動するにあたって必要な入力ファイルを作成したり，あるいはひな形を準備したりする機能も用意されています．本支援環境は元々が“エディタ”上に構築されていますので，入力ファイルの編集作業はそのままその画面で行って上書き保存することができます．拡張子のない名称の入力ファイルも本支援環境では問題なく新しいタブで自動的に open されます．プログラムを起動した後はユーザが見るべきファイルが自動的に open されます．拡張子のない名称の出力ファイルも自動的にユーザが見るべきファイルを新たなタブで open してくれます．なお，編集作業をする必要のない出力ファイルは保護モード(Read Only)で open されます．

ＤＶ−Ｘα法計算支援環境からは，以下のプログラム・システム類を起動することもできます．

１．結晶のデータからクラスターモデルを作る **DISPLAT** プログラム群
２．構造ファイル変換ユーティリティ **Open Babel** 用 GUI（**Open Babel GUI**）**Ver. 3.1.1**
３．結晶構造，及び電子・核密度等の三次元統合可視化システム **VESTA Ver. 3.5.8**
４．教育用分子軌道計算システム **eduDV**（2021 年 2 月 26 日版）

DV−Xα 分子軌道計算およびそのユーティリティプログラムの使い方，
入力ファイルの修正方法，出力ファイルの見方については市販の書籍：

足立 裕彦，小笠原 一禎，小和田 善之，坂根 弦太，水野 正隆 共著
「新版 はじめての電子状態計算― DV−Xα 分子軌道計算への入門」
三共出版(株), ISBN 978−4−7827−0767−8 C3043，本体 3,000 円＋税
1998 年 5 月 10 日 初版第 1 刷発行
2017 年 11 月 10 日 新版第 1 刷発行
を見れば丁寧に説明が書いてあります．

秀丸エディタ

なお本支援環境で使われているタブエディタ「秀丸エディタ」
https://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html はシェアウェアですので，これだけは別途ご入手後，**https://hide.maruo.co.jp/swreg/index.html** の指示に従いご送金いただく必要があります．ただし学校の学生実習用パソコンなどで学生の方が使われる場合，あるいは経済的余裕のない学生の方が学生時代に使われる場合は送金を免除される制度があります．
https://hide.maruo.co.jp/support/hidemarufree.html

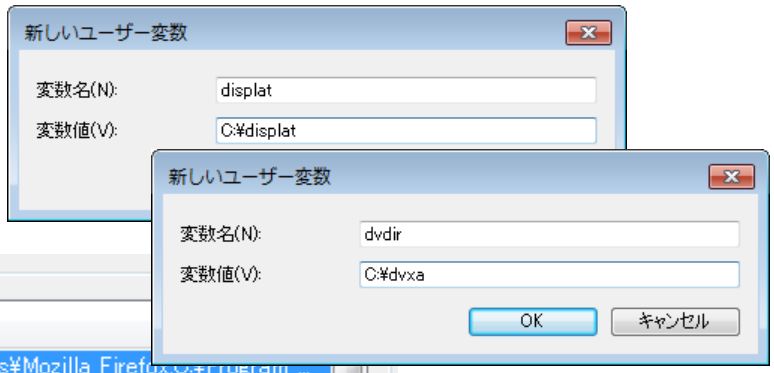
◎ＤＶ−Ｘα法計算支援環境 のインストール方法（32 bit, 64 bit Windows OS 版）

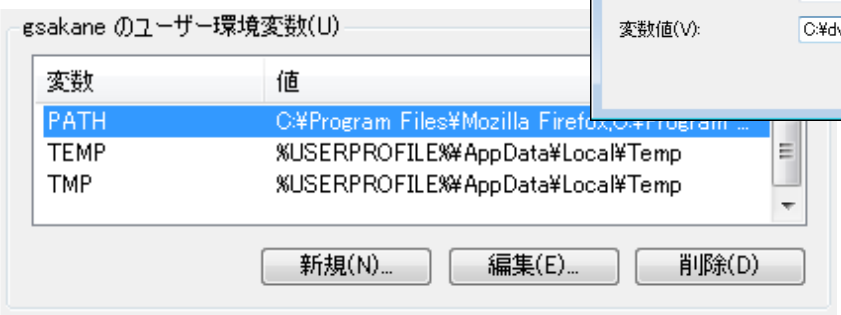
以下の URL よりすべて入手先にリンクが張ってありますのでご利用下さい．
https://www.dvxa.org/hme/assistance_environment.html

１．Windows のコントロールパネルのシステムとセキュリティ → システム → システムの詳細設定（マイコンピューター（システム）のプロパティの詳細決定）→ 環境変数(N)…で，ユーザー環境変数(U)で（あるいはシステム環境変数(S)で）新規に，

変数	値	
dvdir	**C:¥dvxa**	(**DVXA** フォルダの絶対パス)
displat	**C:¥displat**	(**DISPLAT** フォルダの絶対パス)

を設定して下さい．**dvdir** で設定したフォルダ内（上記例では **C:¥dvxa¥calc**）で DV−Xα 法による電子状態計算を行っていきますので，**dvdir** で設定するハードディスクドライブ（上記例では **C ドライブ**）には **2〜3 GB 以上の空き容量**があることが理想的です．
環境変数の設定終了後は必要に応じてパソコン(OS)を再起動すると良いでしょう．





以下，上記 **dvdir** の設定例(**C:¥DVXA**)で話を進めます．

2．「新版 はじめての電子状態計算—DV−*Xα* 分子軌道計算への入門」の下記サポートサイト
https://www.sankyoshuppan.co.jp/products/detail.php?product_id=650
のダウンロード・ページ **https://www.dvxa.org/dvscat_download**

新刊　献本

新版 はじめての電子状態計算

DV-Xα分子軌道計算への入門

978-4-7827-0767-8 C3043

兵庫教育大学教授　小和田善之
京都大学名誉教授　足立裕彦・関西学院大学教授　小笠原一禎
岡山理科大学准教授　坂根弦太・大阪大学准教授　水野正隆 共著

プログラムダウンロード

内容見本

B5・並製・285頁・11月10日刊行　Windows(GUI版) Mac(CUI版) Linux(CUI版)対応／定価 3,240円（本体3,000円）

1998年に刊行した「はじめての電子状態計算」は,わかりやすい丁寧な解説とCD-ROM付でDV-Xαプログラムがパソコン上で簡単にできるということで好評を博してきたが,今回進化する量子化学に合わせて本文を全面的に改訂し,プログラムもリニューアルした。さらにプログラムは本書記載のアカウントよりダウンロードできるようになり,より使いやすくなっている。

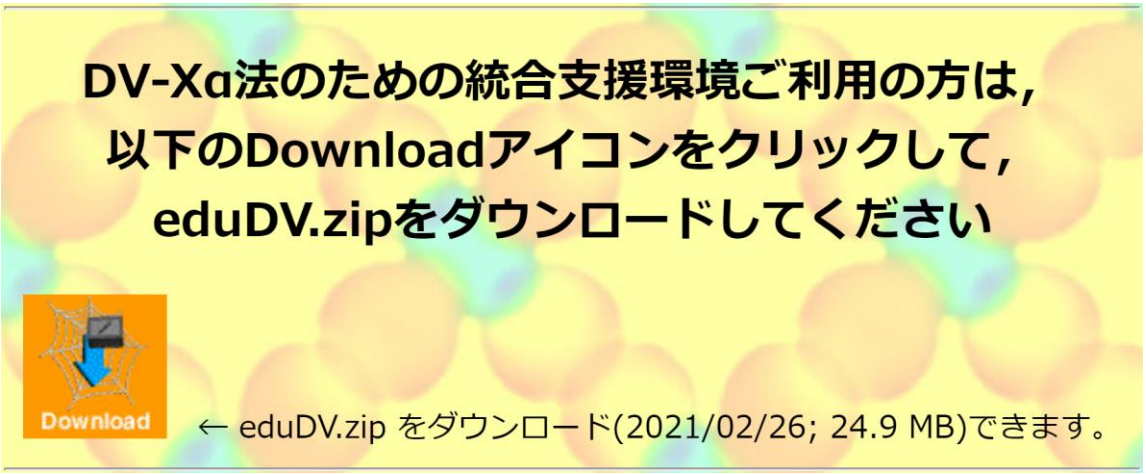
より，　**dvxa_v205.zip**　**（64 bit Windows PC 版）(2020.05.15; 143.7 MB)**

または　**dvxa32_v204.zip**　**（32 bit Windows PC 版）(2018.05.15; 121.4 MB)**

および　**displat_full.zip**　**(2007.07.07; 804 KB)**

をダウンロードして下さい．**dvxa_v205.zip** または **dvxa32_v204.zip** を解凍し，**dvxa フォルダ**をそのまま **C:¥**ドライブの直下にコピー(移動)して下さい．
同様に **displat_full.zip** を解凍し(1.90 MB になります)，**displat フォルダ**をそのまま **C:¥**ドライブの直下にコピー(移動)して下さい．

3．追加プログラム集(**eduDV**)をインターネット・坂根のウェブサイト，以下の
教育用分子軌道計算システム eduDV のウェブサイト
https://www.dvxa.org/hme/fun/index.html#edudv



から，**eduDV.zip**（2021/02/26; 24.9 MB）をダウンロード・保存し，解凍します．**eduDV** フォルダ内の全フォルダ・ファイルを，**C:¥DVXA** の直下にコピーして下さい．

4．秀丸エディタのウェブサイト **http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html**
より，秀丸エディタ最新版 Ver. X.YY　※X, YY：開発が進むにつれ数字が増えていきます
をダウンロード・保存し，ダブルクリックしてインストールします．
西暦 2024 年（令和 6 年）3 月 25 日（月）現在，X ＝ 9, YY ＝ 30 です．

秀丸エディタ

対応 Windows ※1	XP	Vista	7	8	8.1	10 ※2	11

通常の最新版はこちら				
DOWNLOAD hm930_signed.exe (日本語/英語共通版)	32bit	Ver9.30	6.97MB	2024/02/08

新しいデジタル署名での注意：
V9.30からデジタル署名を新しくしています。その影響で、一般的にダウンロードされていると判断されるまでは、警告が出やすくなる場合があります。ウィルス対策ソフトによって判断が違う場合があります。

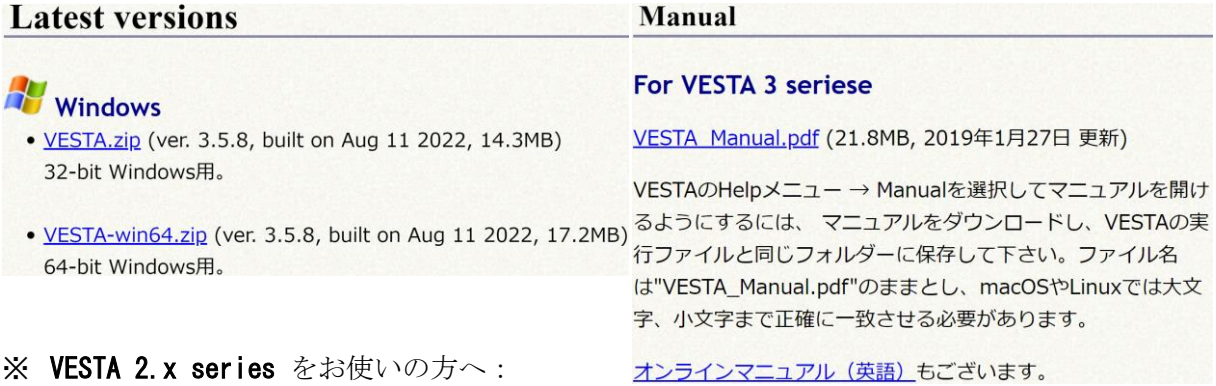
64bit版はこちら				
DOWNLOAD hm930_x64_signed.exe (日本語/英語共通版)	64bit	Ver9.30	7.39MB	2024/02/08

注意：
64bit版のWindows上では32bit版の秀丸エディタも特に問題無く動作します。なので、Windowsが64bit版であっても普通は32bit版の秀丸エディタのご利用をお勧めします。詳細

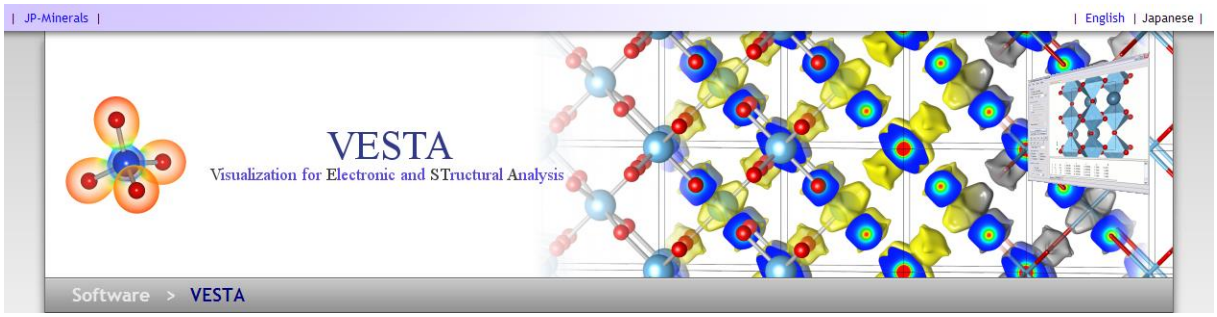
32 bit Windows の場合は，「通常の最新版」をインストールして下さい．
64 bit Windows の場合は，「64 bit 版」をインストールして下さい．

32 bit Windows に 32 bit 版秀丸エディタ（通常の最新版）をインストールしたときも，64 bit Windows に 64 bit 版秀丸エディタをインストールしたときも，インストール先フォルダは C:¥Program Files¥Hidemaru となります．秀丸エディタはシェアウェアですので，まず試用して問題がないことを確認後，**https://hide.maruo.co.jp/swreg/**
よりライセンス料をお支払い下さい．秀丸エディタは比較的頻繁に最新版がアップデートされますが，その際のバージョンアップ料は無料です．なお，金銭的に難儀している学生の方には在学中のみ秀丸エディタを無料で使わせていただける制度があります．

5．門馬綱一氏のウェブサイト *JP-Minerals* **https://jp-minerals.org/jp/**
で VESTA の最新の Windows 版　VESTA Version 3.5.8 をダウンロード入手して下さい．



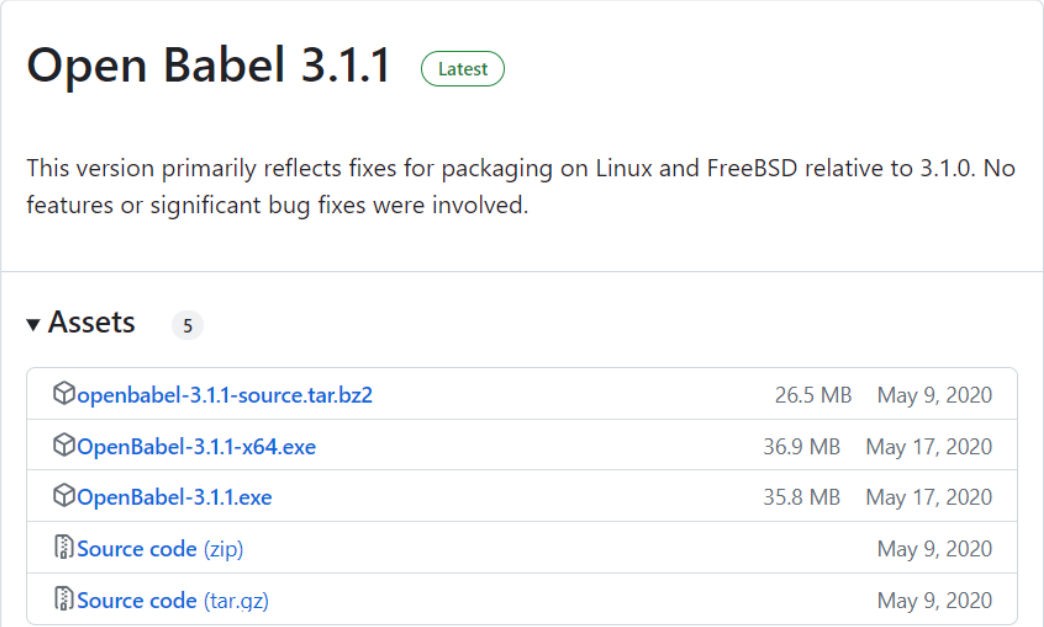
※ VESTA 2.x series をお使いの方へ：
本 PDF 文書では VESTA 3 series に準拠しており
ますので，3 series の使用をお勧めします.



Windows 版 VESTA は解凍後，C:¥Program Files に置いて下さい(C:¥Program Files¥VESTA).
Documentation タグの Manual より VESTA_Manual.pdf(21.8 MB, 2019/01/27 更新)を
ダウンロードし，これも C:¥Program Files¥VESTA の中に置いて下さい．64-bit Windows 用
VESTA の場合は，フォルダ名を VESTA-win64 から VESTA に変更して下さい.

6．構造ファイル変換ユーティリティ Open Babel Version 3.1.1

https://github.com/openbabel/openbabel/releases より，Open Babel 用 GUI(**Open Babel GUI**)
64-bit WindowsPC の場合：**OpenBabel-3.1.1-x64.exe (36.9 MB)**
32-bit WindowsPC の場合：**OpenBabel-3.1.1.exe (35.8 MB)** をダウンロードして下さい.



インストールの際は必ず，C:¥Program Files¥OpenBabel フォルダにインストールして下さい
（デフォルトのフォルダ名から上記のように必ず“OpenBabel”に変更して下さい）.

7．泉 富士夫 先生のウェブサイト

「泉 富士夫の粉末回折情報館」

3D Visualization System VENUS ページ

11. Archive files

It should be pointed out that **the latest versions of RIETAN, VESTA, PRIMA, ALBA, Alchemy, and the assistance environment for the DV-Xα method should always be used on the combined use of them**; compatibility with older versions is never considered in RIETAN and VENUS. You may encounter unforeseen trouble on the mixed use of new and old versions.

As described in Section 2,

- the next-generation 3D visualization system, VESTA, for Windows, Mac OS X, and Linux

is now available for download from JP-Mineral.

11.1 Windows version

11.1.1 VENUS system

PRIMA and ALBA for Windows are included in Windows_versions.zip distributed at another Web page named "Distribution Files for the RIETAN-VENUS Package."

As described above, VESTA for Windows is distributed at JP-Mineral.; its use is highly recommended at present.

11.1.2 The assistance environment for the DV-Xα method

The assistance environment for the DV-Xα method is distributed as an archive file with the zip format. To download it, position the pointer over the following file name:

- The assistance environment for the DV-Xα method: **DV-Xa.zip** (2020/12/18; 3 MB)

Then, right-click the link (file name) to display a pop-up menu and choose "Save Target As..." or a corresponding item (depending on your browser). Drag and drop the downloaded file, DV-Xa.zip, onto the icon of an archiver. After decompressing DV-Xa.zip, read Readme_DV.pdf at first.

11.2 Mac OS X version

PRIMA and ALBA for Mac OS X are included in Intel_Mac_versions.dmg distributed at another Web page named "Distribution Files for the RIETAN-VENUS Package."

VESTA for Mac OS X is distributed at JP-Mineral.

ここの **11.1.2 The assistance environment for the DV−Xα method**

11.1.2 The assistance environment for the DV-Xα method

The assistance environment for the DV-Xα method is distributed as an archive file with the zip format. To download it, position the pointer over the following file name:

- The assistance environment for the DV-Xα method: **DV-Xa.zip** (2020/12/18; 3 MB)

Then, right-click the link (file name) to display a pop-up menu and choose "Save Target As..." or a corresponding item (depending on your browser). Drag and drop the downloaded file, DV-Xa.zip, onto the icon of an archiver. After decompressing DV-Xa.zip, read Readme_DV.pdf at first.

https://www.dvxa.org/hme/dvxa_assistance_environment_7.html

よりアーカイブファイル **DV-Xa.zip(2020/12/18; 3 MB)**をダウンロードして下さい.

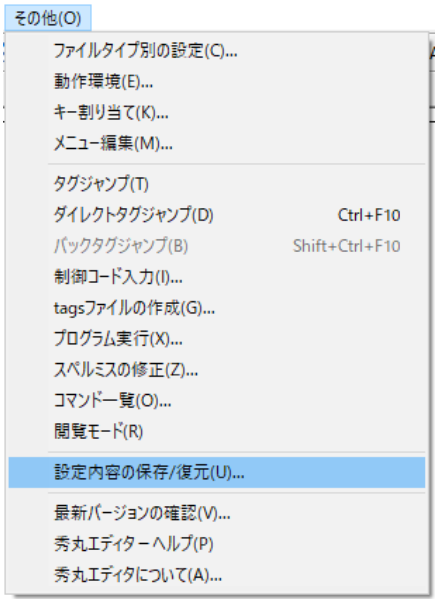
泉富士夫先生ご逝去に伴い「泉富士夫先生のWebサイト粉末回折情報館」が閉鎖されたため、「DV-Xa.zip」のメンテナンスは坂根弦太が引き継ぎました。問題がある場合には坂根弦太(gsakane@ous.ac.jp)までご連絡をお願いいたします。

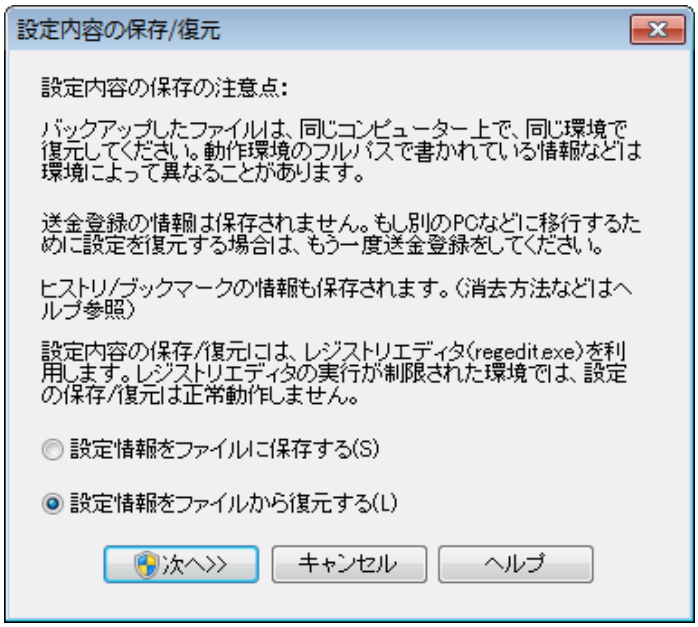
DV-Xa.zip を解凍し(4.14 MB になります)，**Macros フォルダ**，**Rest フォルダ**，**Readme_DV.pdf** をそのまま，**C:¥DVXA** の直下にコピー(移動)して下さい（**C:¥DVXA¥Macros**，**C:¥DVXA¥Rest**，**C:¥DVXA¥Readme_DV.pdf**）．

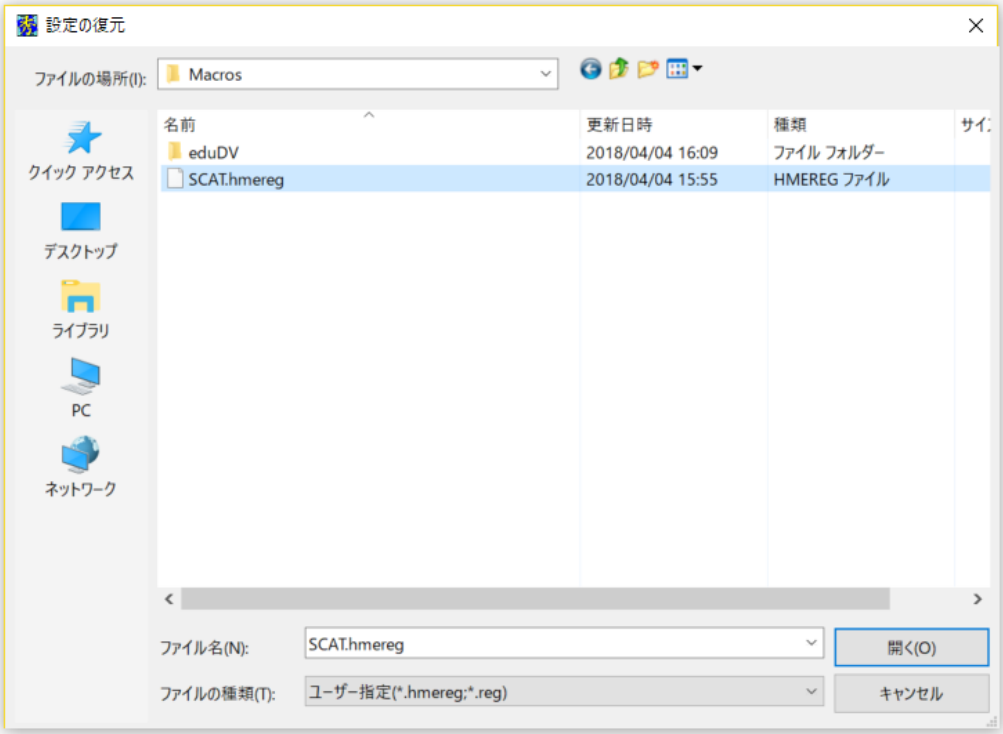
8．**C:¥DVXA¥Readme_DV.pdf** を読みながら環境構築を行っていきます．具体的な作業手順は以下の通り．

9．**C:¥DVXA¥Rest¥DengakuDLL.dll** を **C:¥Program Files¥Hidemaru** フォルダ内に移すかコピーします．

10．その他→設定内容の保存/復元で，"設定情報をファイルから復元する"を選び，**C:¥DVXA¥Macros¥SCAT.hmereg** を読み込みます．さらに次頁の作業を行ってください．







秀丸エディタ Ver. 9.00 以降で必要な作業を以下に示します（秀丸エディタ Ver. 8.99.4 以前の場合は，この作業は不要です）．

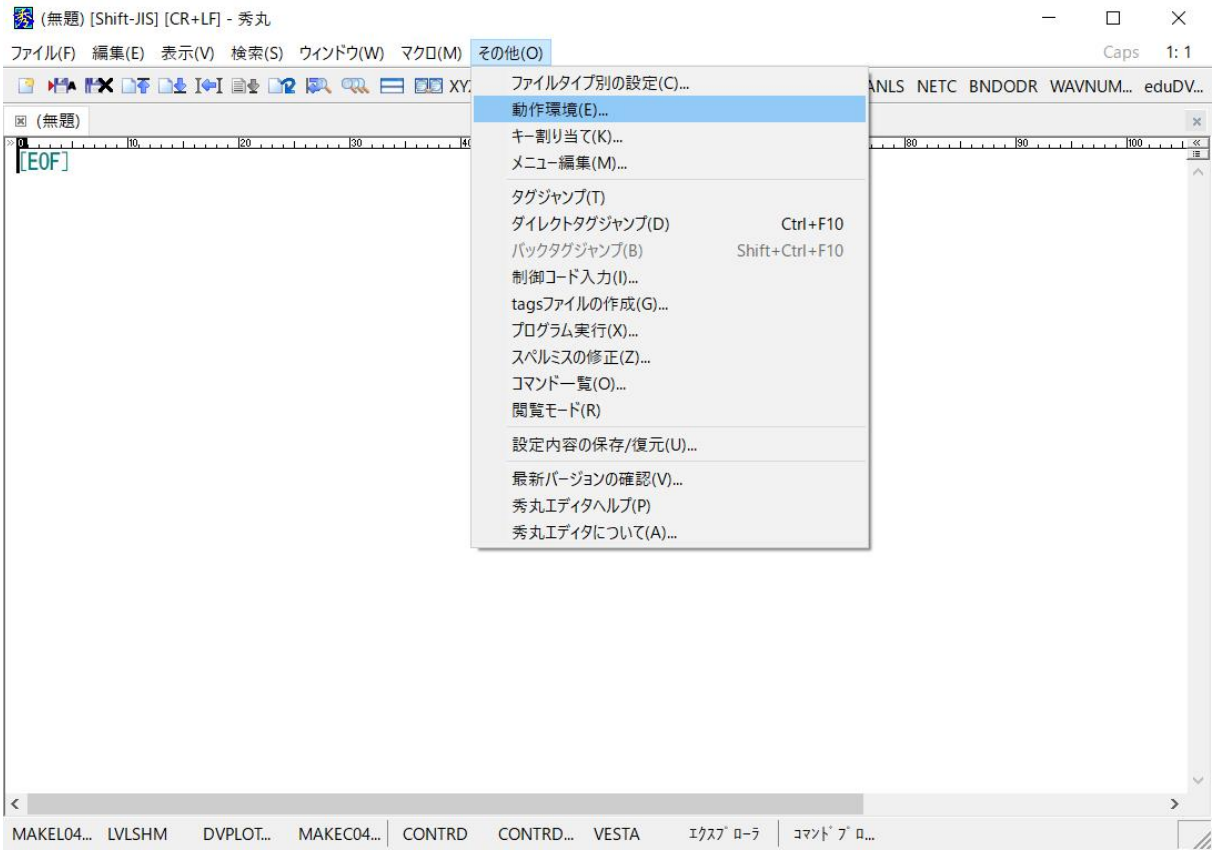
秀丸エディタでは，動作環境（トラブル対策）の設定で，「カレントフォルダ移動」は「自動」，「移動する」，「移動しない」の 3 種類のモードがあります．

秀丸エディタ Ver. 8.99.4 以前では「自動」の場合，状況に応じてモードが切り替わっていましたが，秀丸エディタ Ver. 9.00 以降では「自動」の場合「移動しない」と同じ動作をするようになりました．

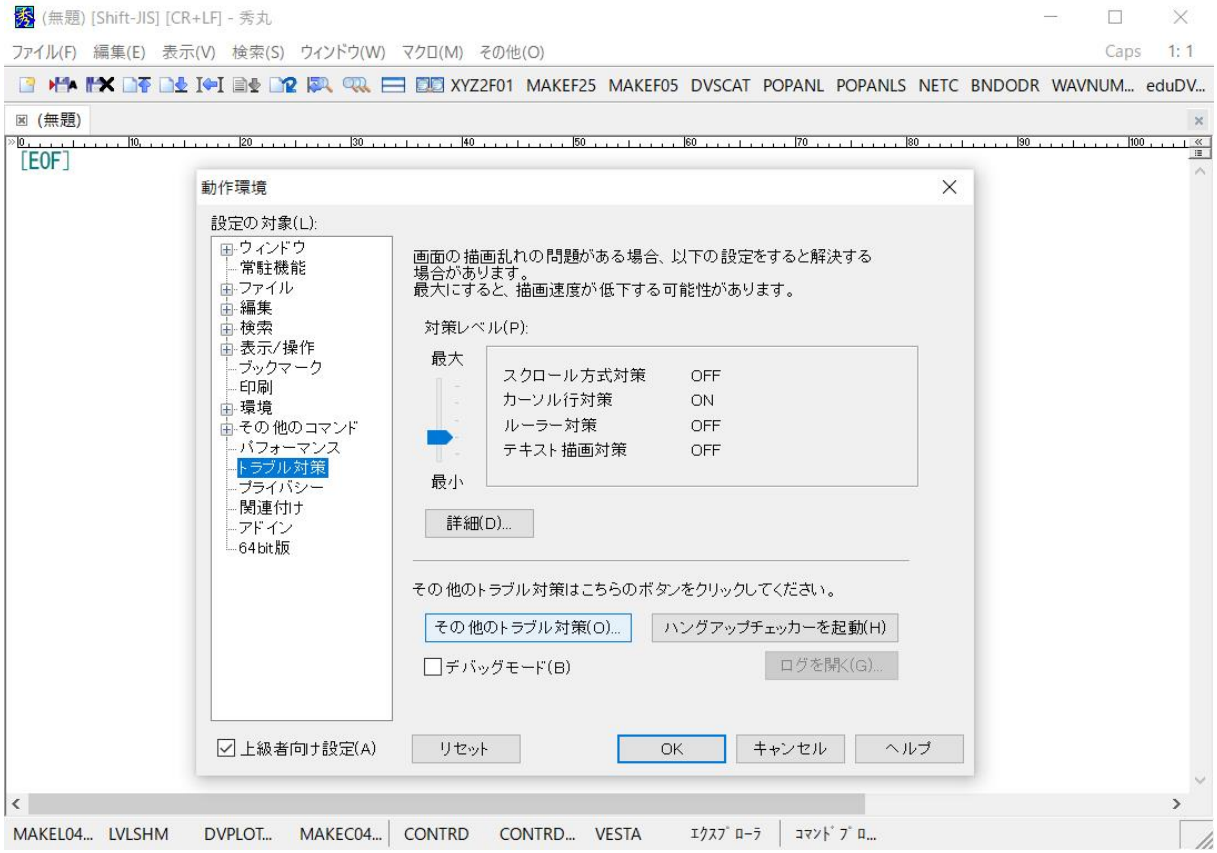
「DV-Xα 法のための統合支援環境」では，秀丸エディタの設定内容は，C:¥dvxa¥Macros¥SCAT.hmereg に書いてあり，「カレントフォルダ移動」は「自動」になっています．

例えば「DV-Xα法のための統合支援環境」で「eduDV」を使う際，秀丸エディタが Ver. 9.00 以降の場合，「カレントフォルダ移動」が「移動しない」と同じ動作をすることが原因で，動作がうまくいかないことがあります．その場合，秀丸エディタで以下の操作を行っていただくことにより，正常に動作するようになります．

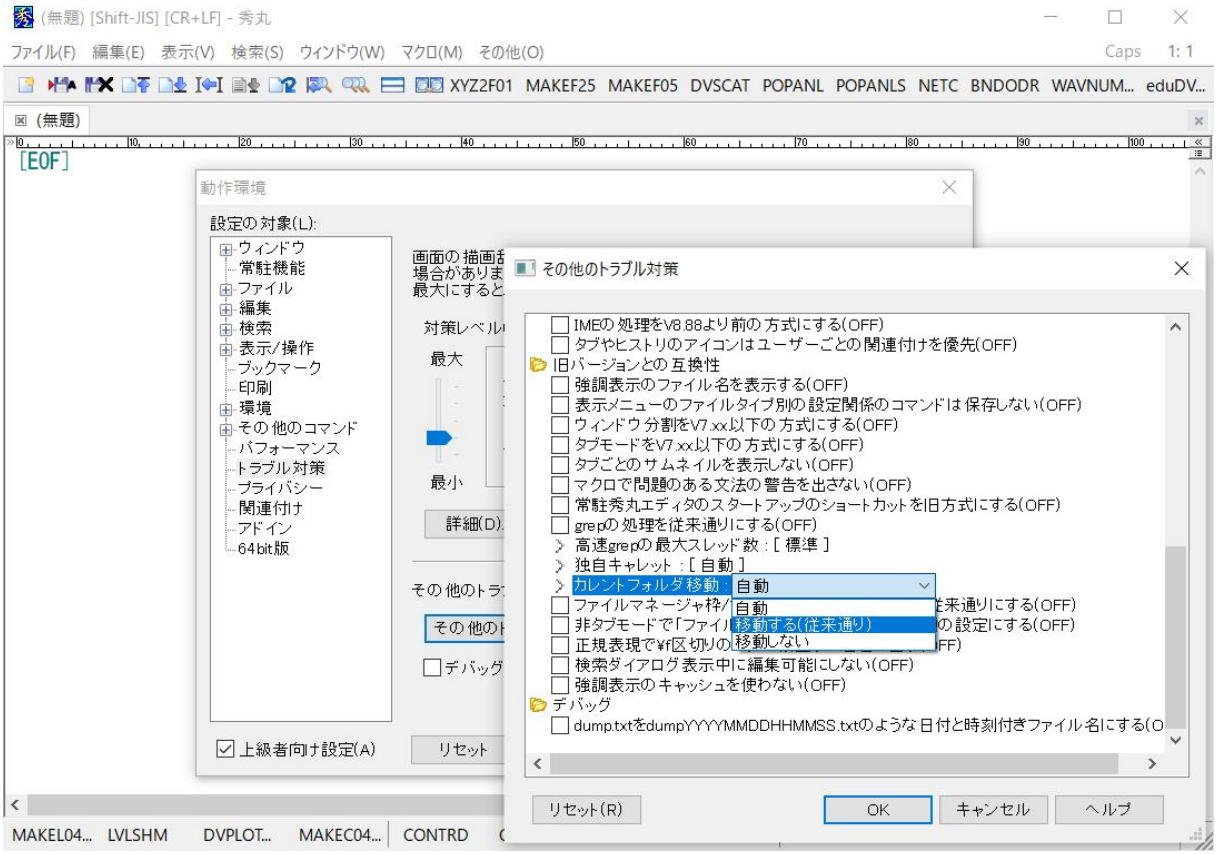
1. 【その他(O)】－【動作環境(E)...】をクリック



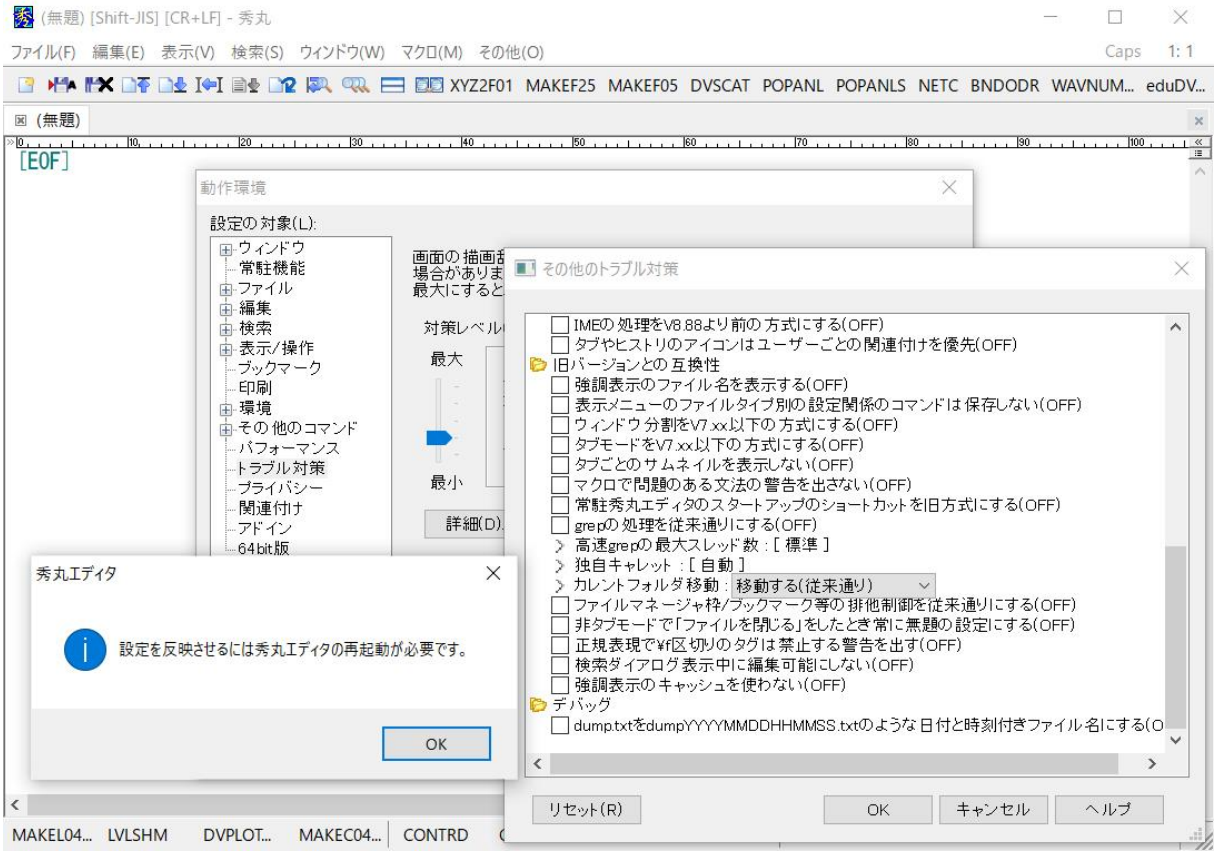
2. 【トラブル対策】－《その他のトラブル対策(0)... 》を開く



3. 【カレントフォルダ移動】－《移動する(従来通り)》に設定する



4. 秀丸エディタを再起動する



秀丸エディタ Ver. 9.00 以降の場合に必要なこの作業については，以下の URL に説明の文書（pdf）を置いてあります．

◎岡山理科大学 坂根弦太

https://www.dvxa.org/hme/hme900.pdf

◎DV-Xα研究協会ホームページ

DV-Xα法 Frequently Asked Questions（よくいただくご質問への回答）

https://www.dvxa.org/dvxa_FAQ.html

ご不明な点は，坂根までお問い合わせください．

700-0005 岡山県 岡山市 北区 理大町１－１
岡山理科大学Ａ１号館 教育推進機構 基盤教育センター

基盤教育センター センター長

教授 博士(理学) 坂 根 弦 太 (SAKANE, Genta)

A1 号館 3 階 318 号室
e-mail gsakane@ous.ac.jp
【基盤教育センター】http://www.iae.ous.ac.jp/fe-center/
【DV-Xα研究協会】https://www.dvxa.org/

DV−*Xα* 法の特長（例）
- 周期表全元素対応
- 入力は原子座標と原子番号のみ
- 内殻も含め全電子を計算
- 計算が高速（パソコンで可）
- 基底関数が本物の原子軌道
- ハイレベルな第一原理計算

DV−*Xα* 法の特長（例）
- 最適化された原子軌道（数値関数）が基底関数になっているので，計算結果の解釈が直感的
- シュレディンガー方程式の正しい解を基底関数に用いているので，単原子の計算を行い，計算に用いている原子軌道関数を VESTA で三次元可視化すれば，それだけで優れた量子化学教材となる
- **DV−*Xα* 法**本体プログラムは無償で入手・使用可

参考情報：DV-Xα Version 1.04 について（現在の最新版は Ver. 2.05）

「はじめての電子状態計算—DV−*Xα* 分子軌道計算への入門」添付 CD−ROM の環境は Watcom Fortran Ver. 10.5 でビルドされており Windows95, 98, 2000, XP では正常に動作しますが 7 や 8 では動作しない可能性があります．

しかし前述の「はじめての電子状態計算—DV−*Xα* 分子軌道計算への入門」のサポートサイトで 2007 年 7 月 7 日(土)に公開，その後 9 月 4 日(火)に改訂された **dvxa_v1_04.zip (2007/09/04; 17.9 MB)** は Open Watcom Fortran Ver. 1.6 でビルドされており，Windows Vista, 7, 8 でも正常に動作します．Open Watcom Fortran の最新 Ver. は 1.9 です．教育用分子軌道計算システム（時間が限られた講義・実習で **DV−*Xα* プログラム**を利用する際に便利なプログラム集）**eduDV** は Open Watcom Fortran Ver. 1.9 でビルドされています．

Version 1.04 の **DV−*Xα* プログラム**は水野正隆先生により以下のような改良がなされています．

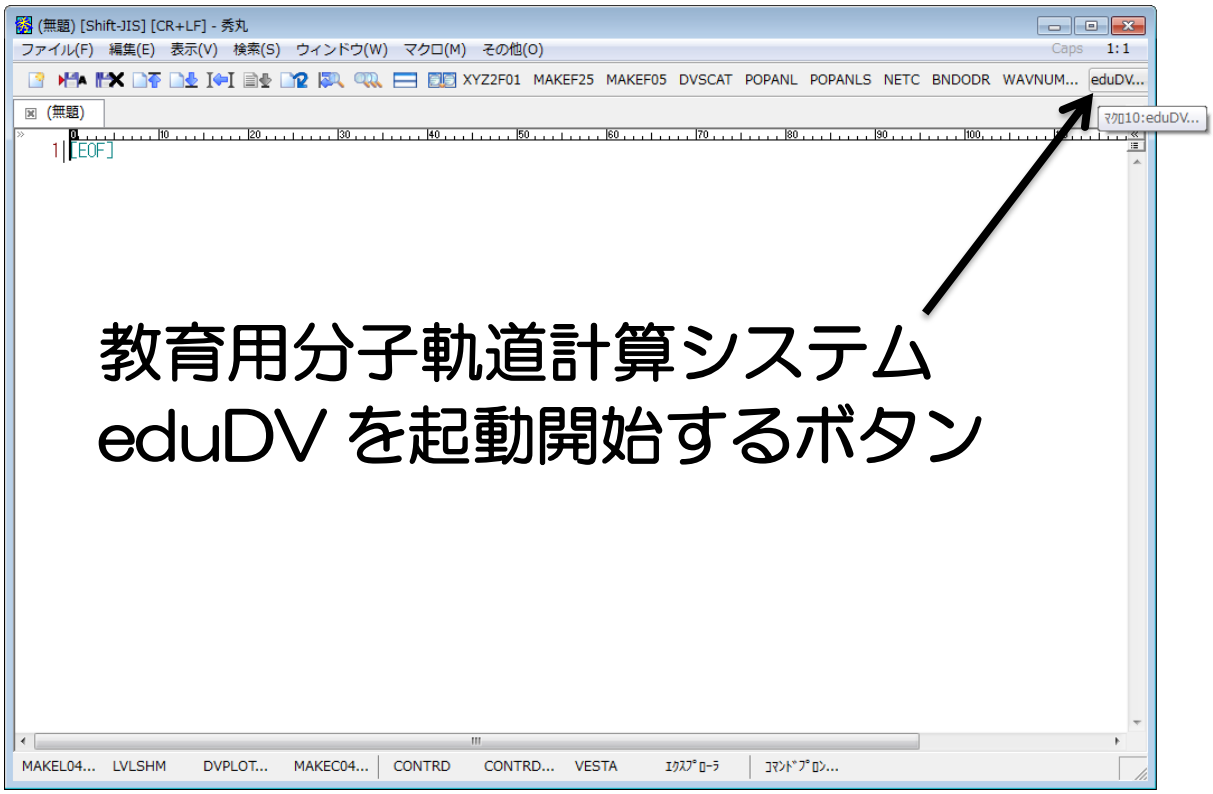
- 原子種数(NEQ)で 999 種類まで計算可能となりました．計算動作はもとより，999 原子種まで各種プログラムの出力ファイルでも，文字化けせずに表示してくれます．
- **SCAT** は 10 サイクルを単位として繰り返しセルフコンシステント（自己無撞着（じこむどうちゃく），自己矛盾のない，つじつまの合う）になるまで計算が行われますが，その 10 サイクルを実行中，本当に **SCAT** 計算が回っているのか，回っているとしても順調に収束に向かって回っているのか，ということがユーザとしては不安になるので，コマンドプロンプト画面で 1 サイクル終了ごとに「今回の電子の移動量, 現在の Mixing Parameter」を表示してくれる設計になっています．
- Ｉクラス，Ｊクラスの上に，Ｘクラス，Ｙクラスが新設されました．ＩＪクラスでもまだ足りないという巨大モデルの計算の時に使うことができます．

・MAKEF05 実行時にモデルのサイズ（必要なディメンジョンサイズ）を自動判定し，以降のプログラムではクラスサイズを指定しなくても自動的に最適なサイズが選択されて実行されます（もちろん従来通り，人間の意志でクラスサイズを指定しても構いません）．ユーザはクラスを意識する必要がなくなりました．クラスの名称も覚えなくて良いのです．このクラスの自動設定という水野先生のアイデアは，ユーザにとってはクラス指定という面倒な行程をしなくてもすむ実に画期的な改良（改善）だと私（坂根）は思っております．

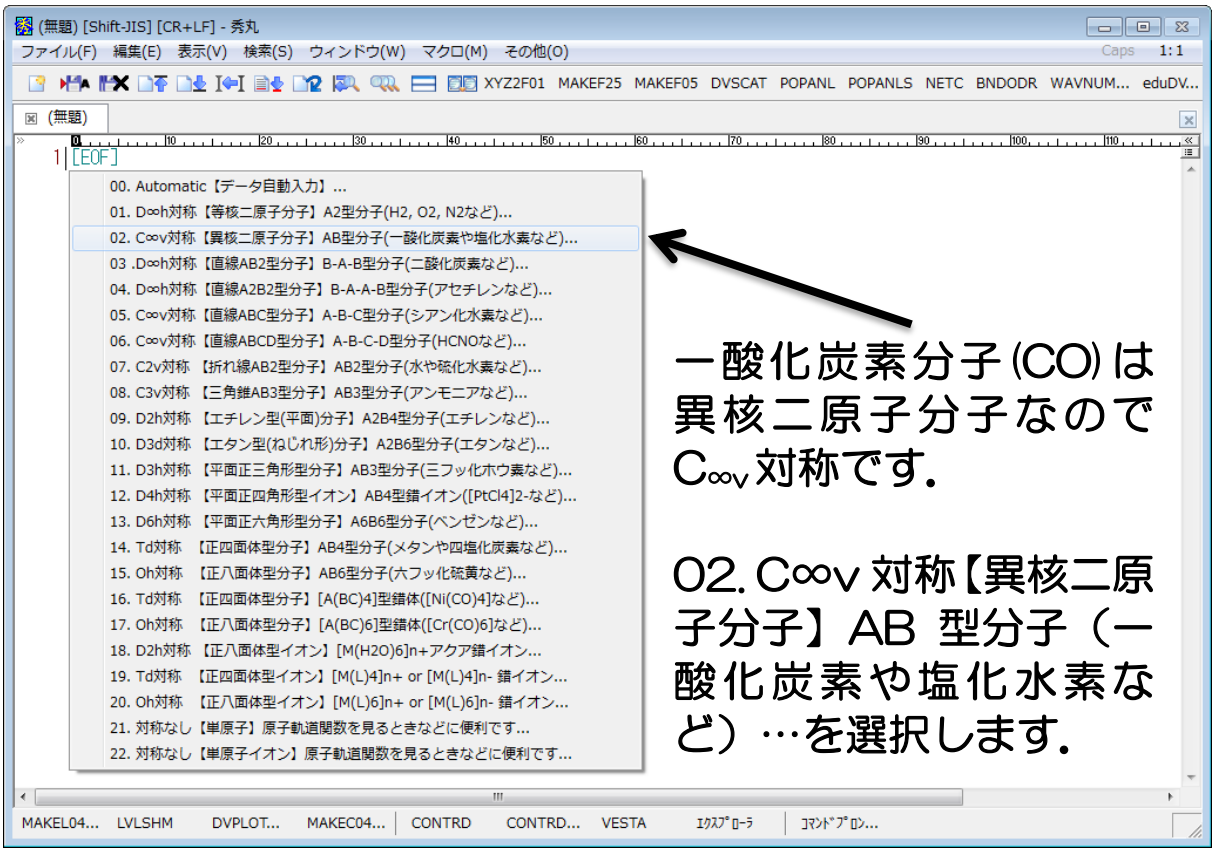
・小和田善之先生（兵庫教育大学）および坂根弦太（岡山理科大学）が共同開発したプログラム MAKEF05SCFS が含まれています．MAKEF05SCFS の使い方は MAKEF05 と同様ですが，F01 から F05 が作成される際，MAKEF05SCFS では SCFS 版の F05 が作成されます（通常の MAKEF05 では SCCS 版の F05 が作成されます）．SCFS 版は一般に SCCS 版よりも比較的高精度な SCAT 計算が行われますが，SCCS 版に比べて使用上の注意点がいくつか存在します．しかし，共有結合や配位結合を主たる結合とする有機分子・錯体・錯イオンの電子状態計算では一般に，SCFS 版の SCAT 計算の方が実験結果をよく説明する計算結果を与えることが多いようです．そのため，有機小分子や錯体の計算を行うことの多い eduDV では SCFS 版をデフォルトとしております（単原子 ATOMN，単原子イオン IONN は除く）．
　MAKEF05SCFS で作成した F05 には，個々の原子種に対する井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値として，Slater の原子半径の値が採用されています．
参照：**https://www.dvxa.org/hme/venus/SCFS/R0.html**
詳しくは本冊子 92 ページおよび 146～149 ページを参照して下さい．

◎ＤＶ−Ｘα法計算支援環境の使い方

１．教育用分子軌道計算システム eduDV を使う場合（一酸化炭素分子の場合）

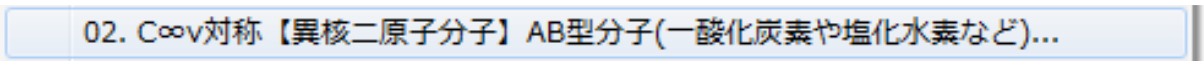


右上の【eduDV】ボタンをクリックします.

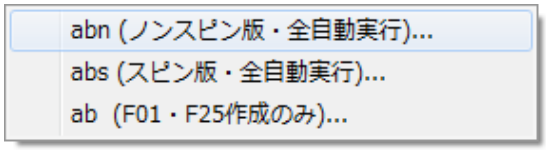


例えば一酸化炭素(CO)分子を計算する場合，プルダウンメニュー（23 種類）

の中から

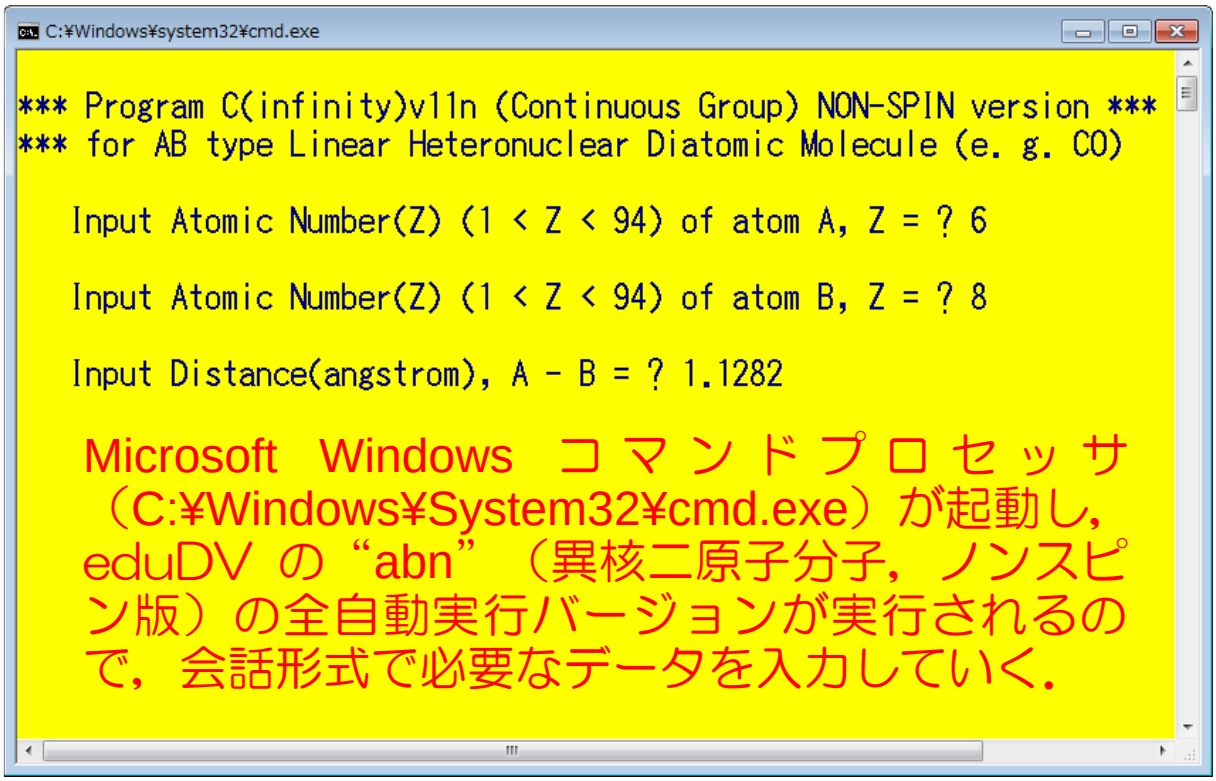


を選択（クリック）します．すると，さらにプルダウンメニューが現れますので，



この場合，例えば，**abn**（ノンスピン版・全自動実行版）を選択（クリック）してみます．

キーボードから，必要な数値を入力していきます．

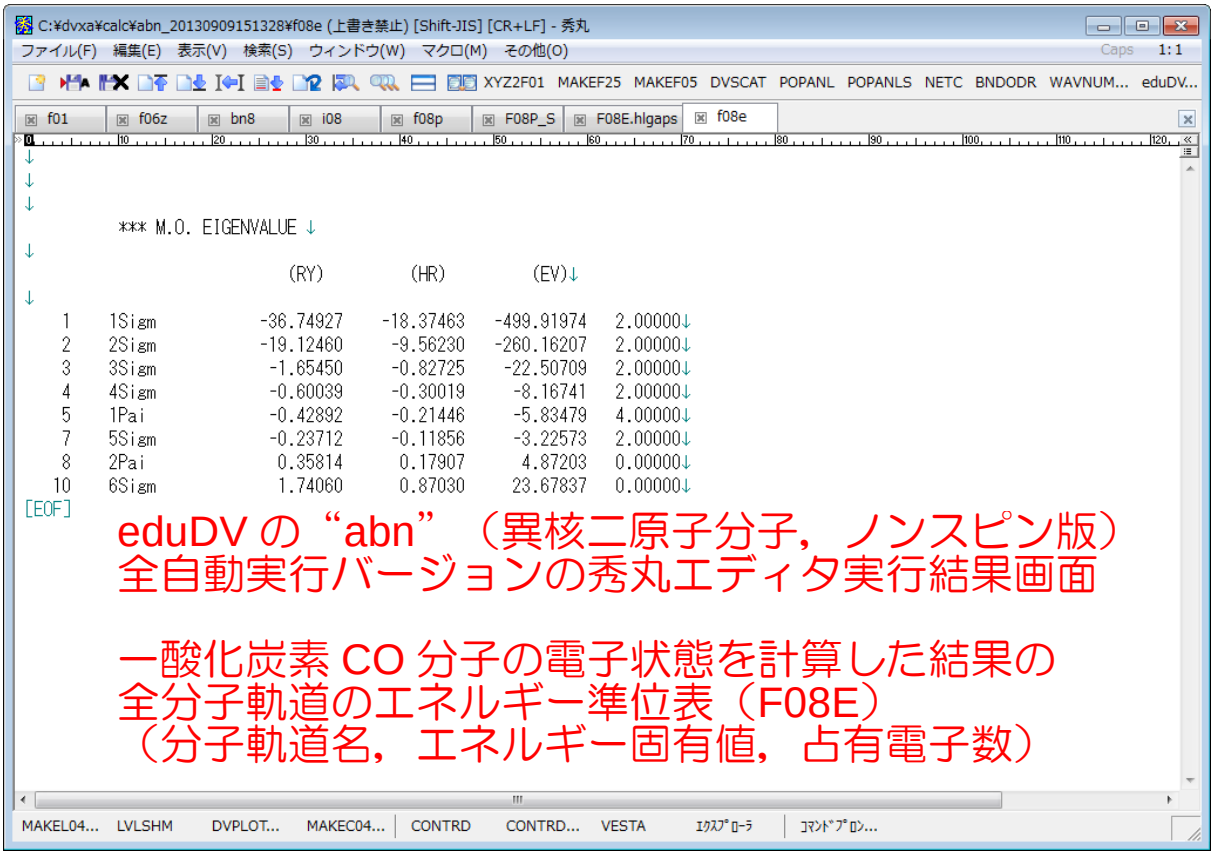


*** プログラム $C_{\infty v}$11n (連続群) ノンスピン版 ***
*** 異核二原子分子 AB 型（例えば一酸化炭素(CO)分子）

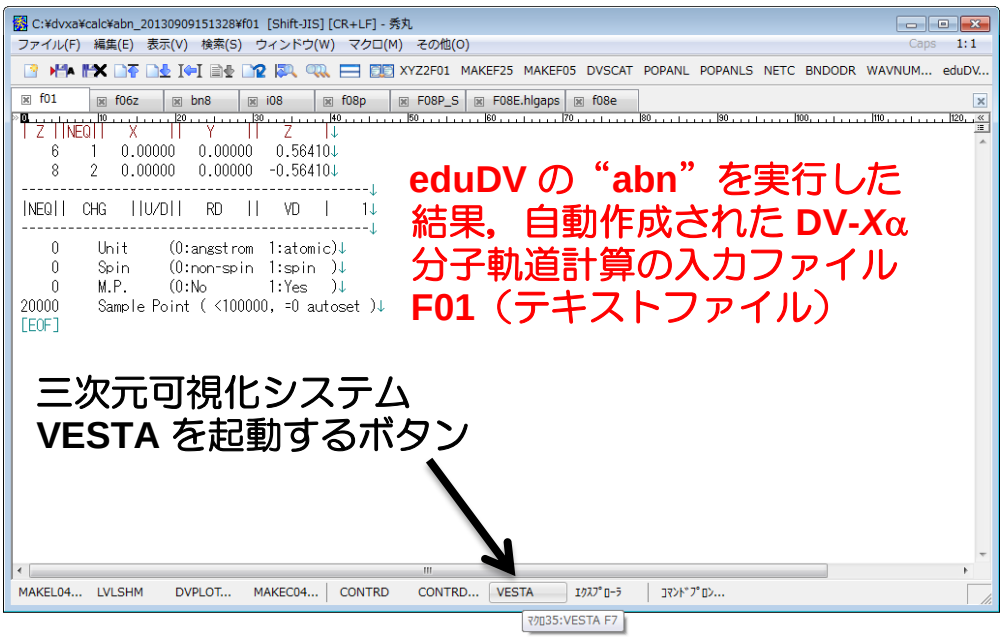
Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of atom A, Z = ? **6** ↲ ←炭素原子の原子番号

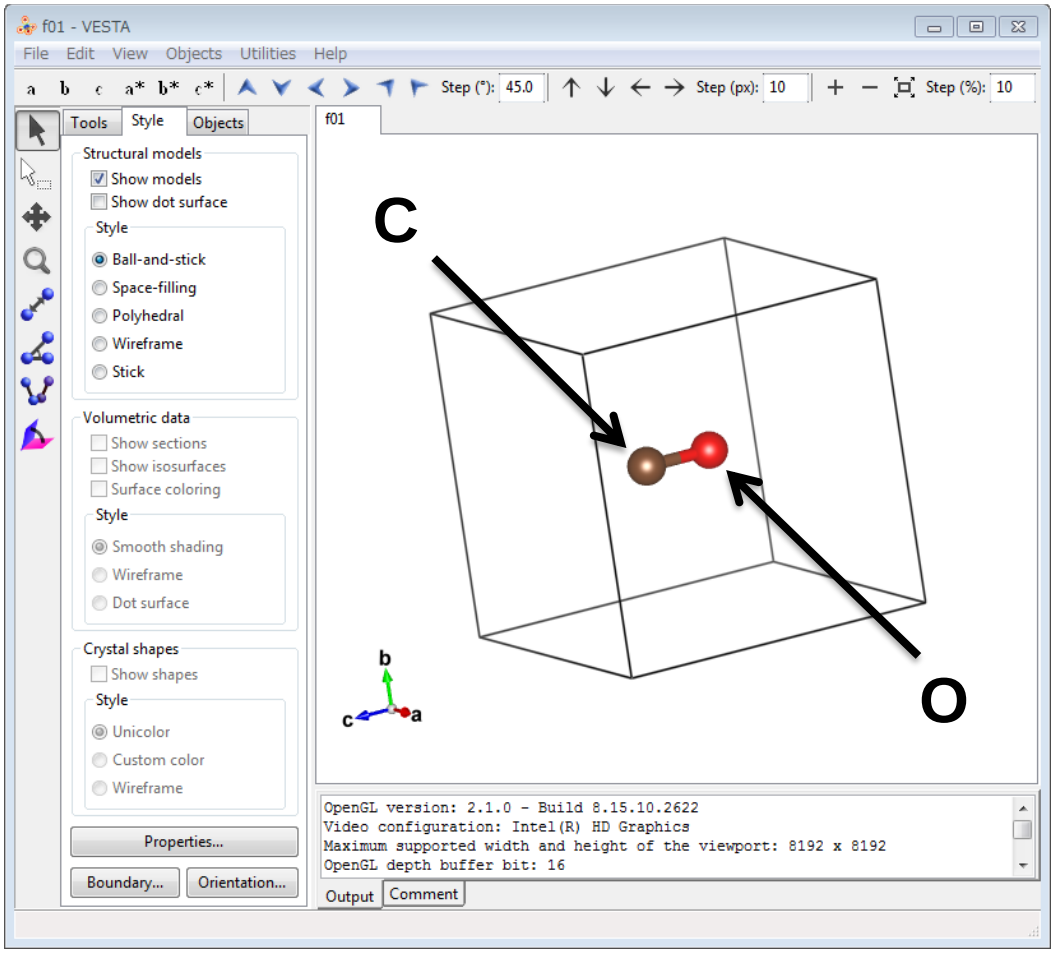
Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of atom B, Z = ? **8** ↲ ←酸素原子の原子番号

Input Distance(Å), A−B = ? **1.1282** ↲ ←炭素原子と酸素原子との原子間距離(Å)

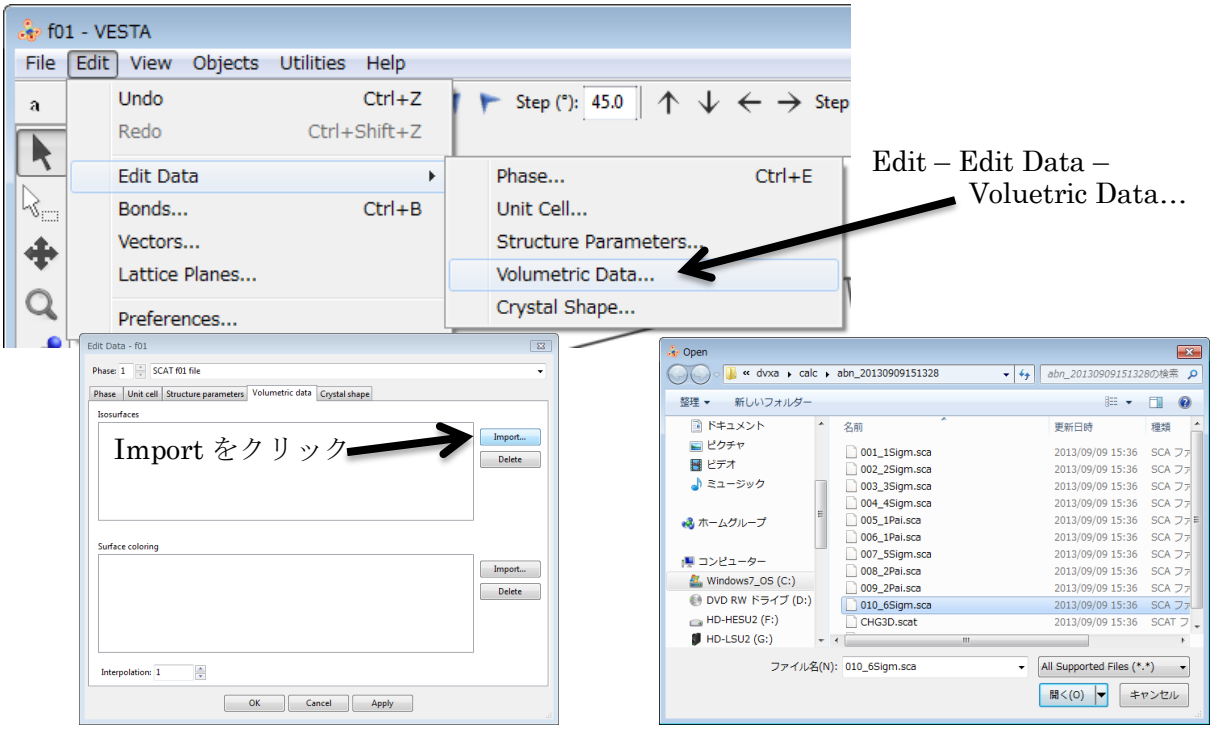


この段階で，一酸化炭素(CO)分子のノンスピン版 **SCAT** での電子状態計算は主だった各種ユーティリティプログラムの実行も含めて完全に終了しています．あとは画面の下の方にある【**VESTA**】ボタンを押すだけです．【**VESTA**】ボタンを押す前に，今回は【**F01**】タブをアクティブにしておきます．こうしておくと，**VESTA** では自動的に **F01** が読み込まれます．





eduDV の全自動実行版ではすでに **CONTRDALL** が実行されておりますので全分子軌道の等値曲面を **VESTA** で描くことができます．次ページよりこの全ての分子軌道を **VESTA** で描いた結果を紹介いたします．静電ポテンシャルマップおよび HOMO マップも描いてみることにします（a_0: ボーア半径, a_0 = 0.529177211 Å）．**VESTA** の具体的な操作法については後述します．



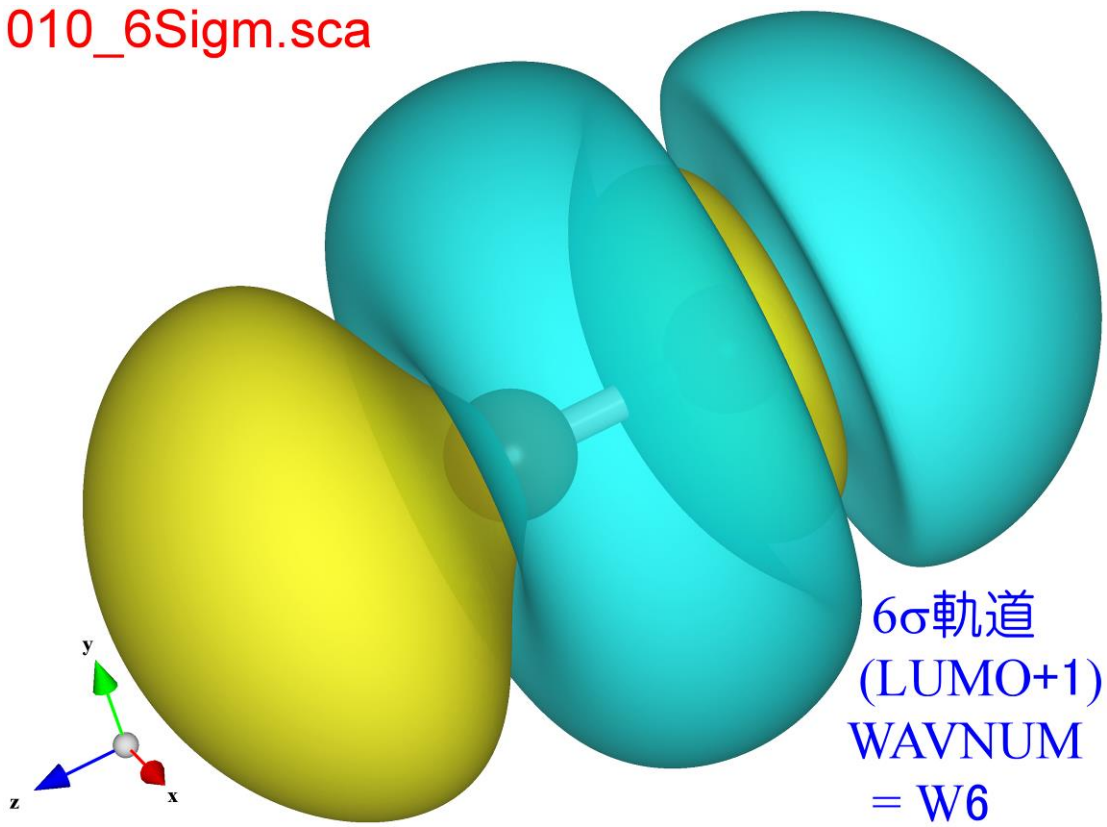


図１．６σ軌道(LUMO+1)　エネルギー固有値　23.67837 eV　電子数：０
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$), Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

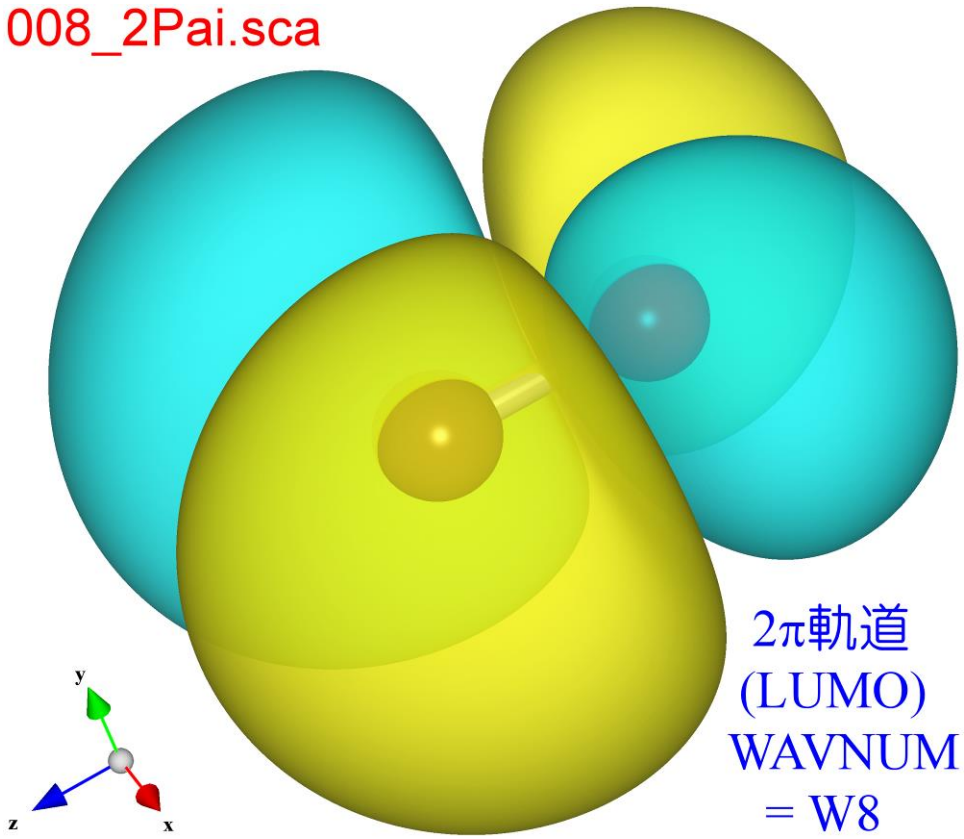


図 2a．２π軌道(LUMO)　エネルギー固有値　4.87203 eV　電子数：０
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

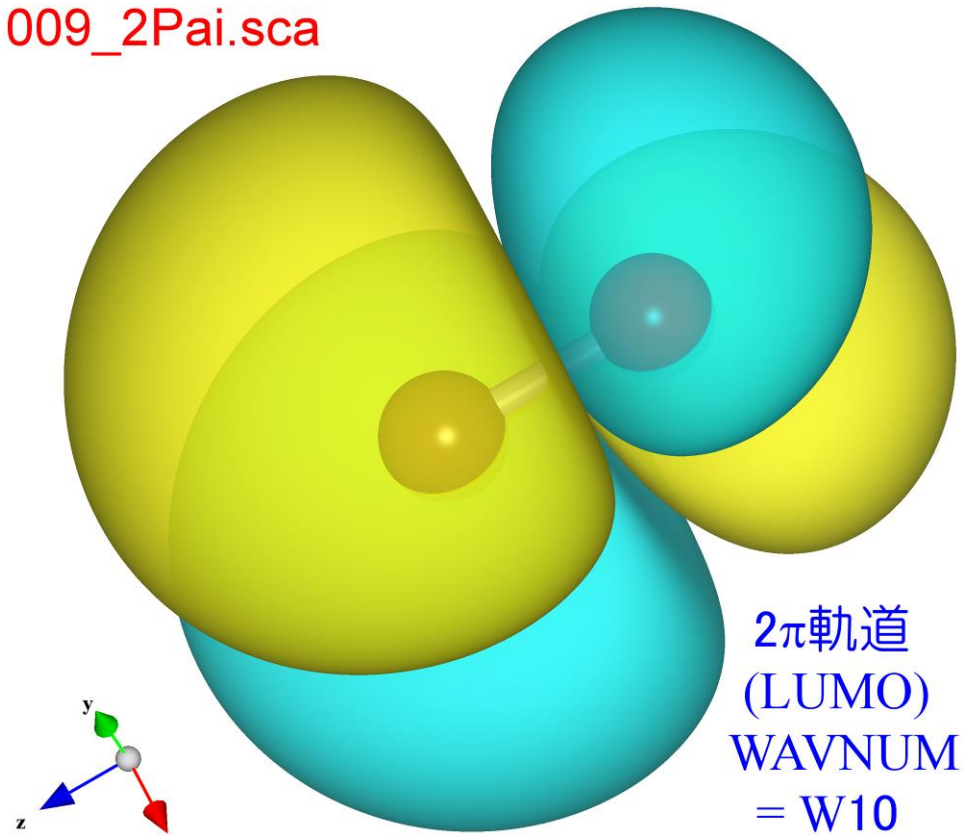


図 2b. 2π軌道(LUMO) エネルギー固有値 4.87203 eV 電子数：0
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

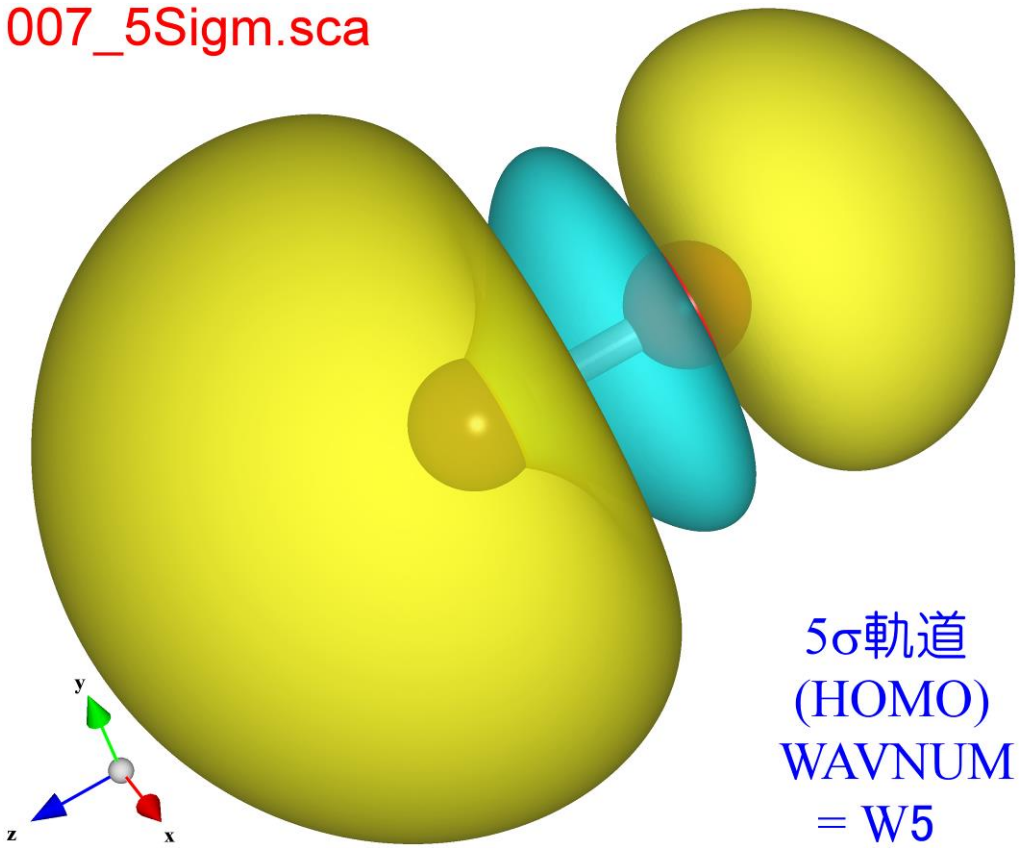


図３．5σ軌道(HOMO) エネルギー固有値 -3.22573 eV 電子数：2
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

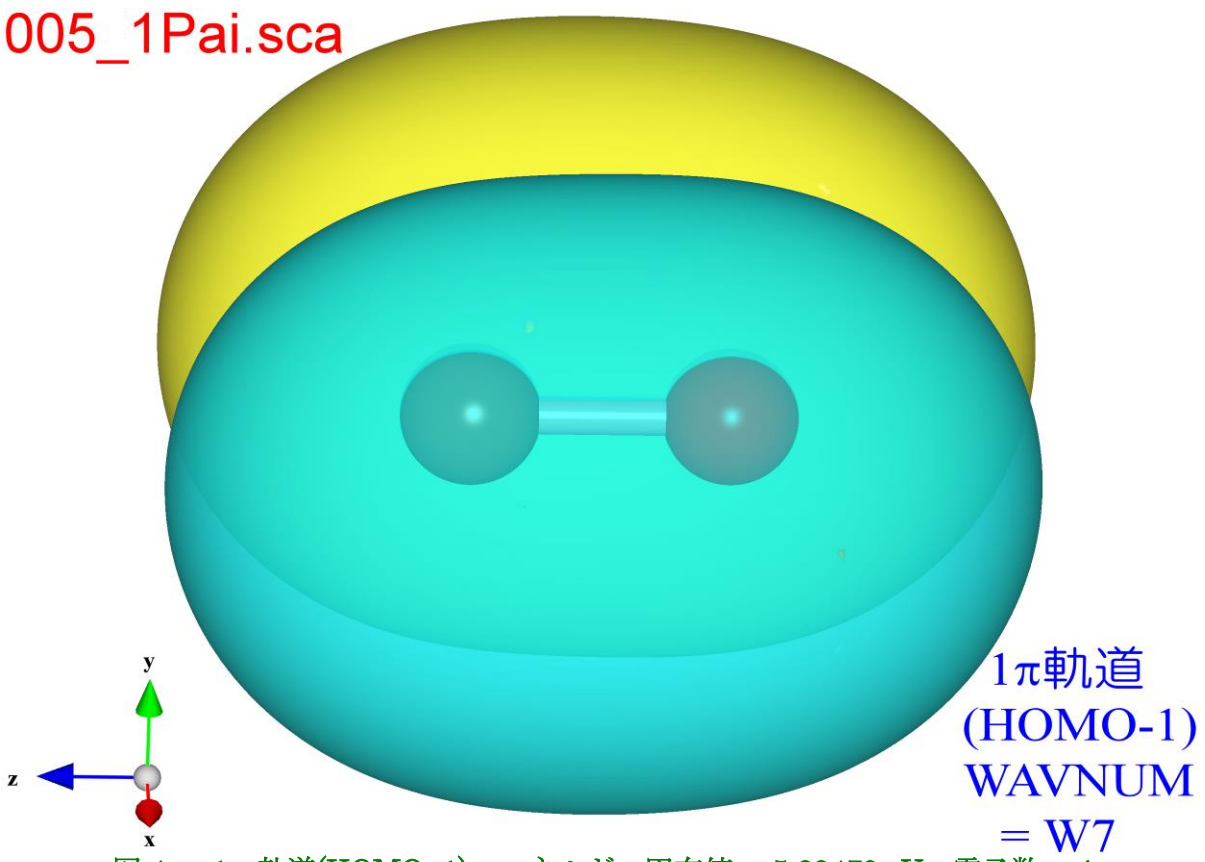


図 4a. 1π軌道(HOMO−1) エネルギー固有値 -5.83479 eV 電子数：4
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

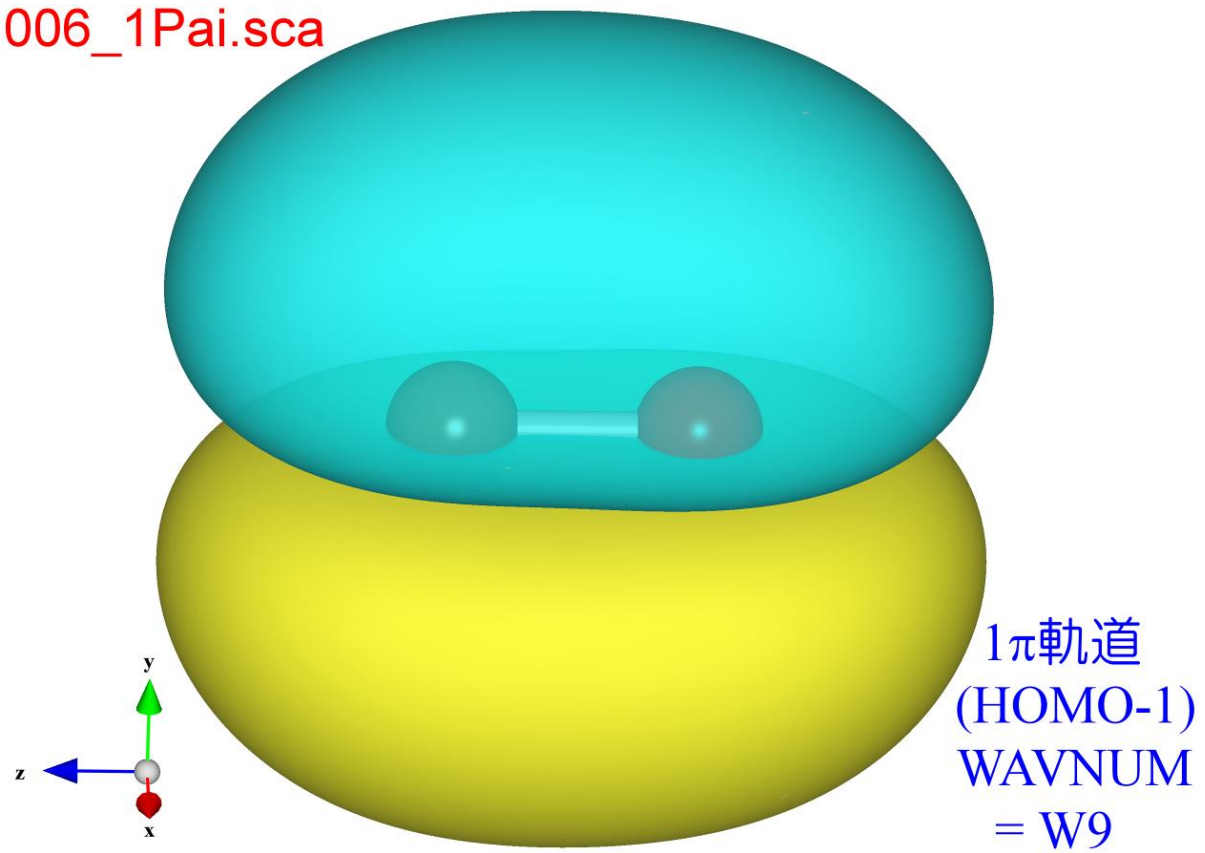


図 4b. 1π軌道(HOMO−1) エネルギー固有値 -5.83479 eV 電子数：4
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

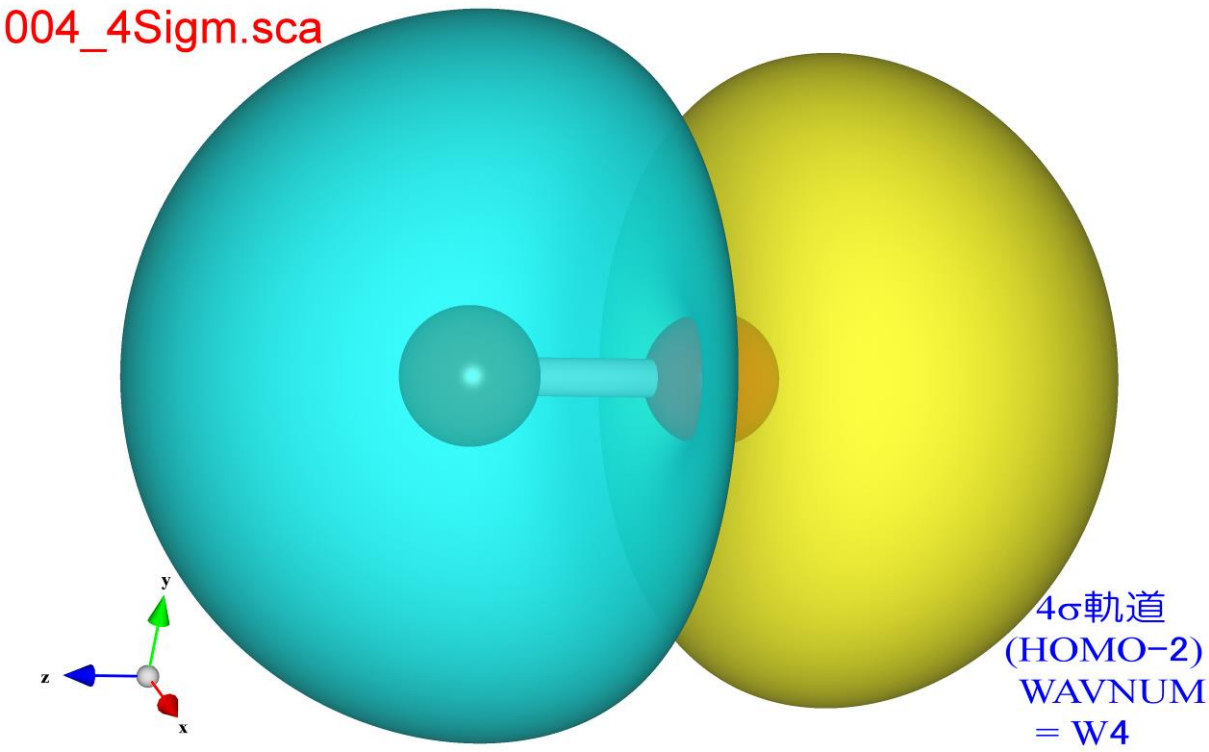


図５．４σ軌道(HOMO−2)　エネルギー固有値　-8.16741 eV　電子数：２
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

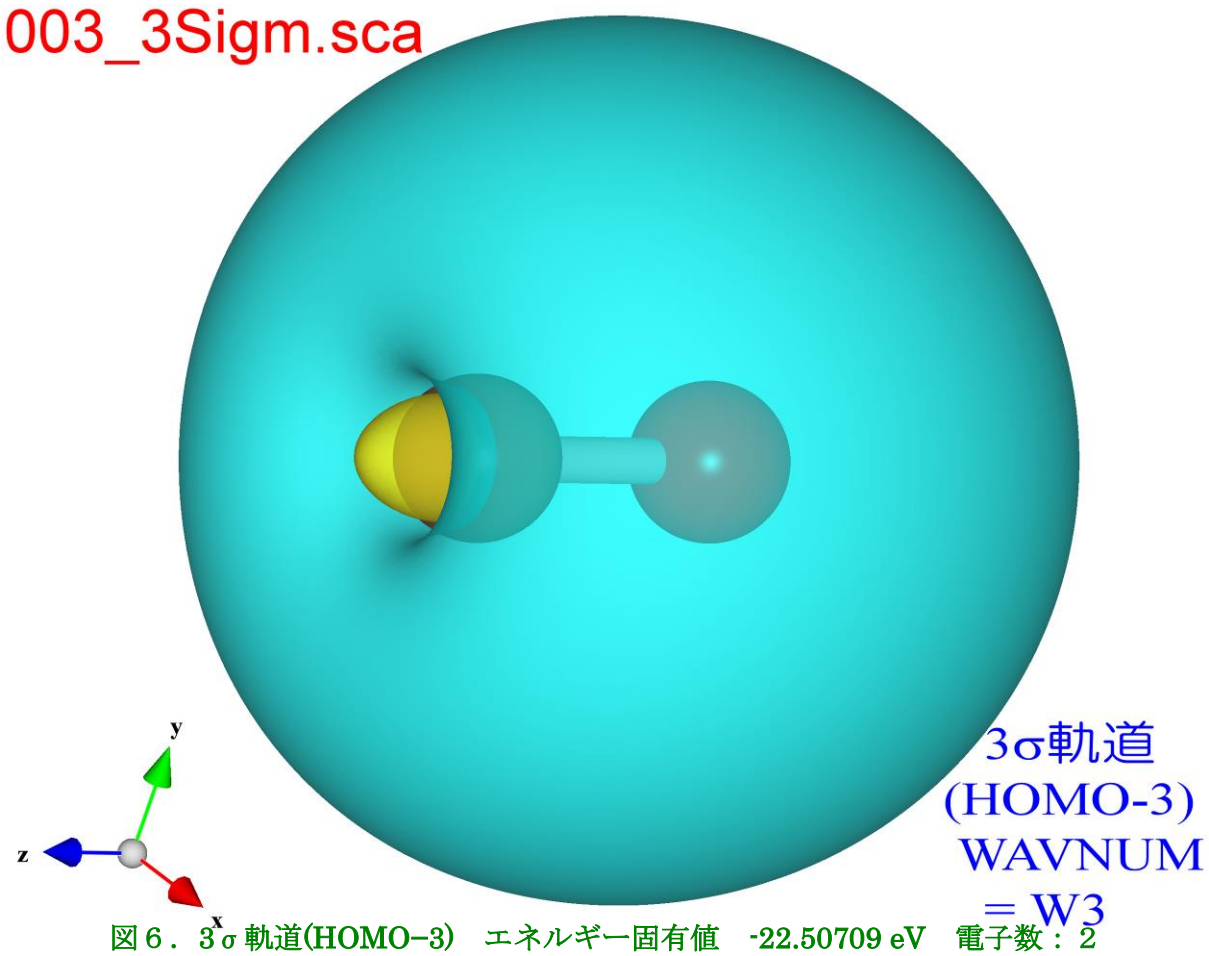


図６．３σ軌道(HOMO−3)　エネルギー固有値　-22.50709 eV　電子数：２
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

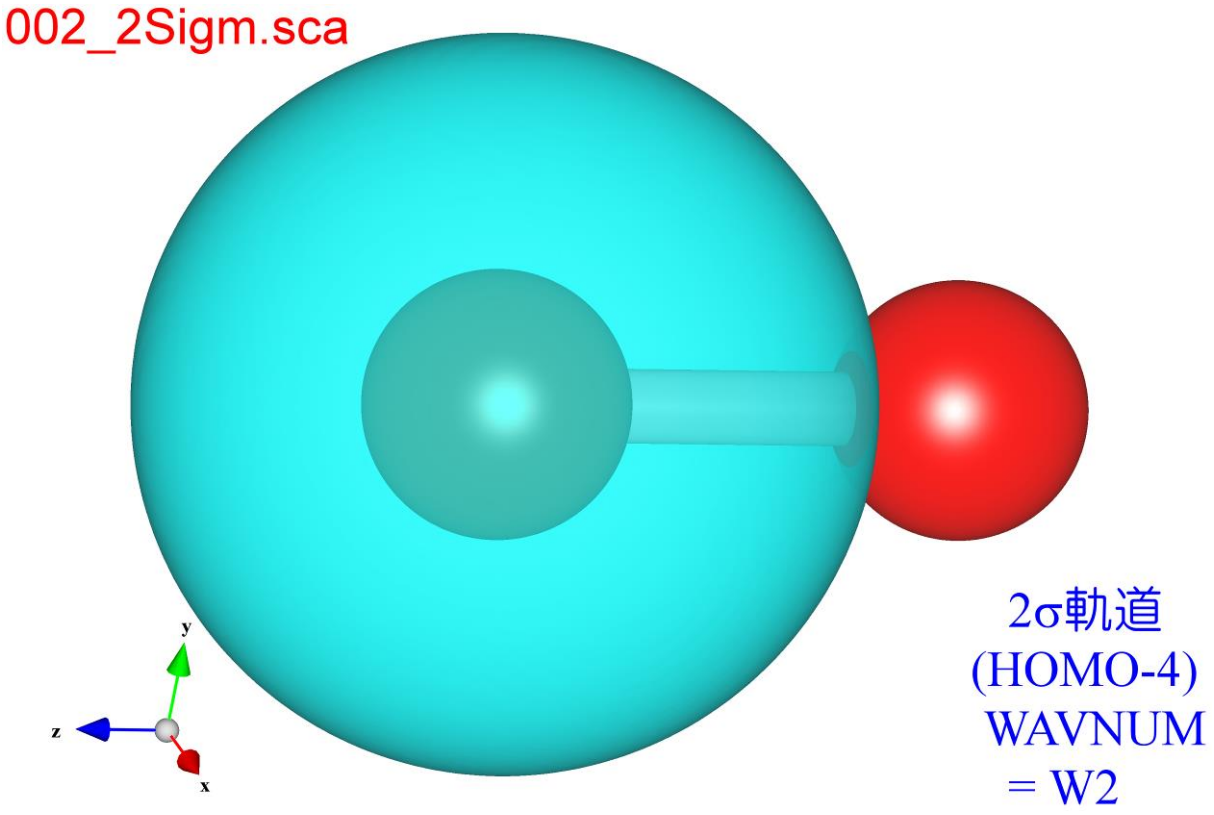


図７．２σ軌道(HOMO−4)　エネルギー固有値　-260.16207 eV　電子数：２
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

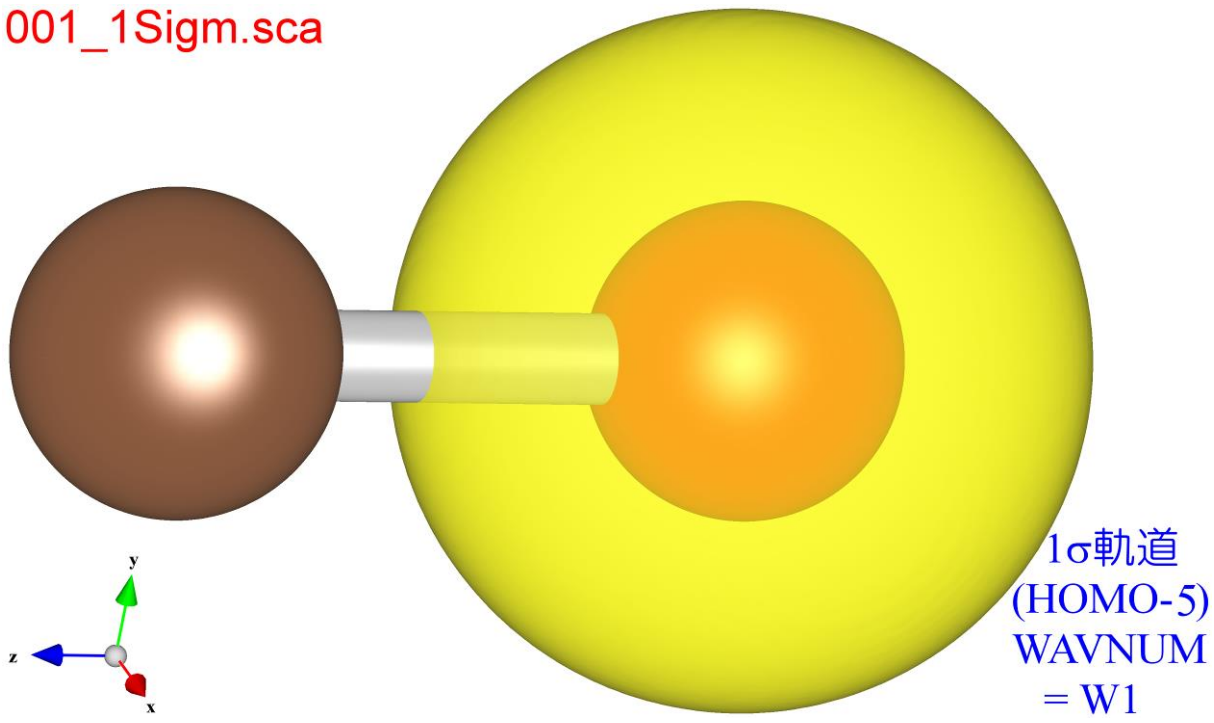


図８．１σ軌道(HOMO−5)　エネルギー固有値　-499.91974 eV　電子数：２
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$) , Opacity 1 (0−255): 153, Opacity 2 (0−255): 255

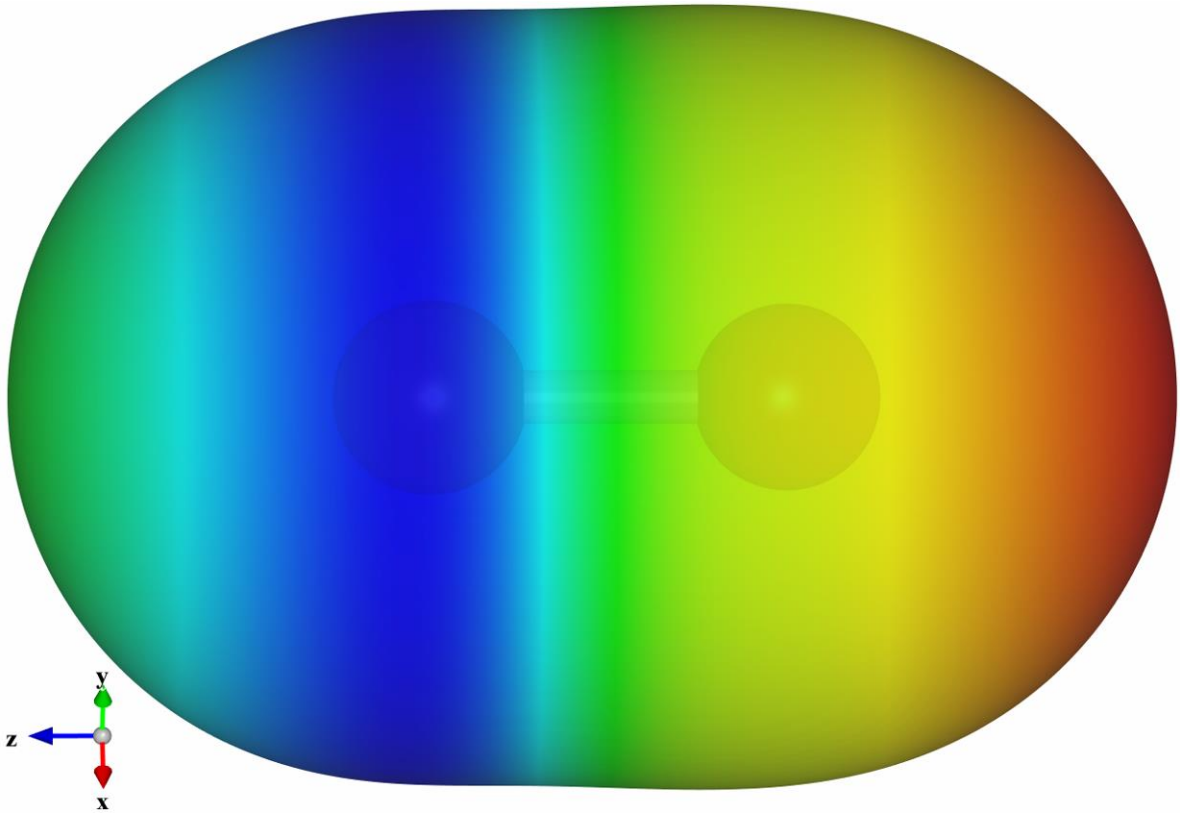


図９．静電ポテンシャルマップ
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$), Opacity 1 (0−255): 230, Opacity 2 (0−255): 255

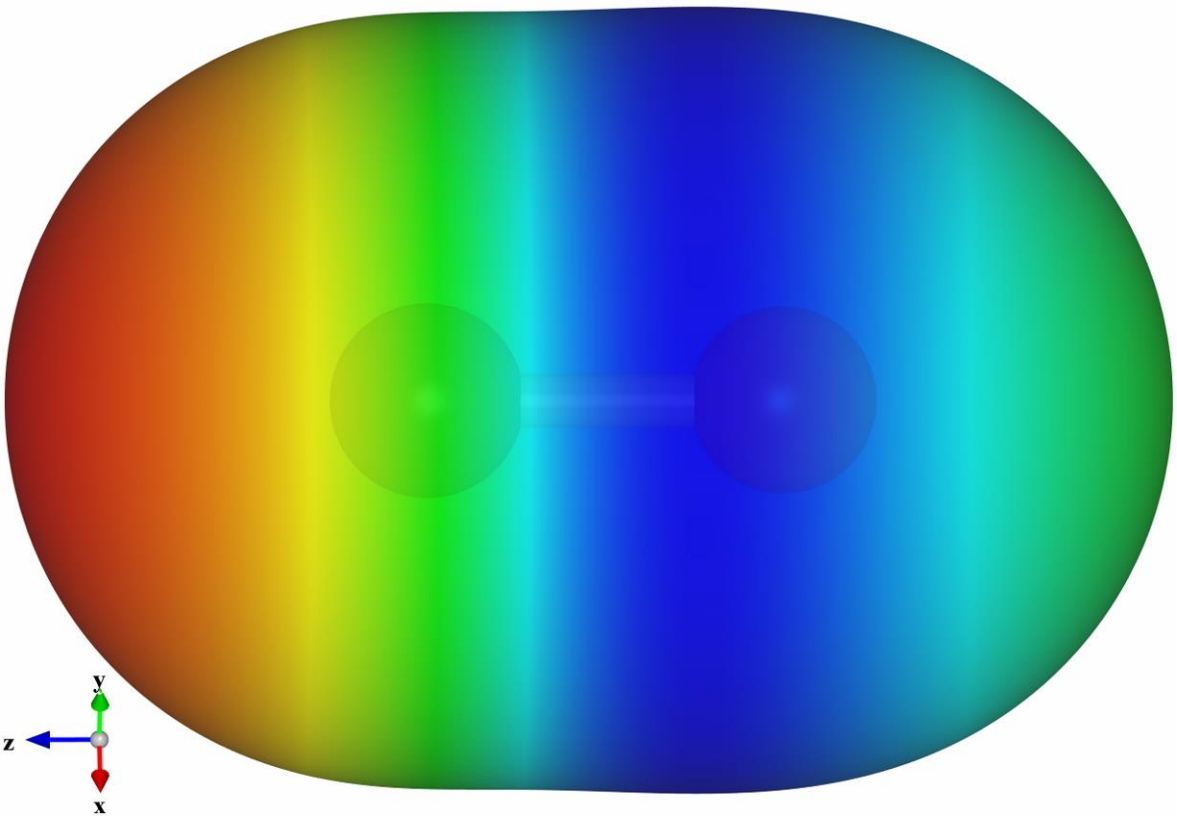


図 10．HOMO マップ
等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$), Opacity 1 (0−255): 230, Opacity 2 (0−255): 255

eduDV の全自動版ではテキストファイルとしてもすでに様々な情報がファイル出力されています．まずは分子軌道のエネルギー固有値・占有電子数の一覧表である **F08E** を見て下さい．

```
f08e

*** M.O. EIGENVALUE ↓

                          (RY)        (HR)        (EV)↓

    1    1Sigm          -36.74927   -18.37463   -499.91974   2.00000↓
    2    2Sigm          -19.12460    -9.56230   -260.16207   2.00000↓
    3    3Sigm           -1.65450    -0.82725    -22.50709   2.00000↓
    4    4Sigm           -0.60039    -0.30019     -8.16741   2.00000↓
    5    1Pai            -0.42892    -0.21446     -5.83479   4.00000↓
    7    5Sigm           -0.23712    -0.11856     -3.22573   2.00000↓
    8    2Pai             0.35814     0.17907      4.87203   0.00000↓
   10    6Sigm            1.74060     0.87030     23.67837   0.00000↓
[EOF]
```

次に有効電荷**(Net Charge)**を求めるプログラム **NETC** の出力ファイルである **I08** を見て下さい．

```
i08

EFFECTIVE CHARGE ↓
LO                                NET CHARGE↓
 1   C          5.99567            0.00433↓
 2   O          8.00433           -0.00433↓
[EOF]
```

有効共有結合電荷**(Bond Overlap Population)**を求めるプログラム **BNDODR** の出力ファイルである **BN8** も見てみましょう．

```
bn8

     BOND OVERLAP POPULATION BETWEEN ATOMS ↓

       ( 1 C ) ( 2 O ) (↓
 ( 1)   5.3675↓
 ( 2)   1.2564   7.3761↓
[EOF]
```

マリケン**(Robert Sanderson Mulliken, 1896.6.7-1986.10.31)**のポピュレーション解析を行うプログラム **BNDODR** の出力は **F08P** に対称ブロックごと（σ軌道とπ軌道）に出力されています.

σ軌道に関する出力は以下の通りです. 例えば HOMO の 5σ軌道（エネルギー固有値 = -3.2257 eV）であれば，炭素(NEQ = 1)の 2s 軌道が 42.34%，2p 軌道が 42.38%，酸素(NEQ = 2)の 2s 軌道が 0.42%，2p 軌道が 14.85%から成っている分子軌道であることが読み取れます.

```
f08p
    MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF Sigm  FOR
  LEVEL

 E(  1)      -499.9197 EV
  ( 1 1s) 0.0000  ( 1 2s) 0.0000  ( 2 1s) 1.0000  ( 2 2s) 0.0000
  ( 1 2p) 0.0000  ( 2 2p) 0.0000  (
 E(  2)      -260.1621 EV
  ( 1 1s) 1.0000  ( 1 2s) 0.0000  ( 2 1s) 0.0000  ( 2 2s) 0.0000
  ( 1 2p) 0.0000  ( 2 2p) 0.0000  (
 E(  3)       -22.5071 EV
  ( 1 1s) 0.0000  ( 1 2s) 0.1650  ( 2 1s) 0.0000  ( 2 2s) 0.6547
  ( 1 2p) 0.1208  ( 2 2p) 0.0594  (
 E(  4)        -8.1674 EV
  ( 1 1s) 0.0000  ( 1 2s) 0.2373  ( 2 1s) 0.0000  ( 2 2s) 0.2194
  ( 1 2p)-0.0014  ( 2 2p) 0.5446  (
 E(  5)        -3.2257 EV
  ( 1 1s) 0.0000  ( 1 2s) 0.4234  ( 2 1s) 0.0000  ( 2 2s) 0.0042
  ( 1 2p) 0.4238  ( 2 2p) 0.1485  (
 E(  6)        23.6784 EV
  ( 1 1s) 0.0000  ( 1 2s) 0.1743  ( 2 1s) 0.0000  ( 2 2s) 0.1216
  ( 1 2p) 0.4568  ( 2 2p) 0.2473  (

     CHRG OF Sigm BLOCK

              NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
  ( 1 1s 0)  2.0001  ( 1 2s 0)  1.6514  ( 2 1s 0)  2.0001  ( 2 2s 0)  1.7568  ( 1 2p 0)  1.0863
  ( 2 2p 0)  1.5053  (

                   CHRG(X ATOM, Y ATOM)
 ( 1)       4.4777
 ( 2)       0.5203      5.0020
```

π軌道に関する出力は右の通りです. 例えば LUMO の 2π軌道（エネルギー固有値 = 4.8720 eV）であれば，炭素(NEQ = 1)の 2p 軌道が 68.55%，酸素(NEQ = 2)の 2p 軌道が 31.45%から成っている分子軌道であることが読み取れます.

```
f08p
    MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF Pai   FOR
  LEVEL

 E(  1)         -5.8348 EV
  ( 1 2p) 0.3145  ( 2 2p) 0.6855  (

 E(  2)          4.8720 EV
  ( 1 2p) 0.6855  ( 2 2p) 0.3145  (

     CHRG OF Pai  BLOCK

              NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM

  ( 1 2p 1)  0.6289  ( 2 2p 1)  1.3711  (

                   CHRG(X ATOM, Y ATOM)

 ( 1)       0.4449
 ( 2)       0.3681      1.1870
```

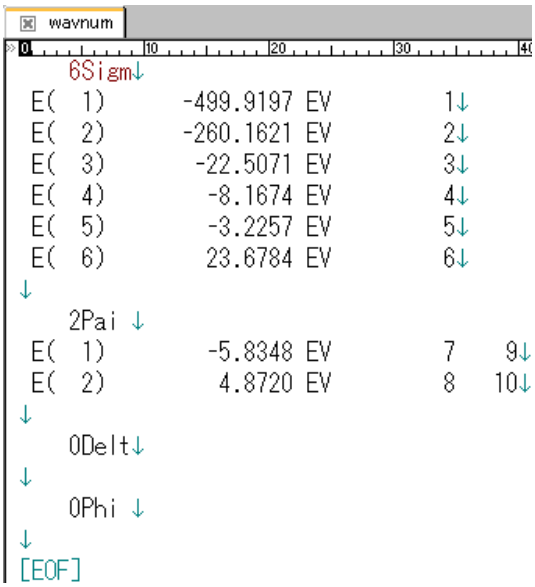
どの原子のどの原子軌道に電子がいくつ占有しているか，セルフコンシステントチャージになるまで繰り返し計算が行われる際の記録ファイル **F36** も是非見てみて下さい．収束した最後の iteration（繰り返し）の Orbital Population を見るようにして下さい．最後の iteration では初期値と終値が完全に一致している（セルフコンシステントになっている）はずです．

```
f36
↓
↓
      TOTAL POPULATION FOR   2TH ITERATION↓
    M   LO KIDO       SHOKICHI         SHUCHI↓
    1    1  100        2.00007        2.00007        2.00007↓
    2    1  200        1.65146        1.65144        1.65144↓
    3    1  210        2.34414        2.34416        2.34416↓
    4    2  100        2.00006        2.00006        2.00006↓
    5    2  200        1.75681        1.75679        1.75679↓
    6    2  210        4.24746        4.24748        4.24748↓
1↓
↓
↓
      TOTAL POPULATION FOR   3TH ITERATION↓
    M   LO KIDO       SHOKICHI         SHUCHI↓
    1    1  100        2.00007        2.00007        2.00007↓
    2    1  200        1.65145        1.65144        1.65144↓
    3    1  210        2.34415        2.34416        2.34416↓
    4    2  100        2.00006        2.00006        2.00006↓
    5    2  200        1.75680        1.75679        1.75679↓
    6    2  210        4.24747        4.24748        4.24748↓
1↓
↓
↓
      TOTAL POPULATION FOR   4TH ITERATION↓
    M   LO KIDO       SHOKICHI         SHUCHI↓
    1    1  100        2.00007        2.00007        2.00007↓
    2    1  200        1.65145        1.65144        1.65144↓
    3    1  210        2.34415        2.34416        2.34416↓
    4    2  100        2.00006        2.00006        2.00006↓
    5    2  200        1.75680        1.75679        1.75679↓
    6    2  210        4.24747        4.24748        4.24748↓
[EOF]
```

波動関数（分子軌道）の等高線図も描いてみましょう．このような波動関数等高線図は **VESTA** の二次元カラーマップ（等高線もプロット可能）を作成する機能を用いて描くこともできます．古典的な白黒の等高線図より見栄えがし，情報量もよほど多い絵を描くことができるのですが，論文投稿などの際よりシンプルな波動関数等高線図を描きたいという需要も存在することから，**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**には **VESTA** を使わずに二次元の等高線図をプロットするのに必要な５つのプログラム，**WAVNUM**，**MAKEC04**，**CONTR**，**CMAP**，**DVPLOT** が登録されています．

１．まず波動関数（分子軌道）の番号を求めます．プログラムを **WAVNUM** 実行した出力ファイル **wavnum** を見れば良いのですが，**eduDV** の全自動版ではすでにプログラム **WAVNUM** は実行済ですので，ファイル **wavnum** を見て下さい．右の **wavnum** を見ると以下のことが分かります．

分子軌道名	分子軌道番号
1σ軌道	1 番
2σ軌道	2 番
3σ軌道	3 番
4σ軌道	4 番
5σ軌道	5 番
6σ軌道	6 番
1π軌道	7 番と 9 番（二重縮退）
2π軌道	8 番と 10 番（二重縮退）



２．マクロ(M)－可視化－**MAKEC04** を選択し，実行して下さい．

会話形式で入力を求められるものについては，今回は以下のように入力してみて下さい．

1 [Enter]
1 [Enter]
2 [Enter]
1,0,0 [Enter]
10 [Enter]
10 [Enter]
0,0 [Enter]
101 [Enter]
0 [Enter]

MAKEC04 の使用方法についての詳細は，書籍“はじめての電子状態計算”をご参照下さい．

３．今回は **c04** を秀丸エディタで以下のように編集作業・上書き保存して下さい．

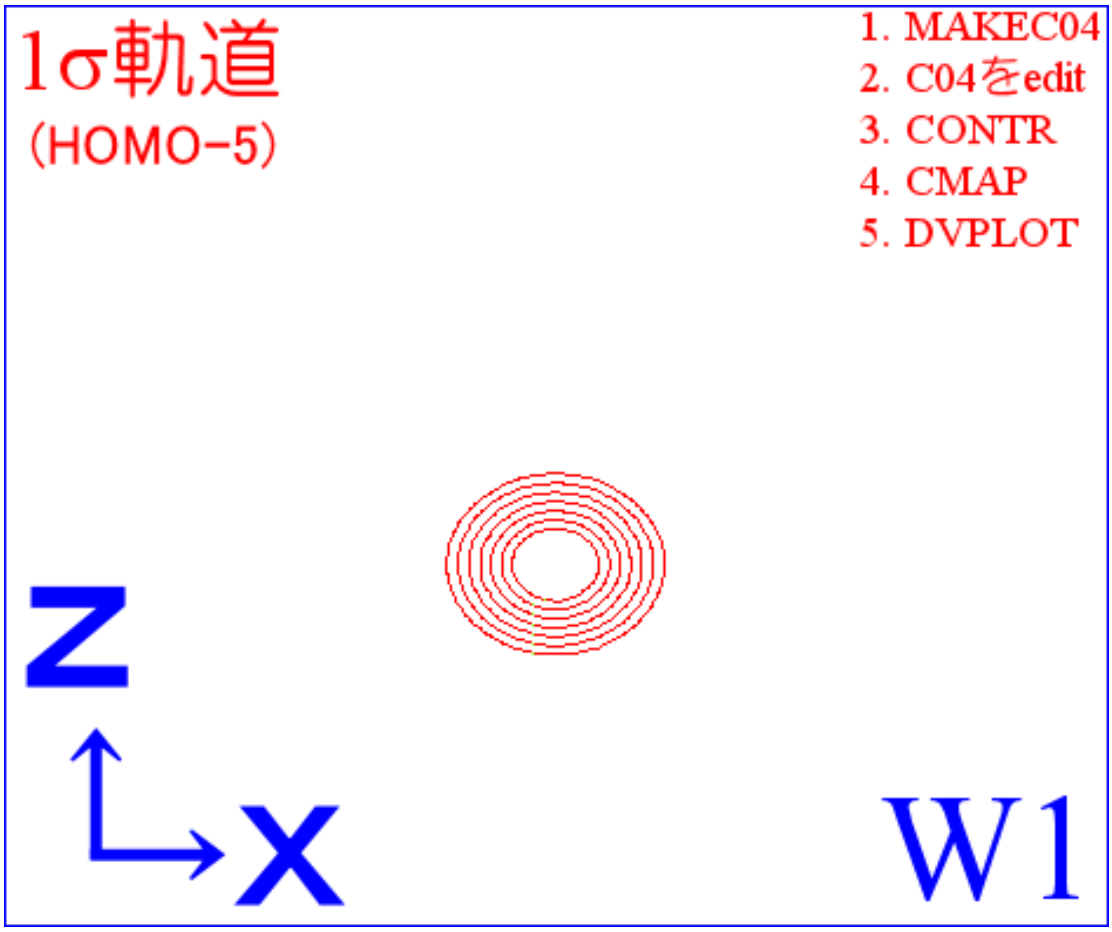
```
c04  c05
  -3    2    3    0↓
 101  101↓
  -0.5000000000D+01    0.0000000000D+00   -0.5000000000D+01↓
   0.1000000000D+00    0.0000000000D+00    0.0000000000D+00↓
   0.0000000000D+00    0.0000000000D+00    0.1000000000D+00↓
  10    1    2    3    4    5    6    7    8    9   10↓
↓
input atoms        :    1    2↓
x axis vector      :    1.0000    0.0000    0.0000↓
x,y length         :   10.0000   10.0000↓
1st atom position  :    0.0000    0.0000↓
reverse x,y        :   No↓
[EOF]
```

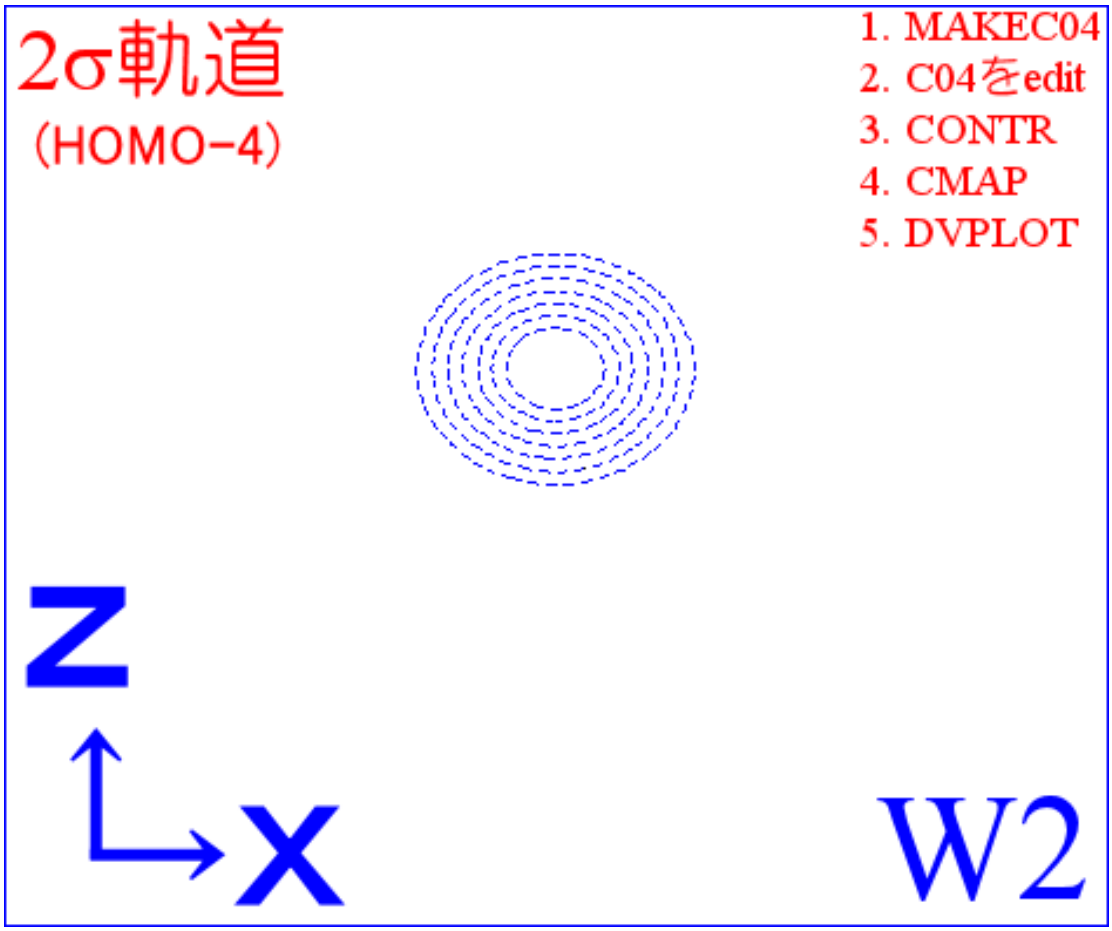
４．マクロ(M)－可視化－**CONTR** を選択し，プログラム **CONTR** を実行して下さい．

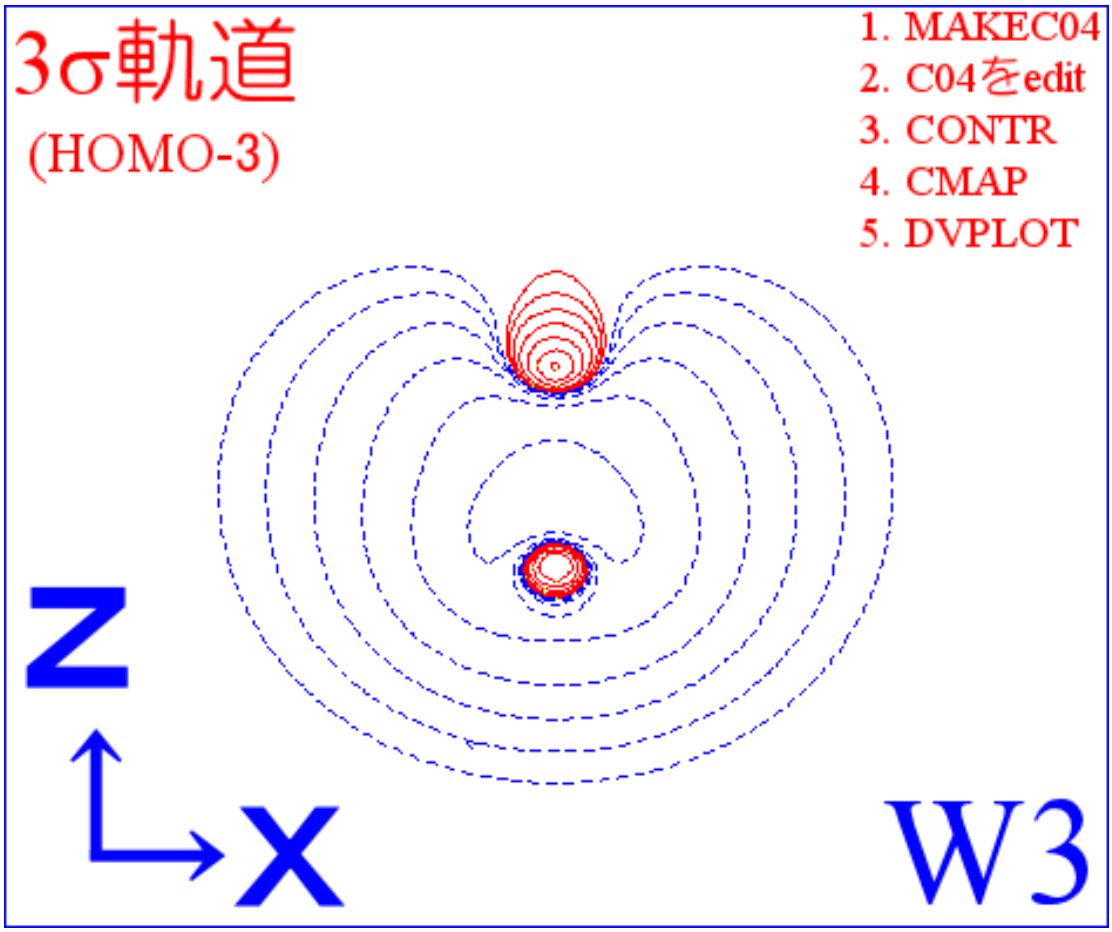
５．マクロ(M)－可視化－**CMAP** を選択し，プログラム **CMAP** を実行して下さい．

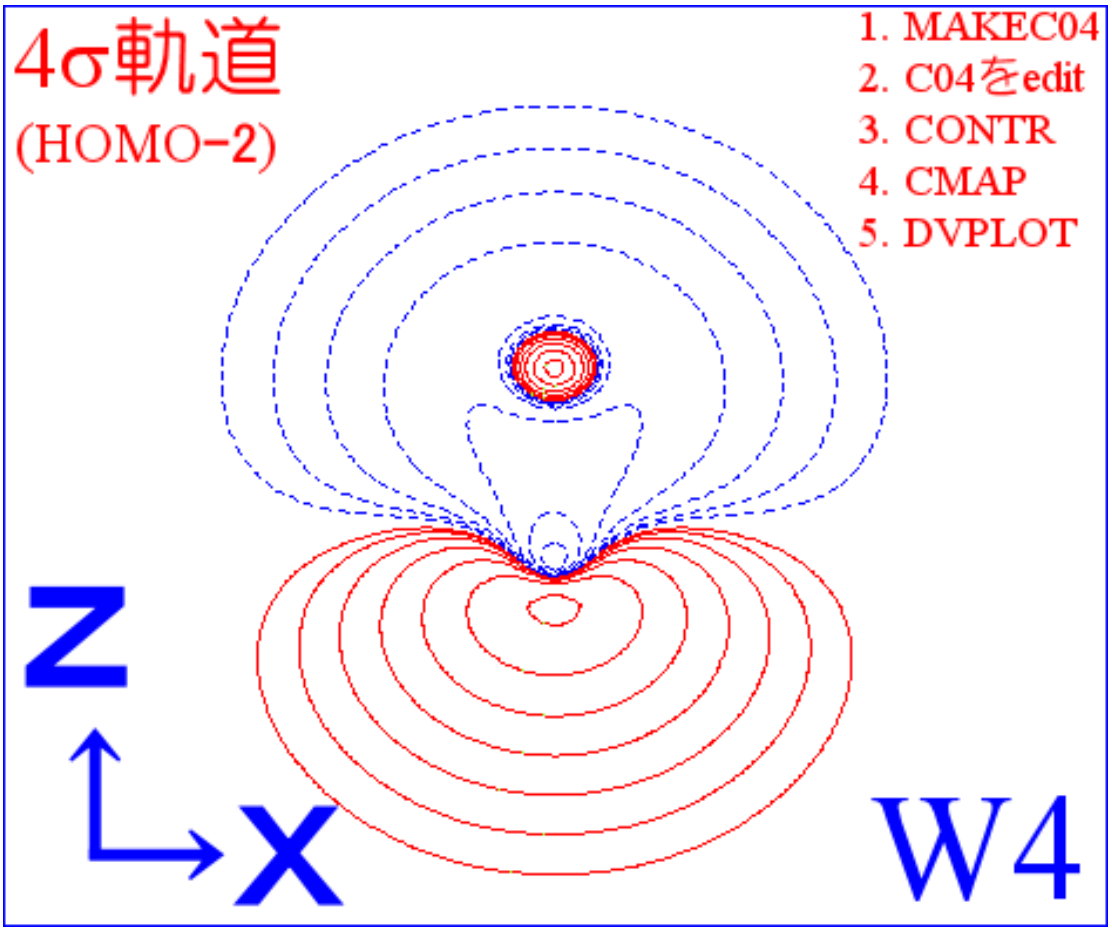
６．自動的に **DVPLOT** が起動されますので，プログラム **W1**～**W8** の中から描きたい波動関数ファイルを選択して下さい．今回の **c04** では **x−z** 面で波動関数を切断して等高線図を描いておりますので，**x−z** 面に節**(node)**を持つ **W9** および **W10** は描くことができません．

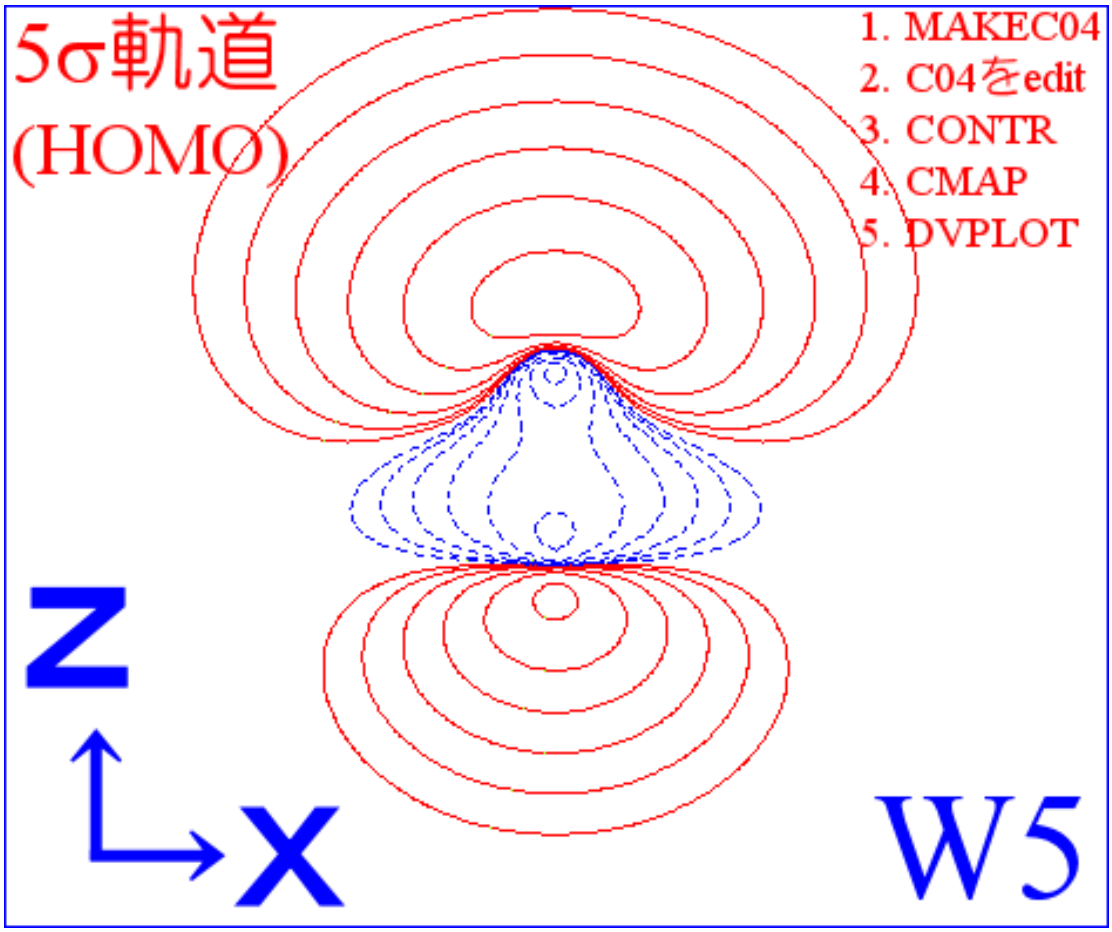
７．**c04** や **c05** を変更しない限り，マクロ(M)－可視化－**CMAP** の起動は不要です．すでに DXY-GL プロッタコマンドで記述された波動関数等高線図のファイル **W1**～**W8** ができておりますので，新たに **DVPLOT** を起動し，描きたい波動関数ファイルを選択して下さい．**DVPLOT** の左上のボタンを右クリックしてプルダウンメニューよりコピー(Y)を選択することにより，波動関数等高線図は Windows のクリップボードにコピーすることができます．**DVPLOT** を終了するときは，Windows の右上の×ボタンは用いずに，必ず左上の【Exit】ボタンを押すように留意して下さい．

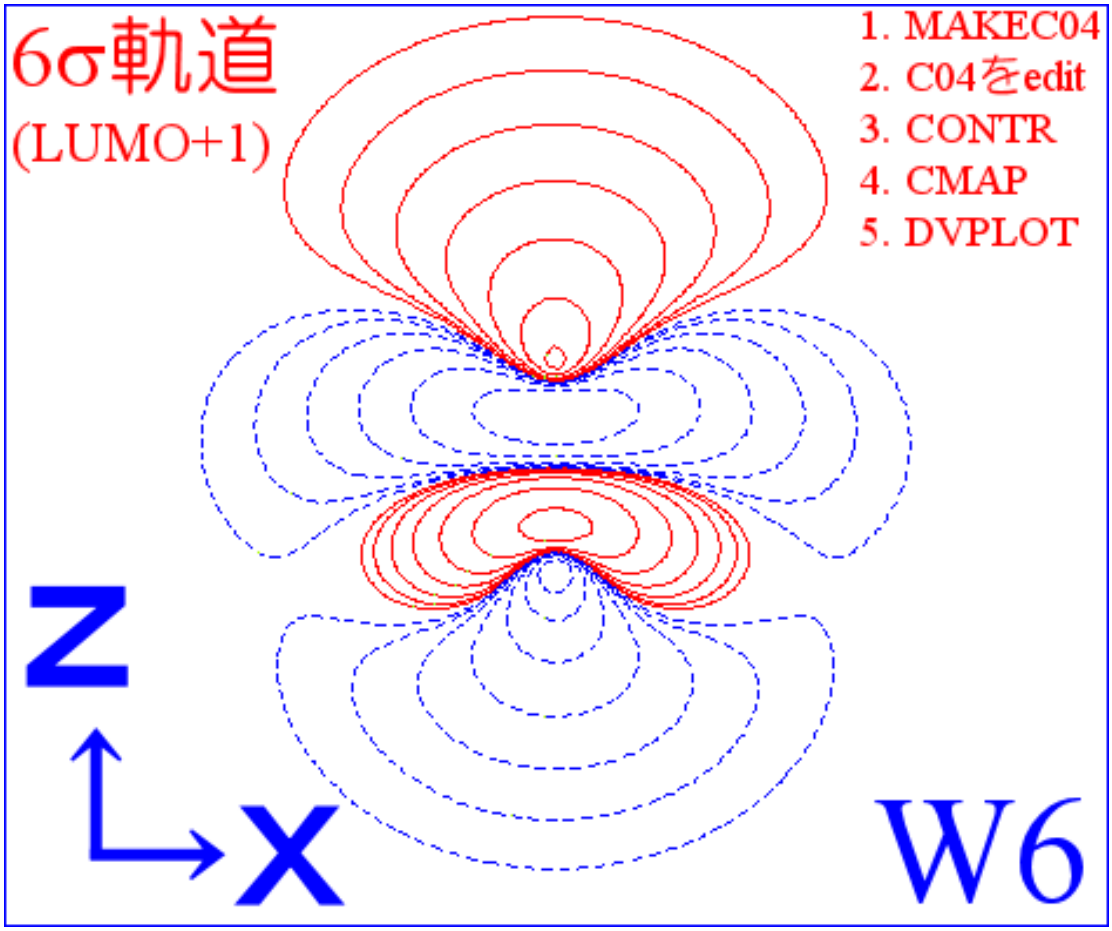

1σ軌道
(HOMO−5)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W1

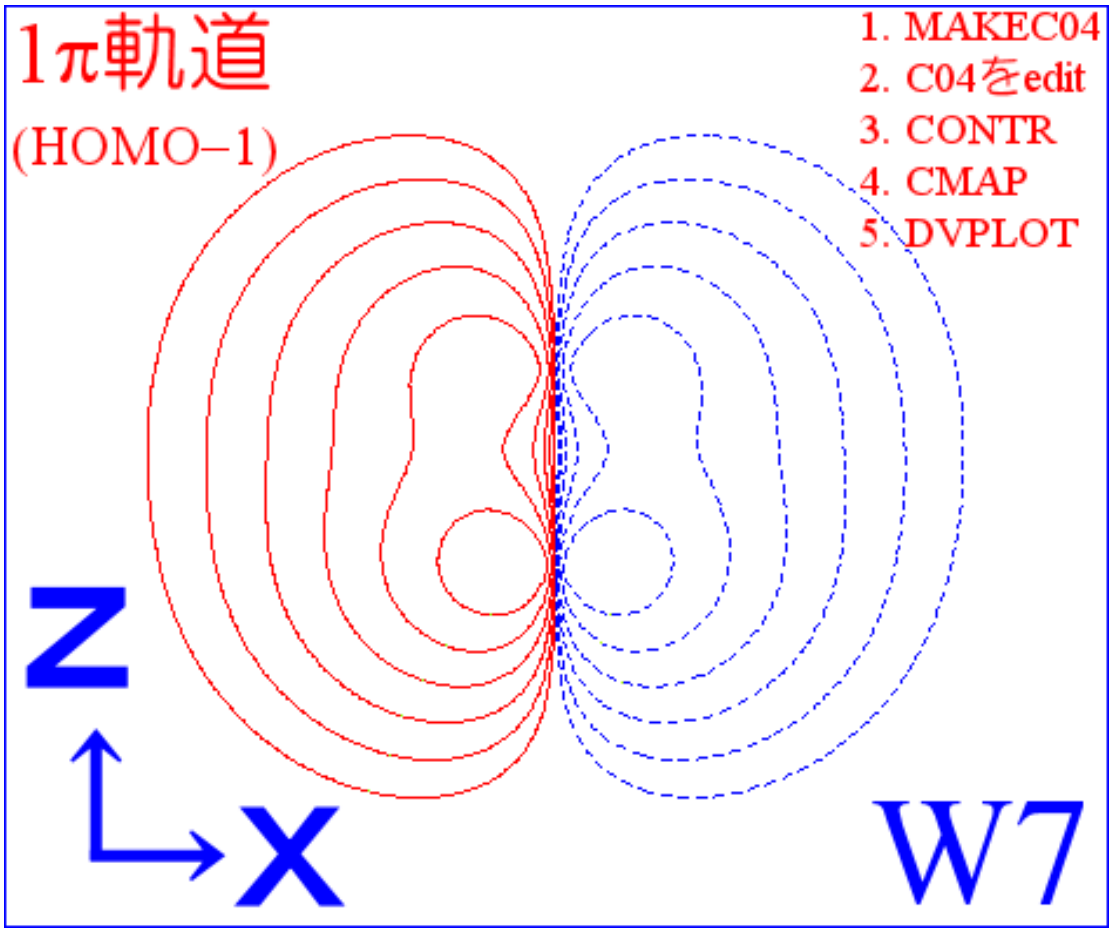

2σ軌道
(HOMO−4)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W2

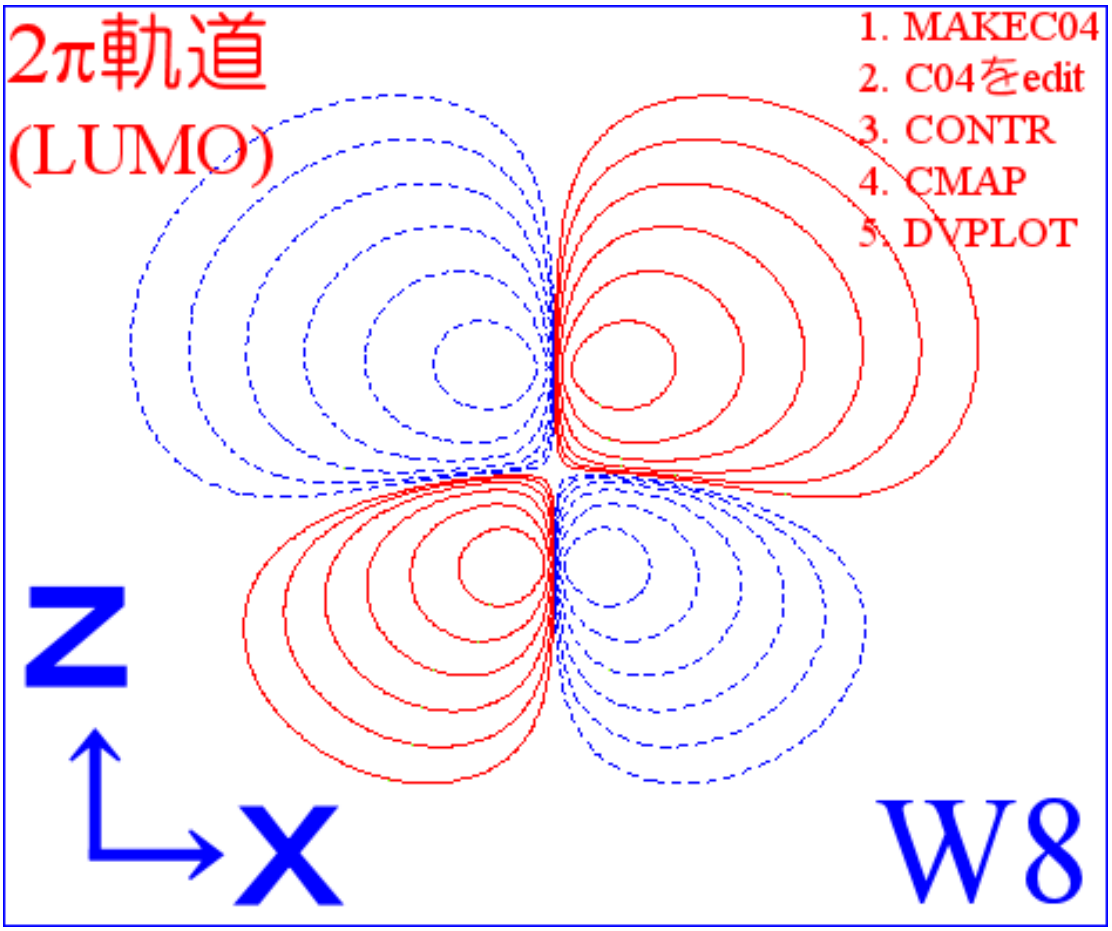

3σ軌道
(HOMO-3)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W3


4σ軌道
(HOMO−2)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W4


5σ軌道
(HOMO)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W5

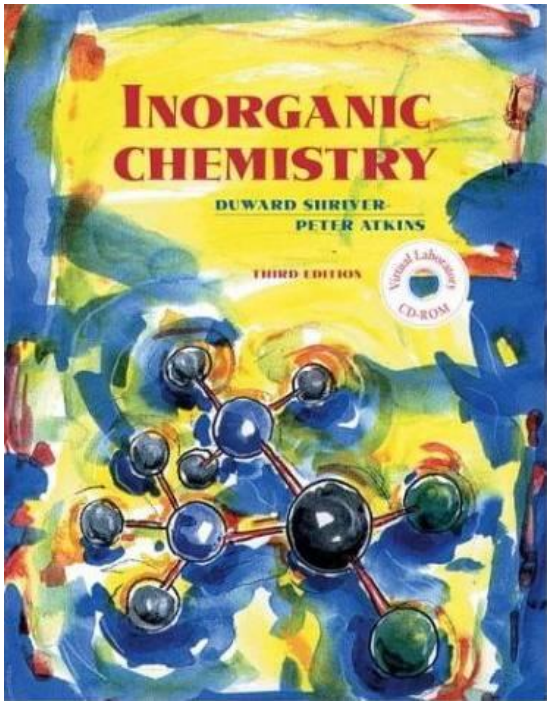

6σ軌道
(LUMO+1)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W6


1π軌道
(HOMO−1)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W7


2π軌道
(LUMO)
1. MAKEC04
2. C04をedit
3. CONTR
4. CMAP
5. DVPLOT
Z
X
W8

2. 教科書・書籍・データベース等の MDL Mol ファイル（*.mol）を使う場合

例えば，以下の書籍には豊富な MDL Mol ファイルが格納された CD−ROM が添付されています.

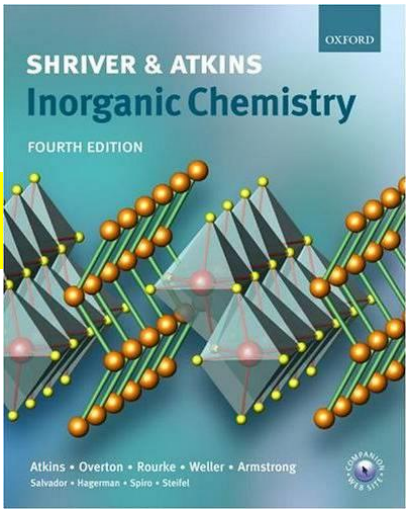


D. F. Shriver, P. W. Atkins,

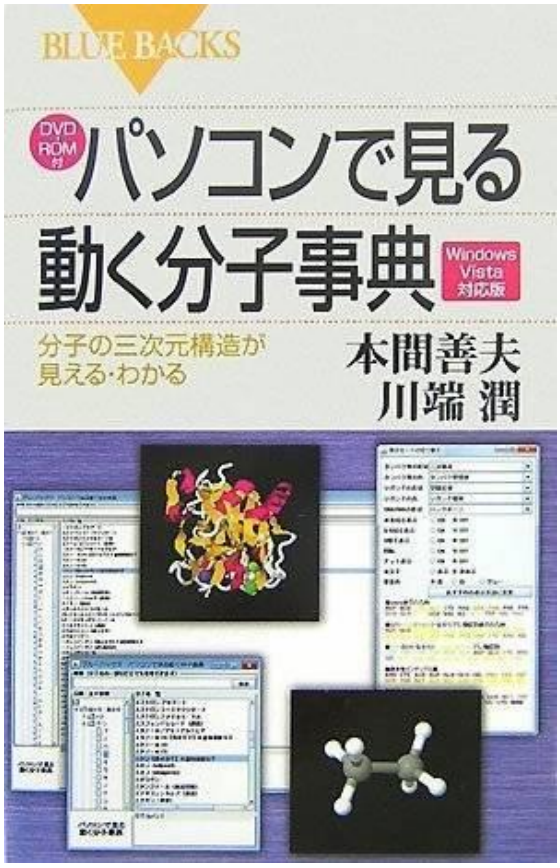
“Inorganic Chemistry with CDROM (3RD ed.)”

W H Freeman & Co (Sd);
3 Har/Crd 版(1999/02).
ISBN−10: 0716736241
ISBN−13: 978−0716736240

※ シュライバー無機化学（第３版）原書



※ 第４版 “Shriver and Atkins Inorganic Chemistry”，→ Oxford University Press（2006/1/26）には　（注意！）
CD−ROM は添付されていません！！第３版のみです！！



本間善夫，川端潤共著，

“パソコンで見る動く分子事典 **Windows Vista** 対応版―分子の三次元構造が見える・わかる”

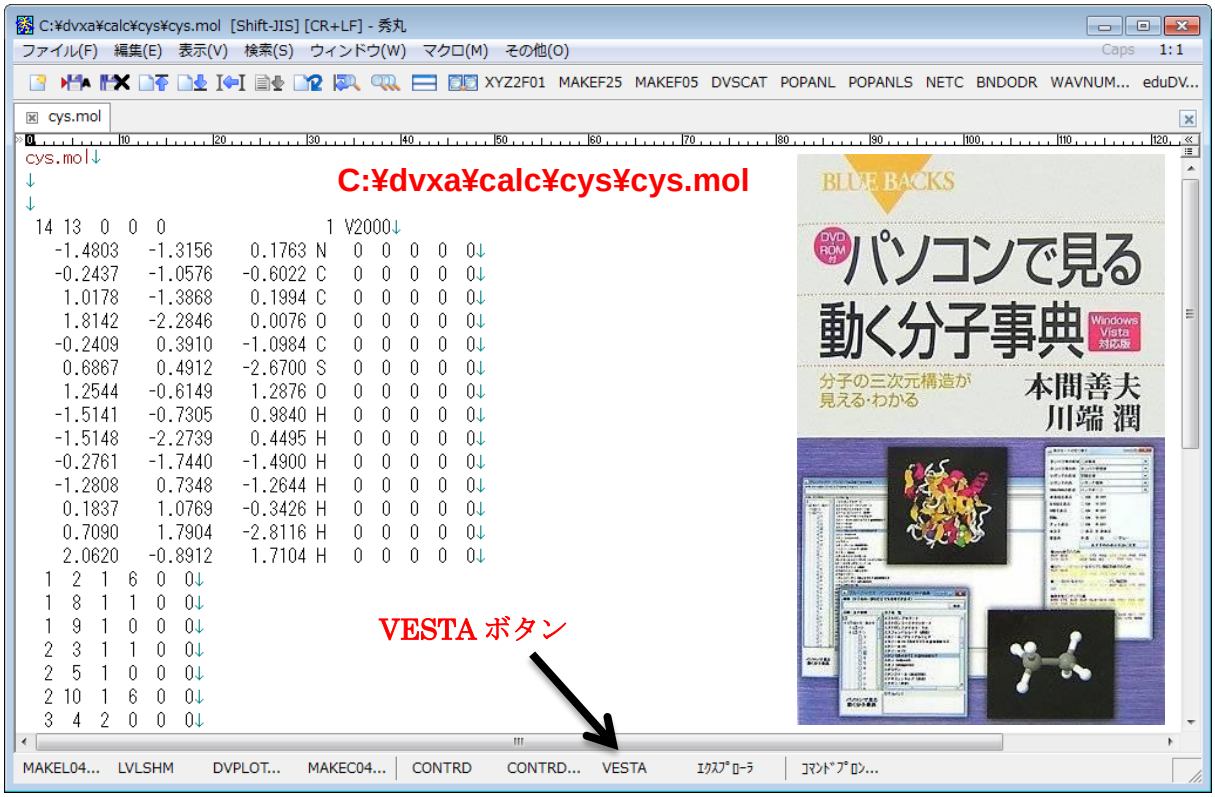
講談社ブルーバックス**(2007/09)**
ISBN−10: 4062575620
ISBN−13: 978−4−06−257562−1

※この書籍に添付されている **DVD−ROM** の原子座標ファイル（***.mol** ファイル）は，**HyperChem** または **Chem3D** に搭載されている **MM2** 計算で構造最適化した座標とのことです.

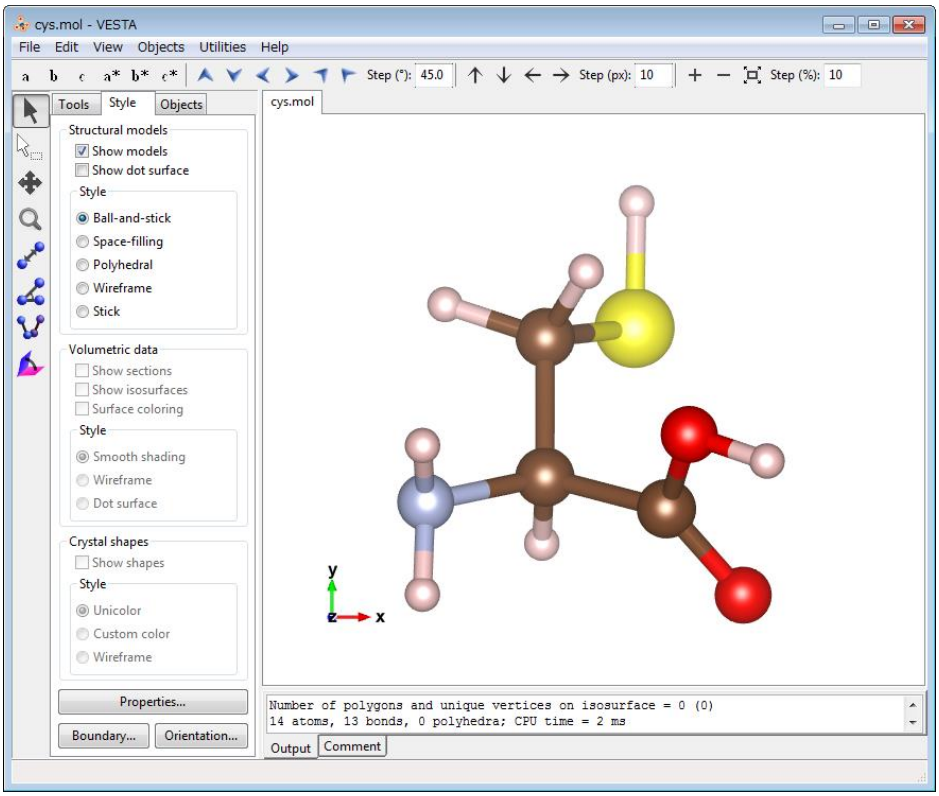
例えば **“パソコンで見る動く分子事典”** 添付 DVD-ROM の **¥res¥jmol¥mol¥cys.mol** を計算してみます.

1．まず **C:¥dvxa¥calc** フォルダ内に新規フォルダを作成し，**cys** という名前をつけます.
C:¥dvxa¥calc¥cys フォルダ内に **¥res¥jmol¥mol¥cys.mol** をコピーします.

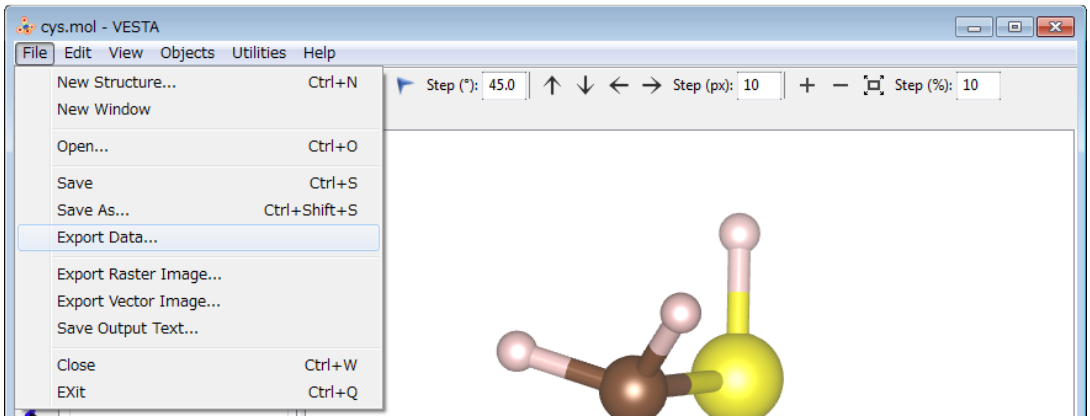
2．秀丸エディタを起動し，**C:¥dvxa¥calc¥cys¥cys.mol** を開きます.



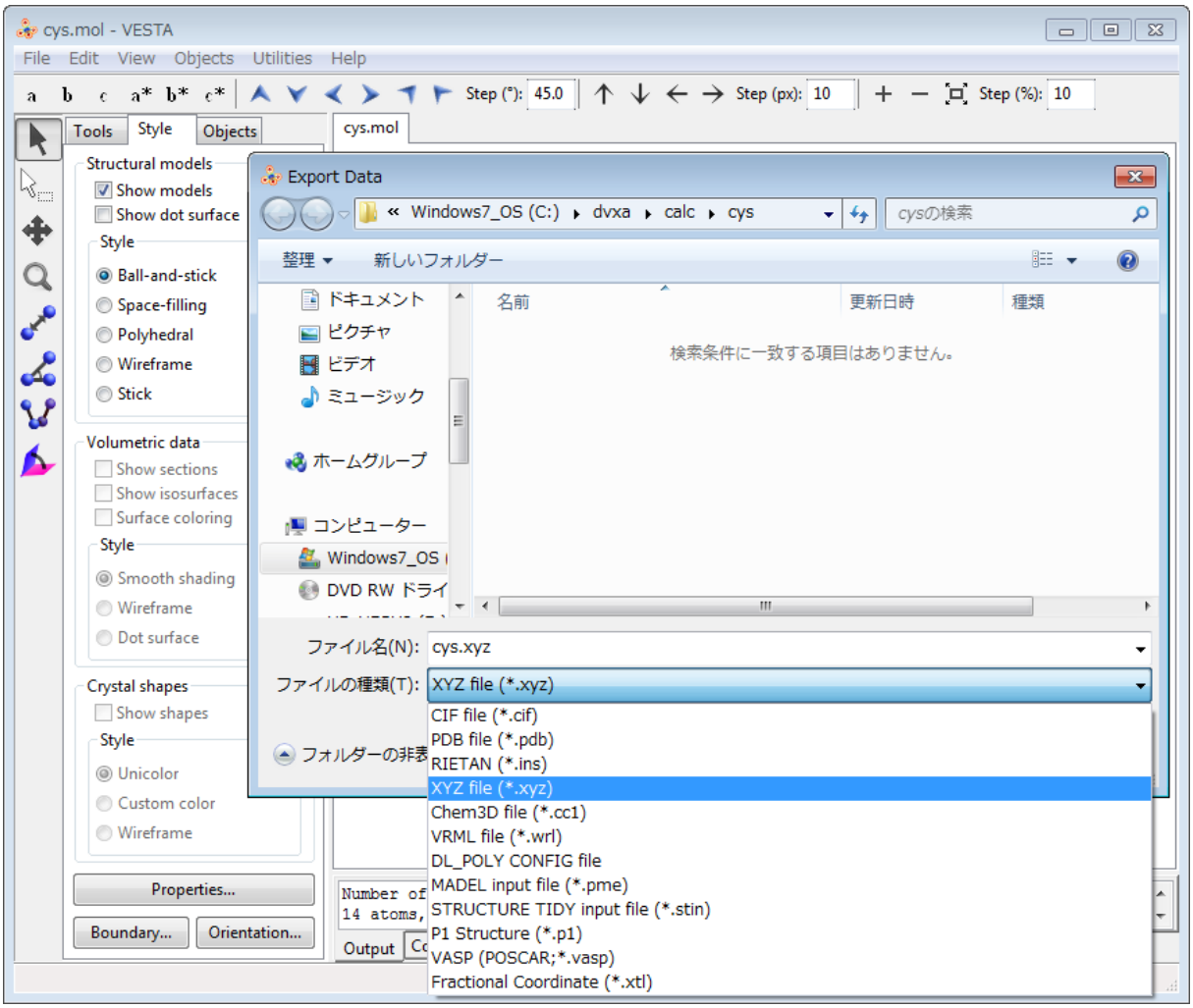
3．【VESTA】ボタンを押します（クリックします）．**VESTA** が立ち上がります.



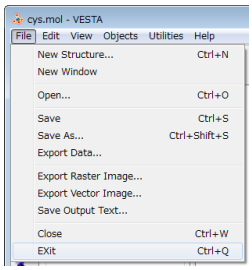
File – Export Data… を選択し，



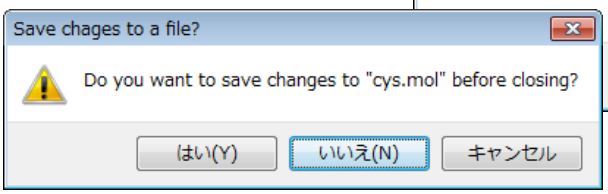
ファイルの種類（T）：XYZ files (*.xyz) として座標データをエクスポートします．

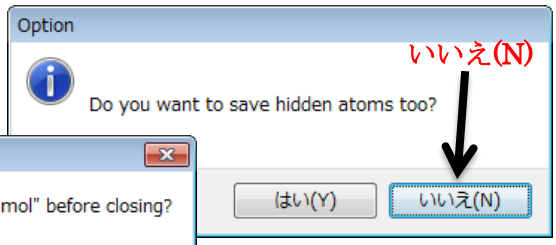


Option: 現在，非表示の原子の座標も保存しますか？
通常【いいえ(N)】を押します→

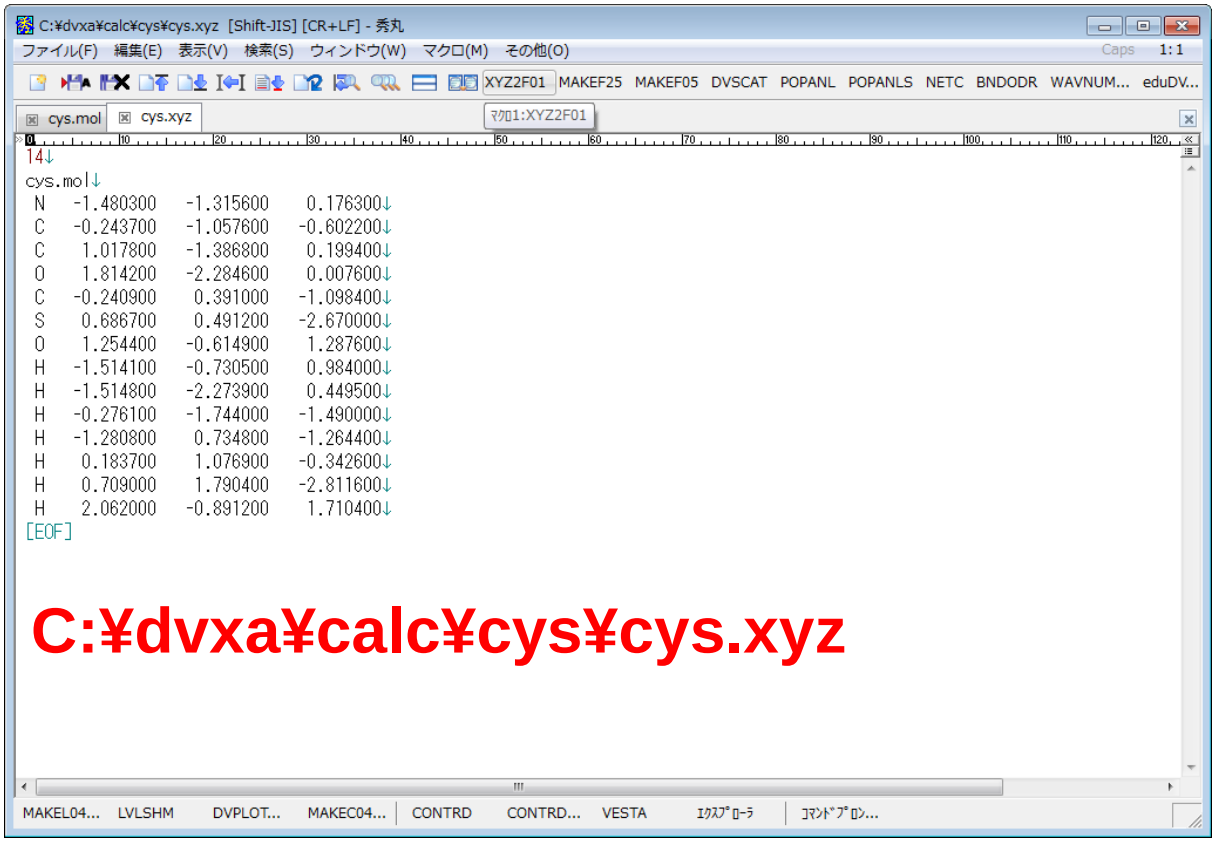


VESTA は終了して下さい．

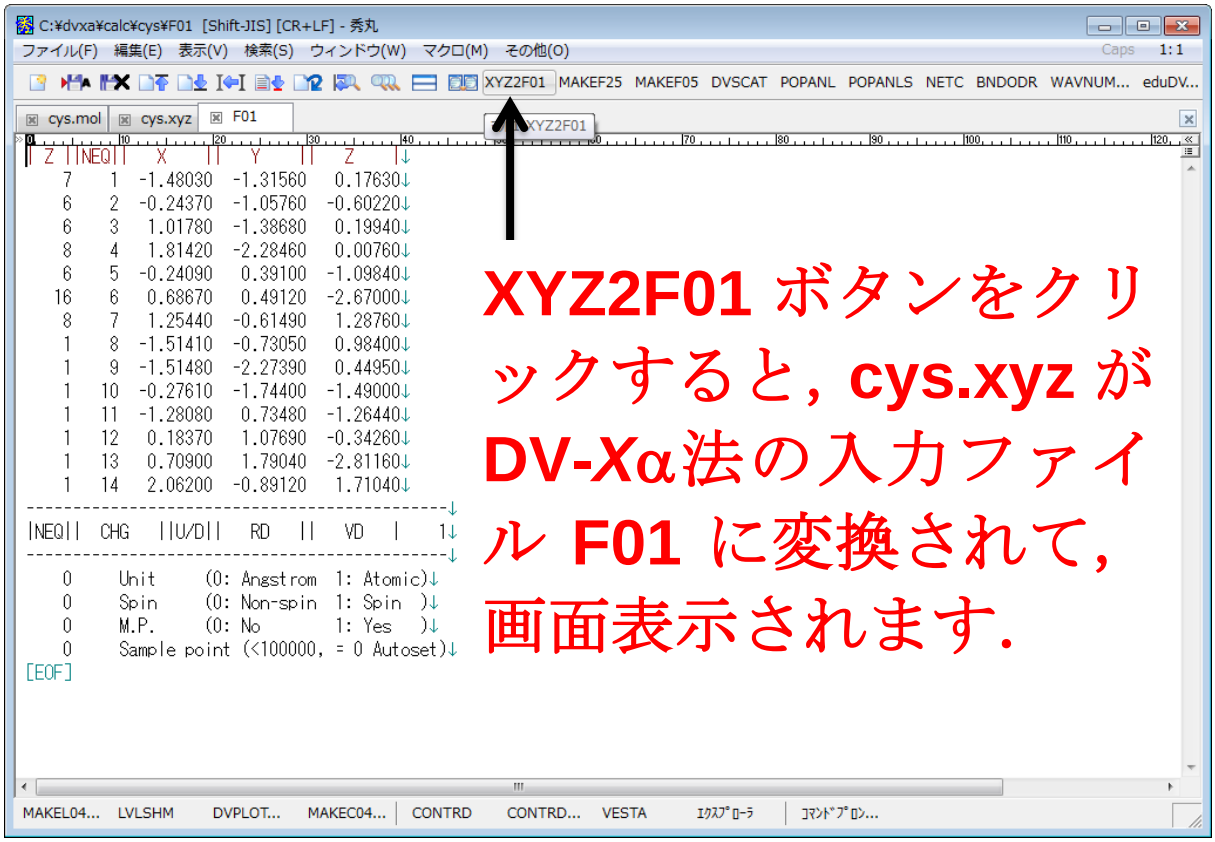




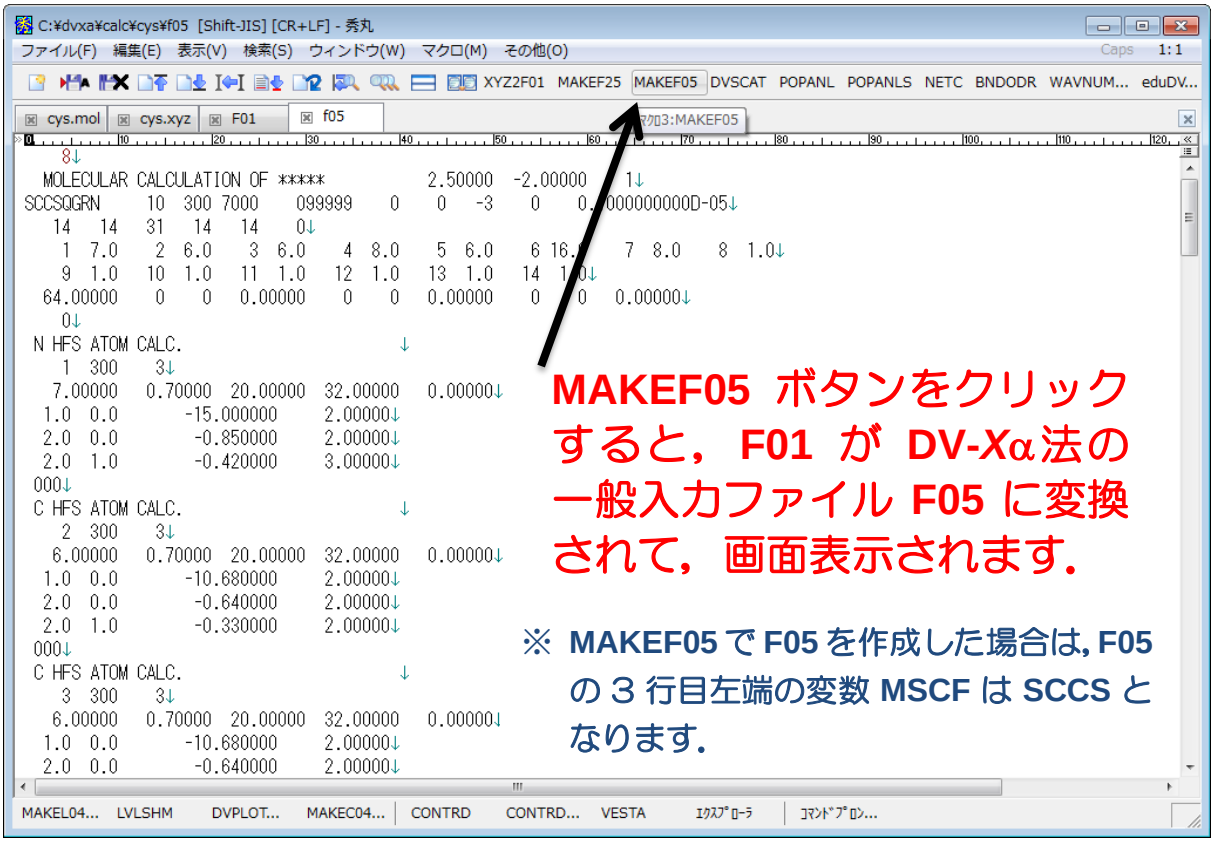
4．秀丸エディタで，さきほど **VESTA** で保存した **C:¥dvxa¥calc¥cys¥cys.xyz を開き**ます．



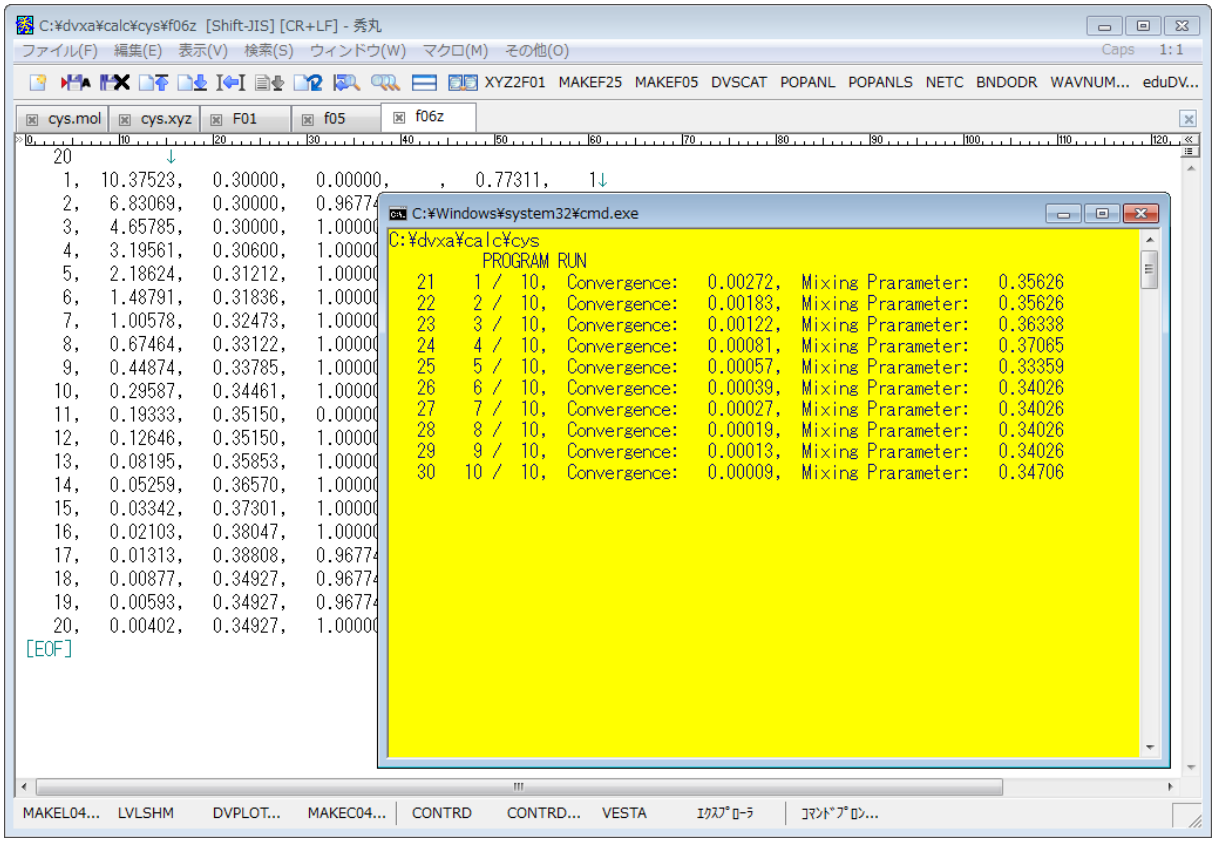
5．【XYZ2F01】ボタンを押します（クリックします）．



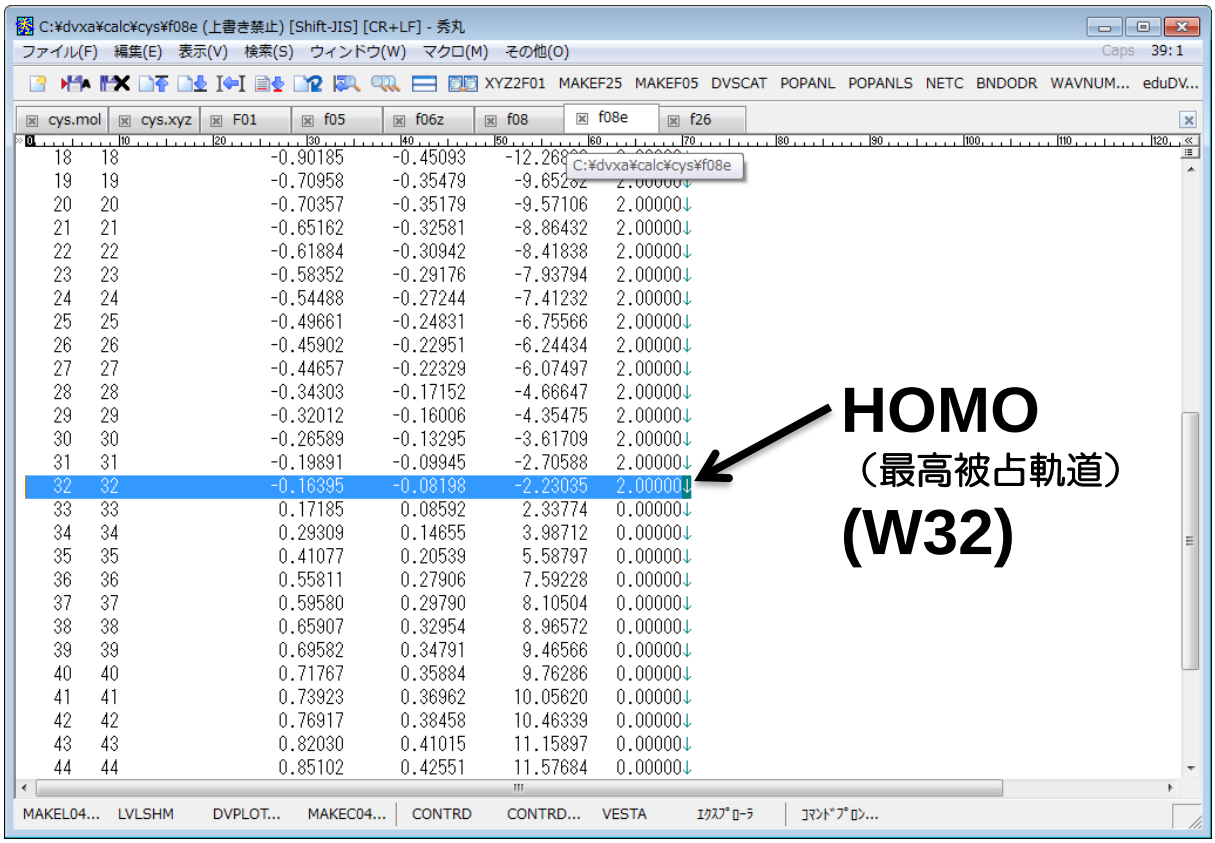
6． 【MAKEF05】ボタンを押します（クリックします）．



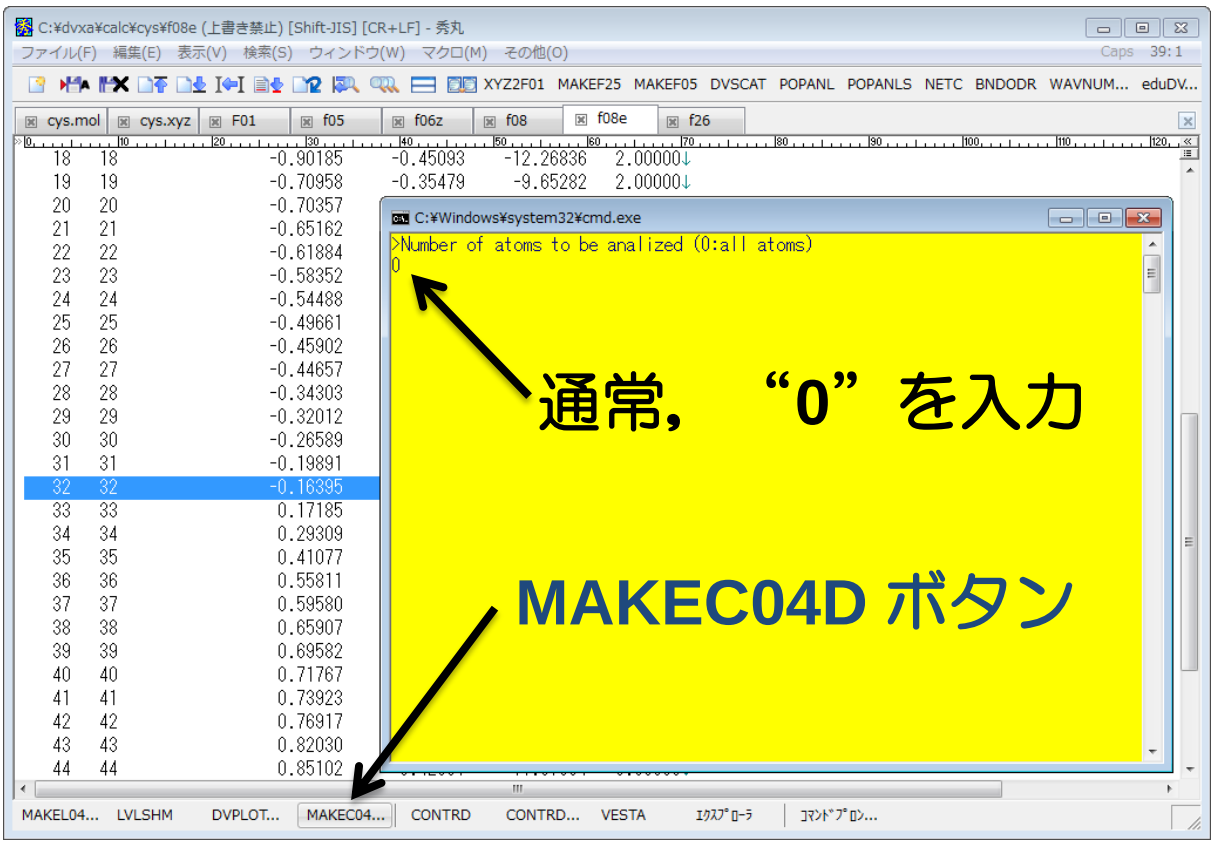
7． 【DVSCAT】ボタンを押して（クリックして）しばらく待ちます（1 分間程度）．セルフコンシステントチャージになる(収束する, converged する)まで SCAT の繰り返し計算が行われます．



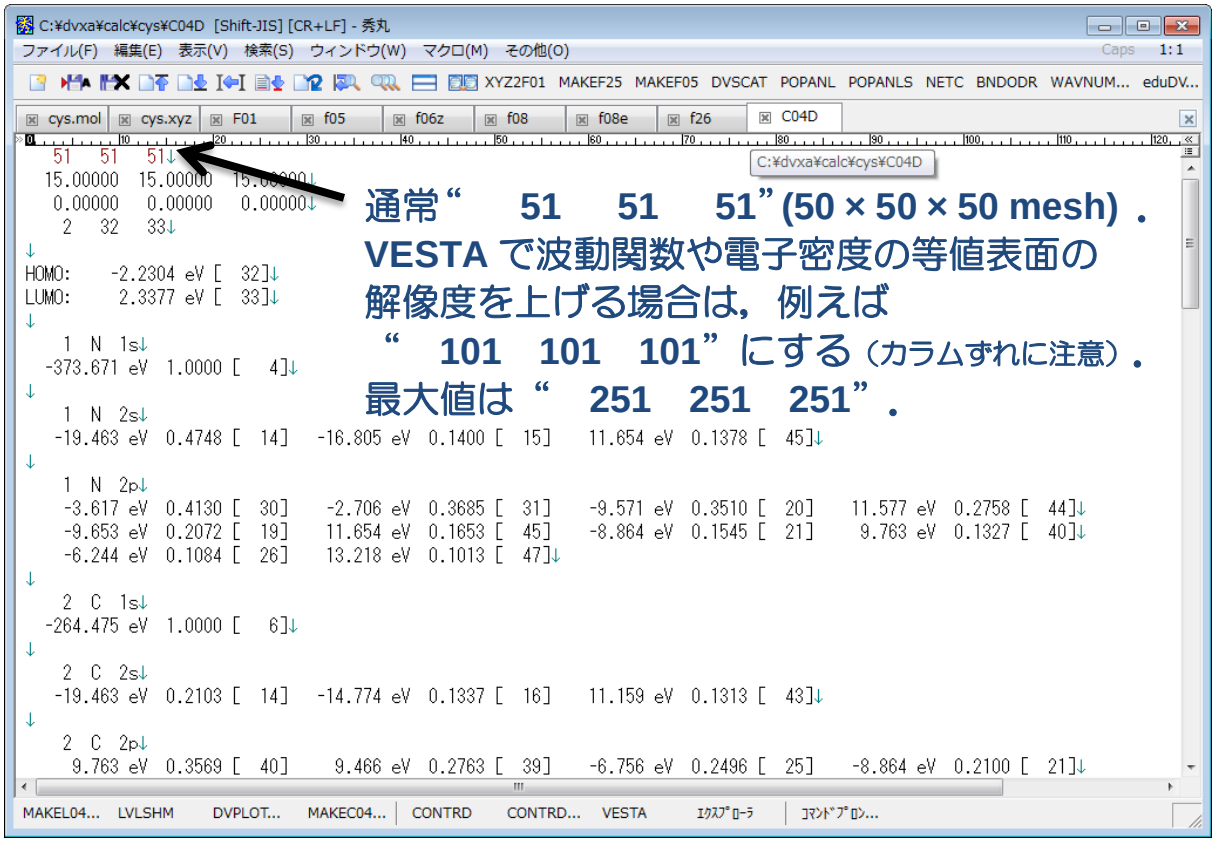
8．SCAT 計算が収束した後，F08E タブをクリックすれば，L−システインの分子軌道計算結果のエネルギー準位（各分子軌道のエネルギー固有値）を見ることができます．



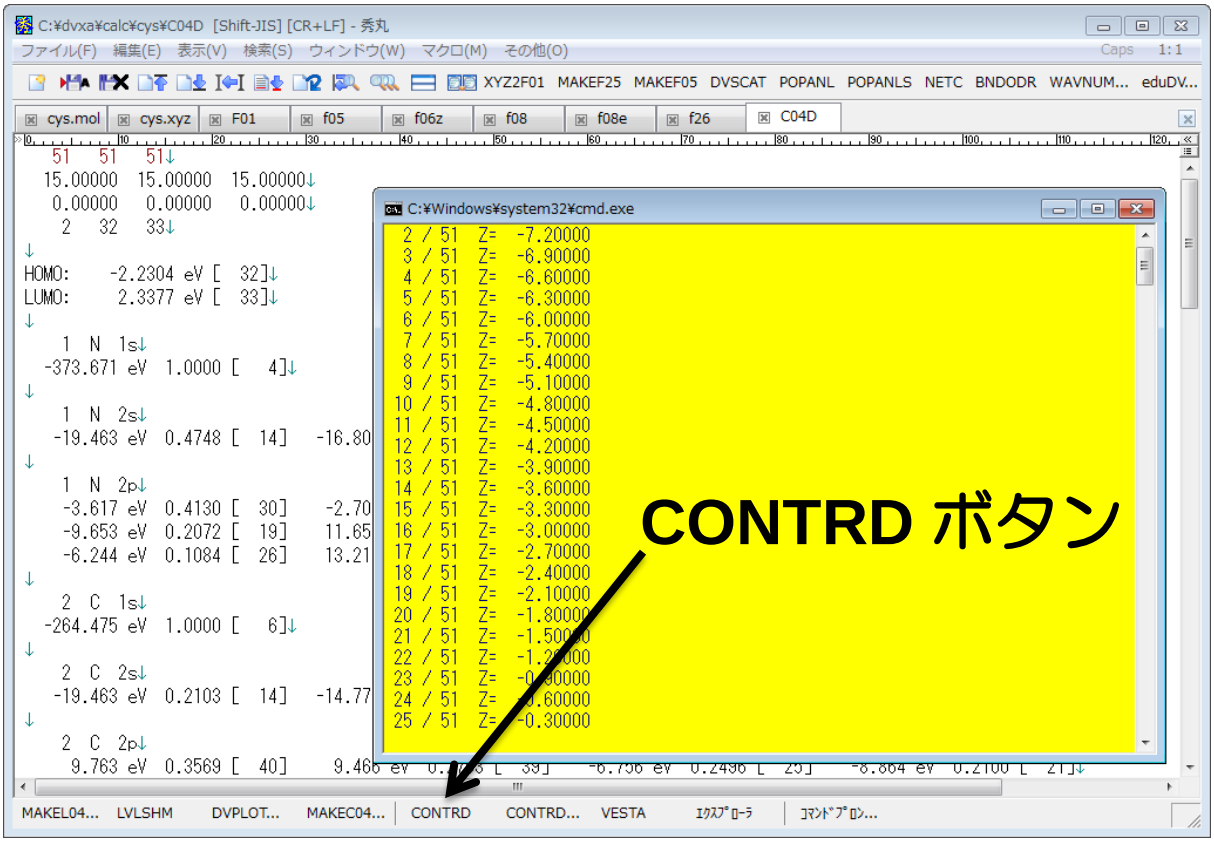
9．【MAKEC04D】ボタンを押します（クリックします）．通常０（ゼロ）を入力します．



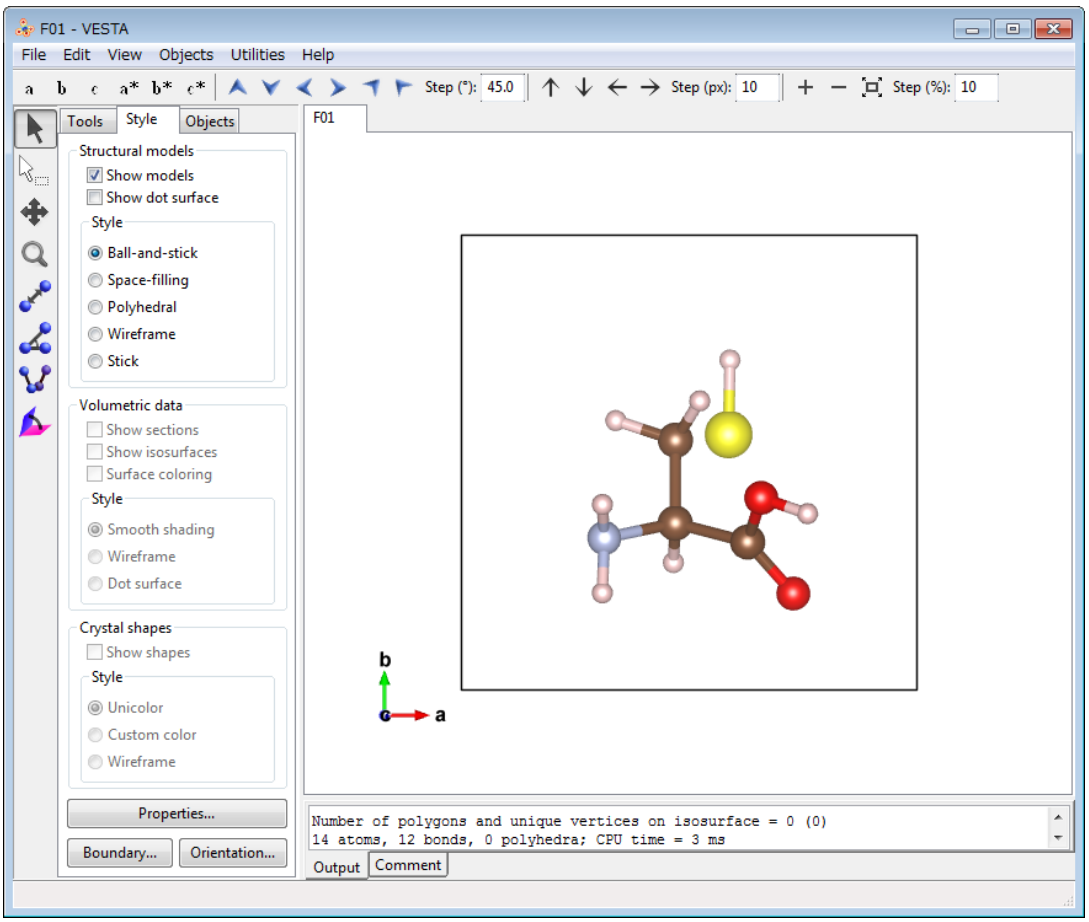
10. HOMO および LUMO が指定された **C04D** が自動作成されます.



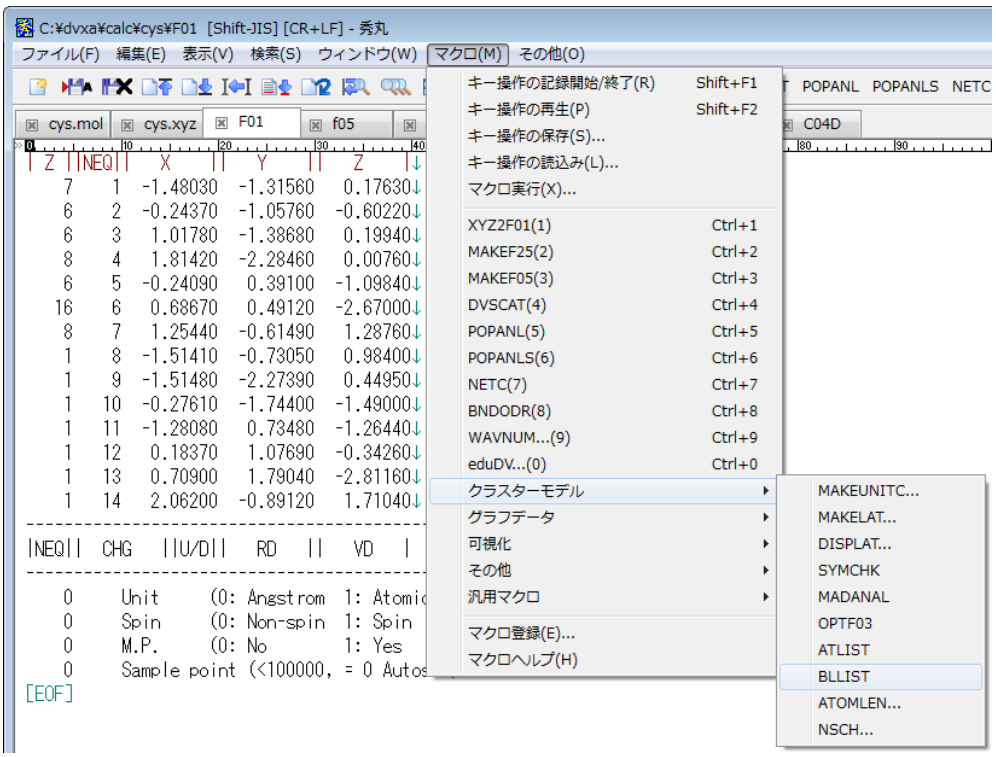
11. 【CONTRD】ボタンを押します（クリックします）.

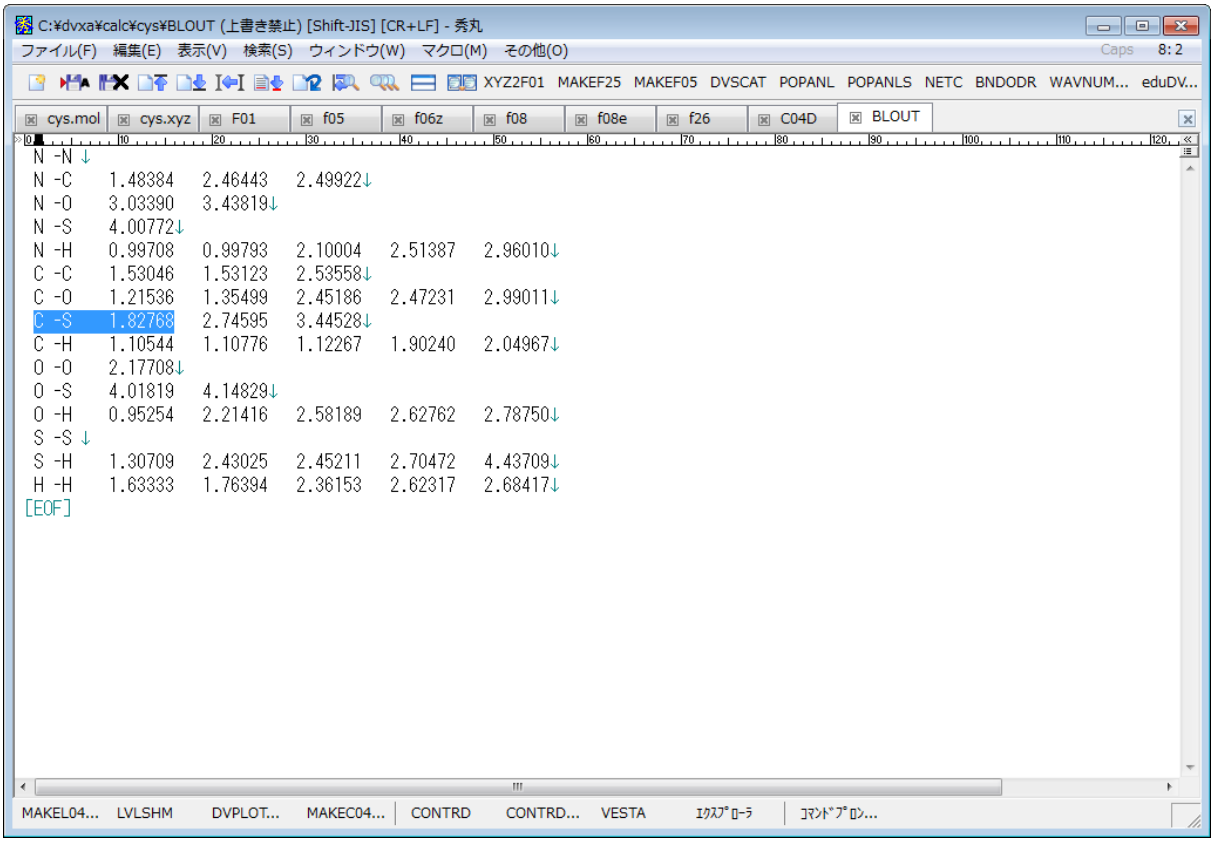


12. F01 タブをクリックしてアクティブにした後，【VESTA】ボタンをクリックします．



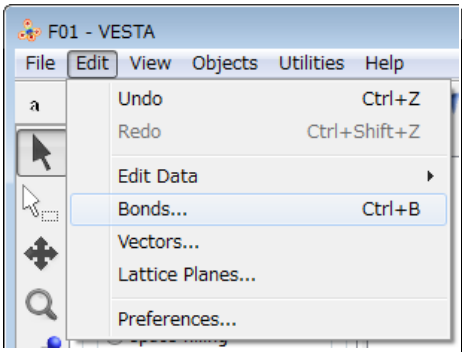
13. 炭素(C)と硫黄(S)の結合の線が描かれていないようです．VESTA では，1.6 Åより短い原子間距離には自動的に結合の線が描かれます．炭素と硫黄の原子間距離は 1.6 Åより長いようです．このような場合は，秀丸エディタに戻り，メニューバーのマクロ(M)−クラスターモデル−BLLIST を実行し，モデル内の主な原子間距離を出力してみます．BLLIST はクラスターモデル中の原子間距離を種類ごとに第 5 近接距離まで表示します．

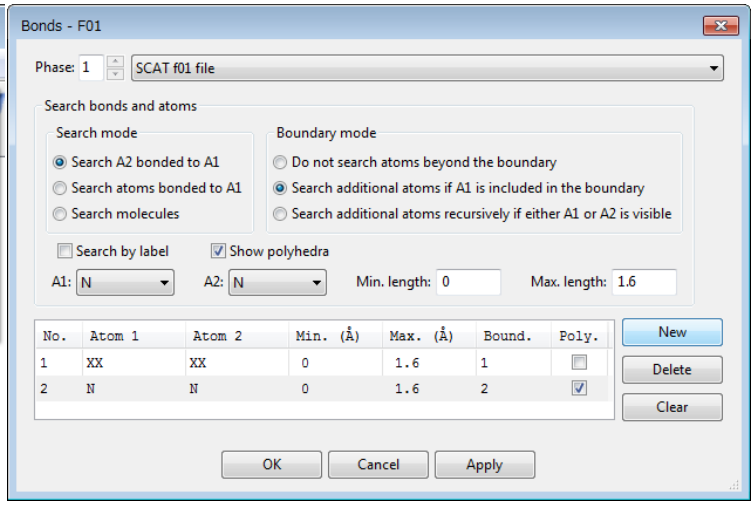




BLLIST の出力を見ると，炭素原子(C)と硫黄原子(S)の原子間距離は 1.82768 Å のようです．

14. VESTA に戻ってメニューバーの Edit−Bonds…(Ctrl+B)で **Bonds** ウィンドウを開きます．

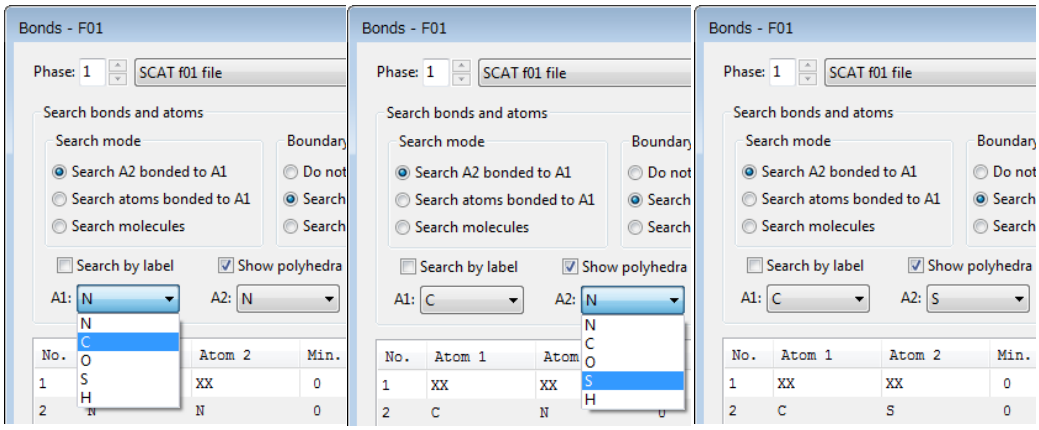




右側の【New】ボタンをクリックして表に No. 2 の行を追加し，No. 2 の行がアクティブになった状態にします．Search mode で◎Search A2 bonded to A1 が選択されていることを確認後，A1: **C**, A2: **S** となるよう，プルダウンメニューで該当する元素記号を選択します．

①A1: **N → C**

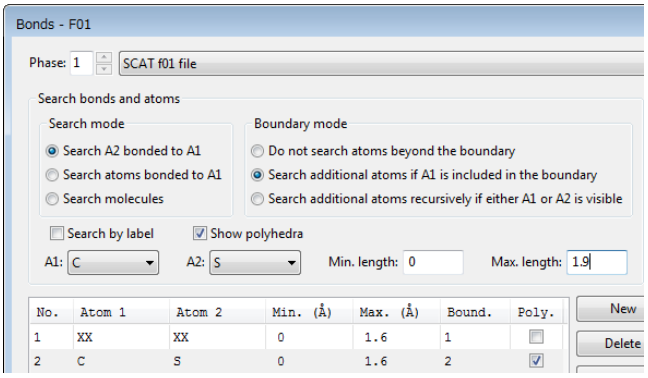
②A2: **N → S**



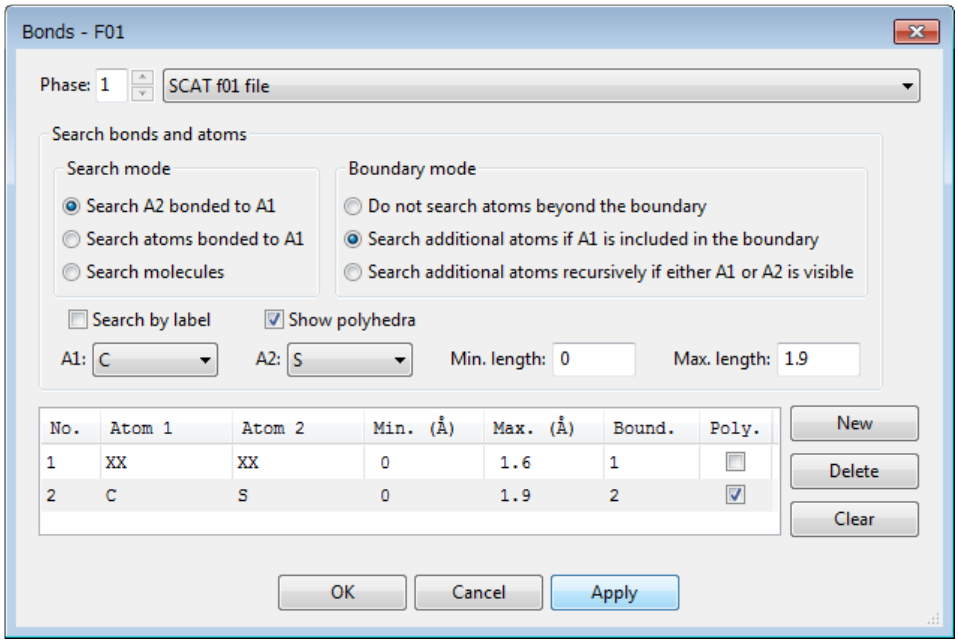
Max. length: を今回は炭素原子(C)と硫黄原子(S)の原子間距離 1.828 Å より少し長めにとって 1.9 Å とします.

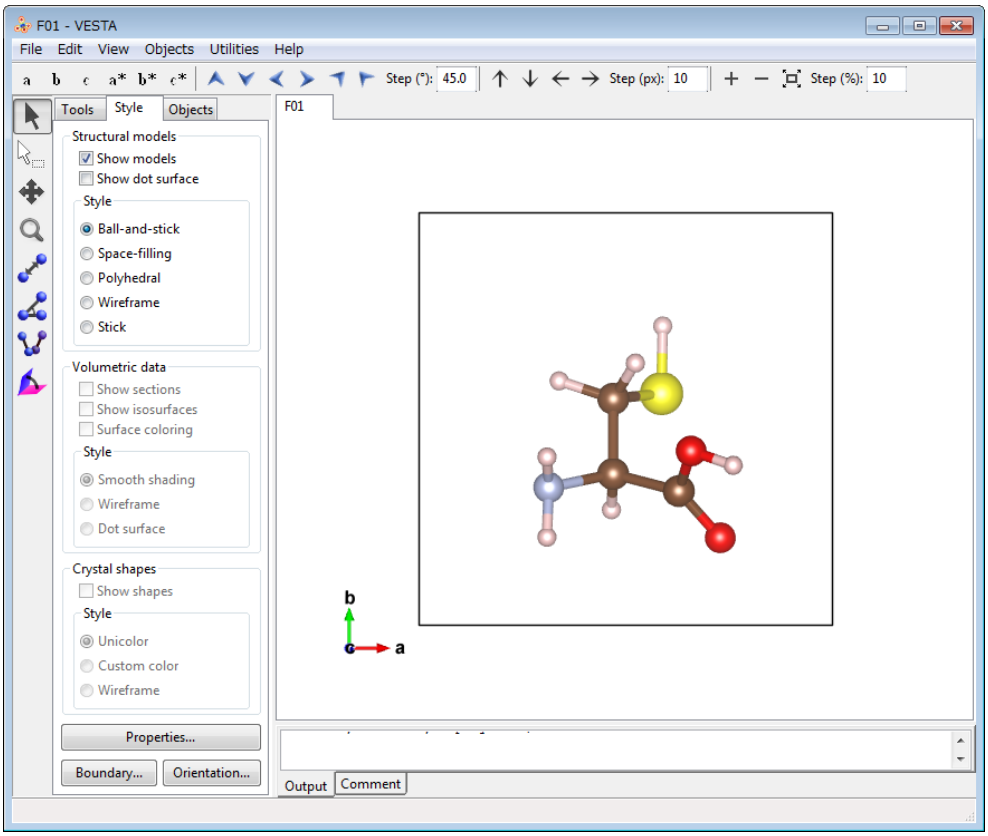
【Apply】ボタンを押せば，炭素原子と硫黄原子の間に，結合の線が描かれます.

No. 1 の行で分子内の 1.6 Å 以内の結合の線が全て描かれ，No. 2 の行で 1.9 Å 以内の炭素－硫黄間の結合が描かれる設定です.



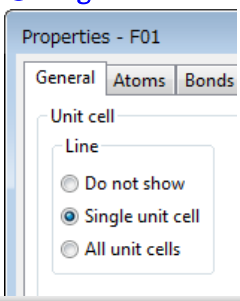
【OK】ボタンを押して，“Bonds”ウィンドウを閉じます.

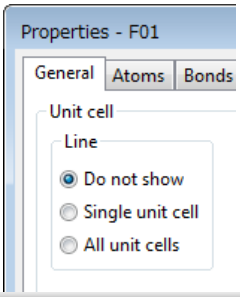




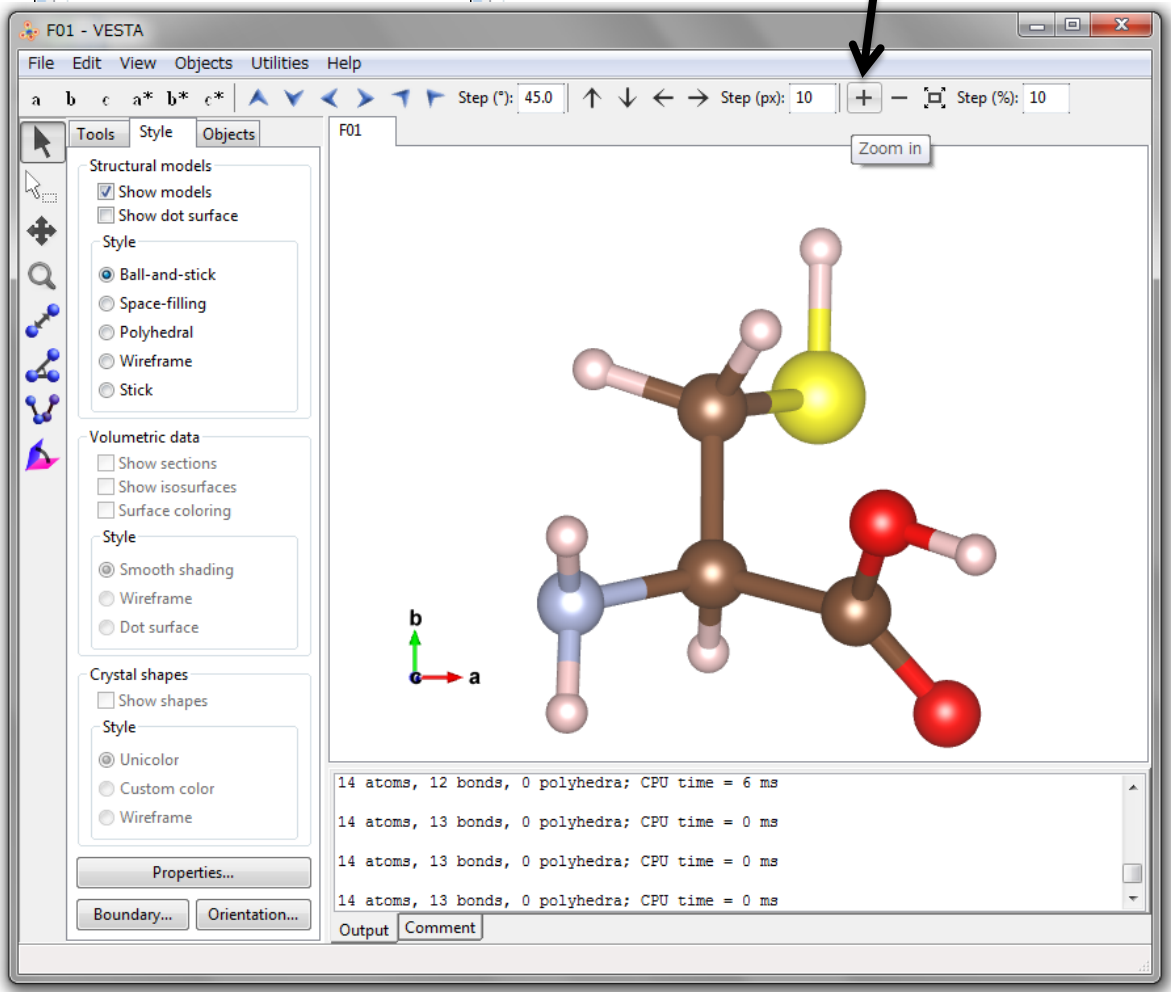
15. 単位格子の枠は MAKECO4D が自動決定した“波動関数，電子密度，静電ポテンシャルを描く範囲”に過ぎませんので，表示しないことにします．【Properties】ボタンを押して **Properties** ウィンドウを表示します．ここの【General】タブをアクティブにし，

◎Single unit cell を ◎Do not show に変更して【OK】を押します．

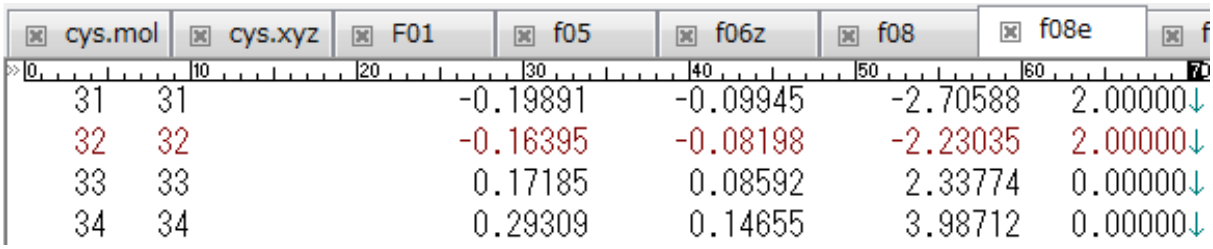




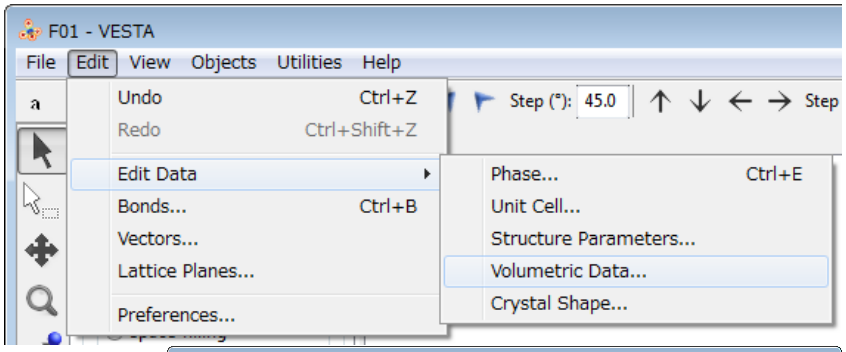
＋ ボタンで適宜分子の大きさを拡大して表示すると見やすくなります．(Zoom in)

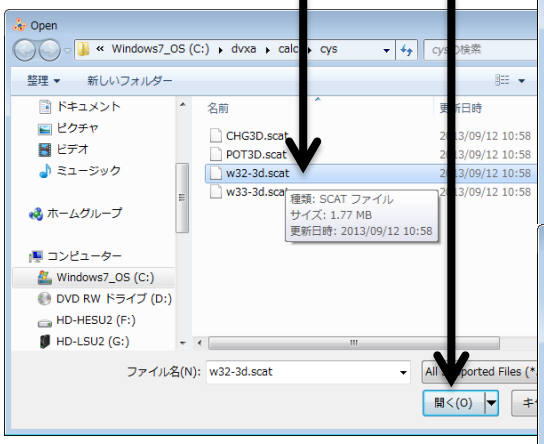


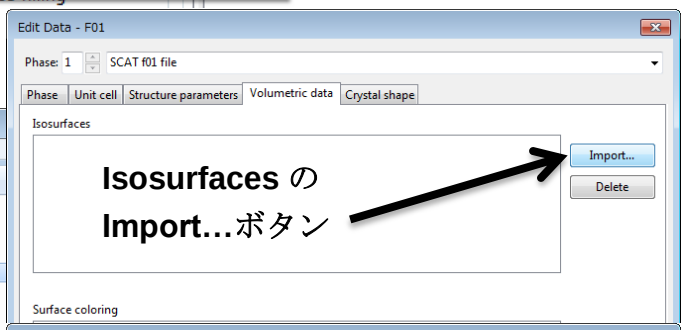
16. 秀丸エディタに戻り，F08E タブをアクティブにして，**HOMO(highest occupied molecular orbital, 最高被占分子軌道)**と **LUMO(lowest unoccupied molecular orbital, 最低空分子軌道)**の名称を確認します．HOMO = 32, LUMO = 33 という名称であることが分かります．



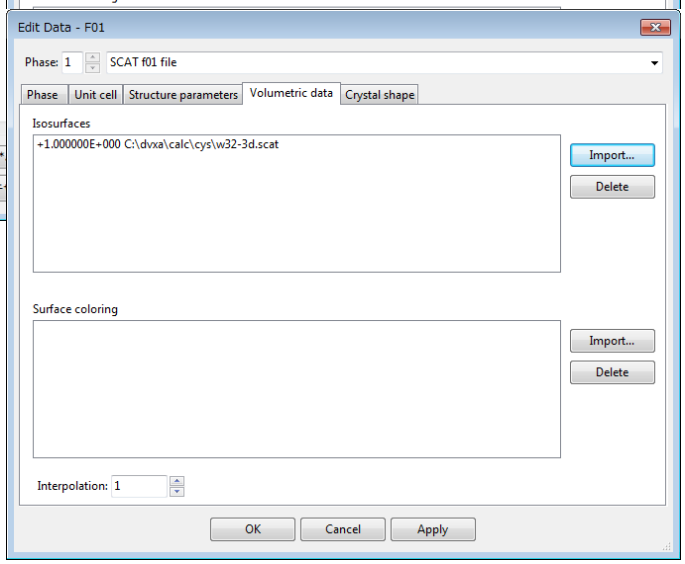
17. VESTA のメニューバーの Edit－Edit Data－Volumetric Data… をクリックし，**Edit Data** ウィンドウを開きます．まず，HOMO の等値表面を三次元可視化します．Isosurfaces の Import… ボタンをクリックして，**HOMO = w32-3d.scat** を選択し，開きます．



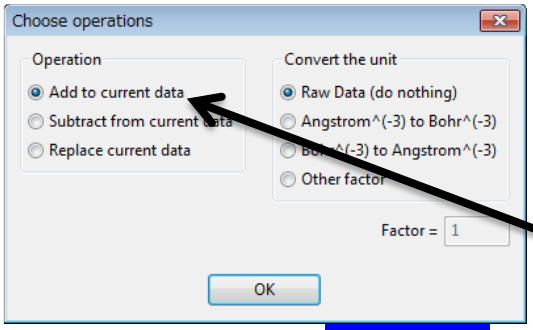




Isosurfaces の Import…ボタン

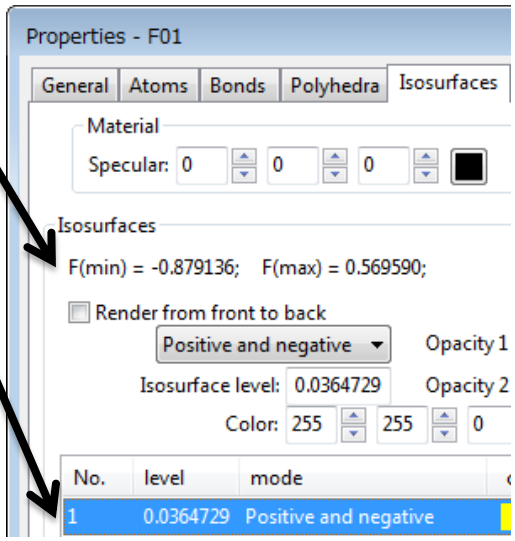


Choose operations ウィンドウが立ち上がります．今回は新規読み込みですので，◎**Add to current data** を選択し，【OK】ボタンをクリックします．



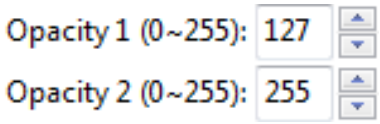
Choose operations ウィンドウの Operation は，“Add to current data”を選択

【OK】ボタンを押して **Edit Data** ウィンドウを閉じます．次に左側サイドパネルの【**Properties**】を押して **Properties** ウィンドウを開き【**Isosurface**】タブをクリックしてアクティブにします．F(min)の箇所を見ると，波動関数の値は**−0.879136～0.569590** の範囲で分布していることが分かります．下の表の No. 1（VESTA では複数の等値表面が描けるので，その 1 番目の等値表面という意味）をクリックします．すると，現在グラフィックエリアに表示されている HOMO の等値表面は，**−0.0364729**（黄色の表面）と **0.0364729** の値（青色の表面）値で描かれていることが分かります(mode は“Positive and negative”).

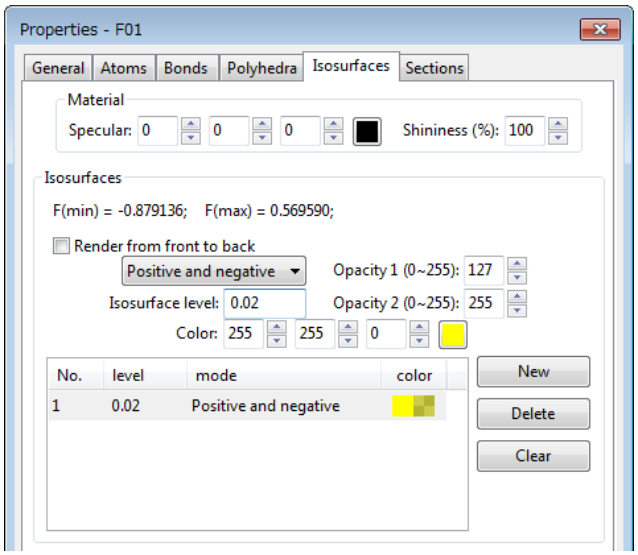


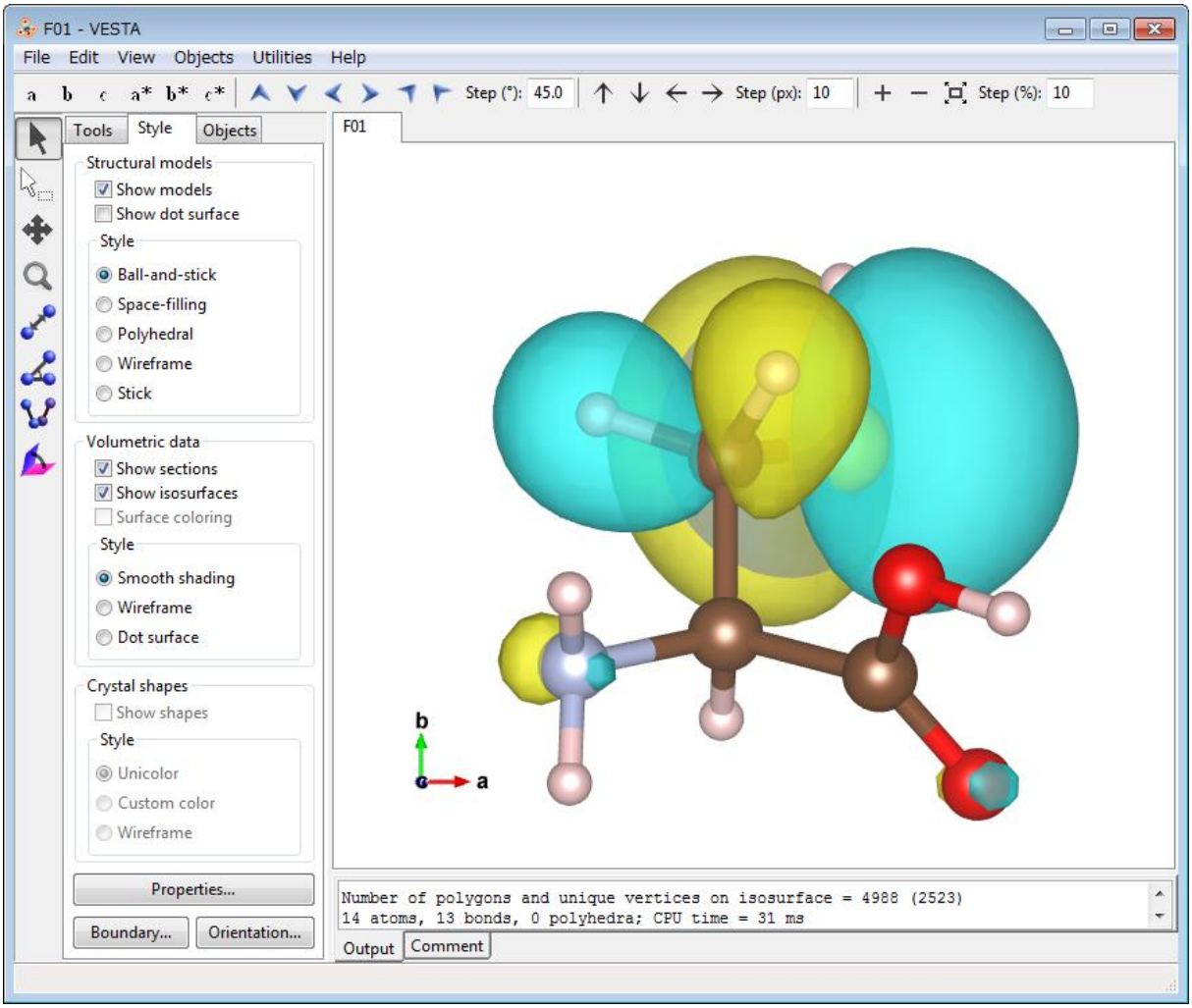
この等値表面の値(level)をもっと大きく設定すれば波動関数は小さく，小さく設定すれば大きく描かれます. 複数の波動関数を描き, 波動関数の広がりを比較したい場合は, 例えば, **Isosurface level: 0.02** と，等値表面の値(level)を固定すると良いでしょう.

その他 **Opacity**(不透明度)の値は，最初は **Opacity 1** (0～255)：127, **Opacity 2** (0～255)：255 となっており，等値表面内の原子の棒球モデルが程よく見える設定になっています.

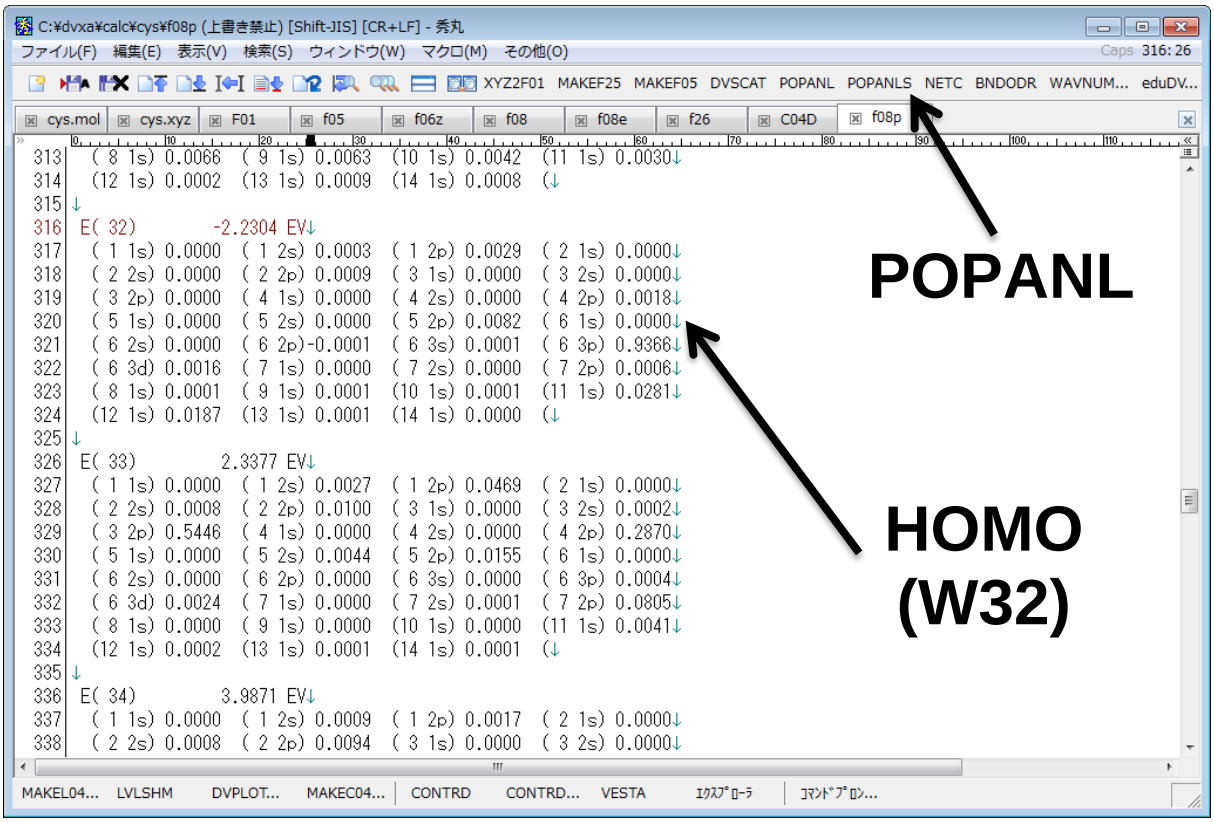


Opacity 1 は画面に対して平行なポリゴンの不透明度，**Opacity 2** は画面に対して垂直なポリゴンの不透明度です．**Opacity 1** は小さめに **Opacity 2** は大きめに値を設定してやると，等値表面の内部はよく透けて見え，かつ等値表面の輪郭はぼけずにくっきりとします．しかし分子構造に奥行きがあって等値表面の輪郭もある程度ぼかした方がクラスターモデルの形状が把握しやすい場合もあるので，**Opasity 1** と **Opacity 2** の値は適宜 **VESTA** のグラフィックエリアをモニターしながら変更してみると良いでしょう.





18. 秀丸エディタに戻り，メニューバーの【POPANL】ボタンを押すと，全分子軌道について，マリケン(Robert Sanderson Mulliken)のポピュレーション解析が行われます．**POPANL** の出力ファイル **F08P** で HOMO = E(32) の箇所を見てみると，NEQ(原子種の通し番号) = 6 の原子の 3p 軌道が 93.66 %，NEQ = 11 の原子の 1s 軌道が 2.81 %，NEQ = 12 の原子の 1s 軌道が 1.87 %，あとは NEQ = 5 の原子の 2p 軌道が 8.2 %，NEQ = 1 の原子の 2p 軌道が 2.9 %，NEQ = 4 の原子の 2p 軌道が 1.8 %，NEQ = 6 の原子の 3d 軌道が 1.6 %，NEQ = 2 の原子の 2p 軌道が 0.9 %，NEQ = 7 の原子の 2p 軌道が 0.6 %といった内訳であることが分かります．NEQ の番号がどの原子であるかは，秀丸エディタのタブ **F01** をアクティブにして見ればすぐに分かります．



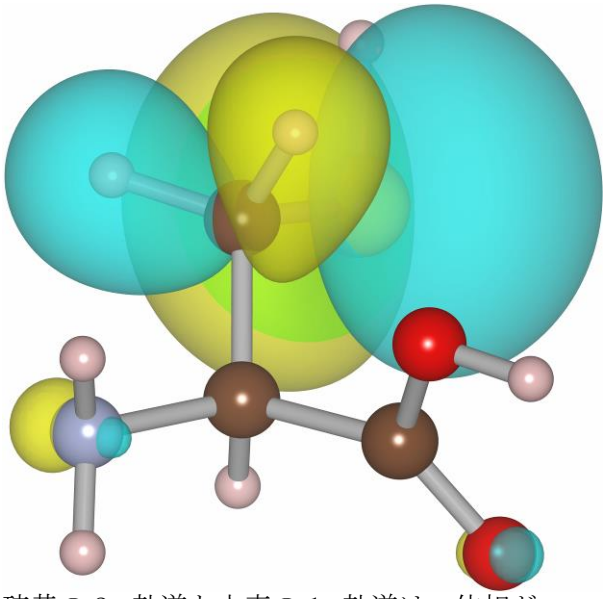
F01 を見ながら HOMO の構成原子軌道の割合をまとめてみると，

HOMO　E(32)，

エネルギー固有値 = −2.2304 eV

NEQ	元素名	原子軌道名	割合
6	硫黄	3p 軌道	93.66 %
11	水素	1s 軌道	2.81 %
12	水素	1s 軌道	1.87 %
5	炭素	2p 軌道	0.82 %

ここまでの小計が 99.16 %ですから，HOMO はシステインのチオール基 SH の硫黄の 3p 軌道が約 93.7 %，チオール基に隣接するメチレン基-CH_2-の炭素 2p 軌道と水素 1s 軌道からなる混成軌道が 5.5 %といったところでしょうか．



C:¥dvxa¥calc¥cys¥F01 [Shift-JIS] [CR+LF] - 秀丸

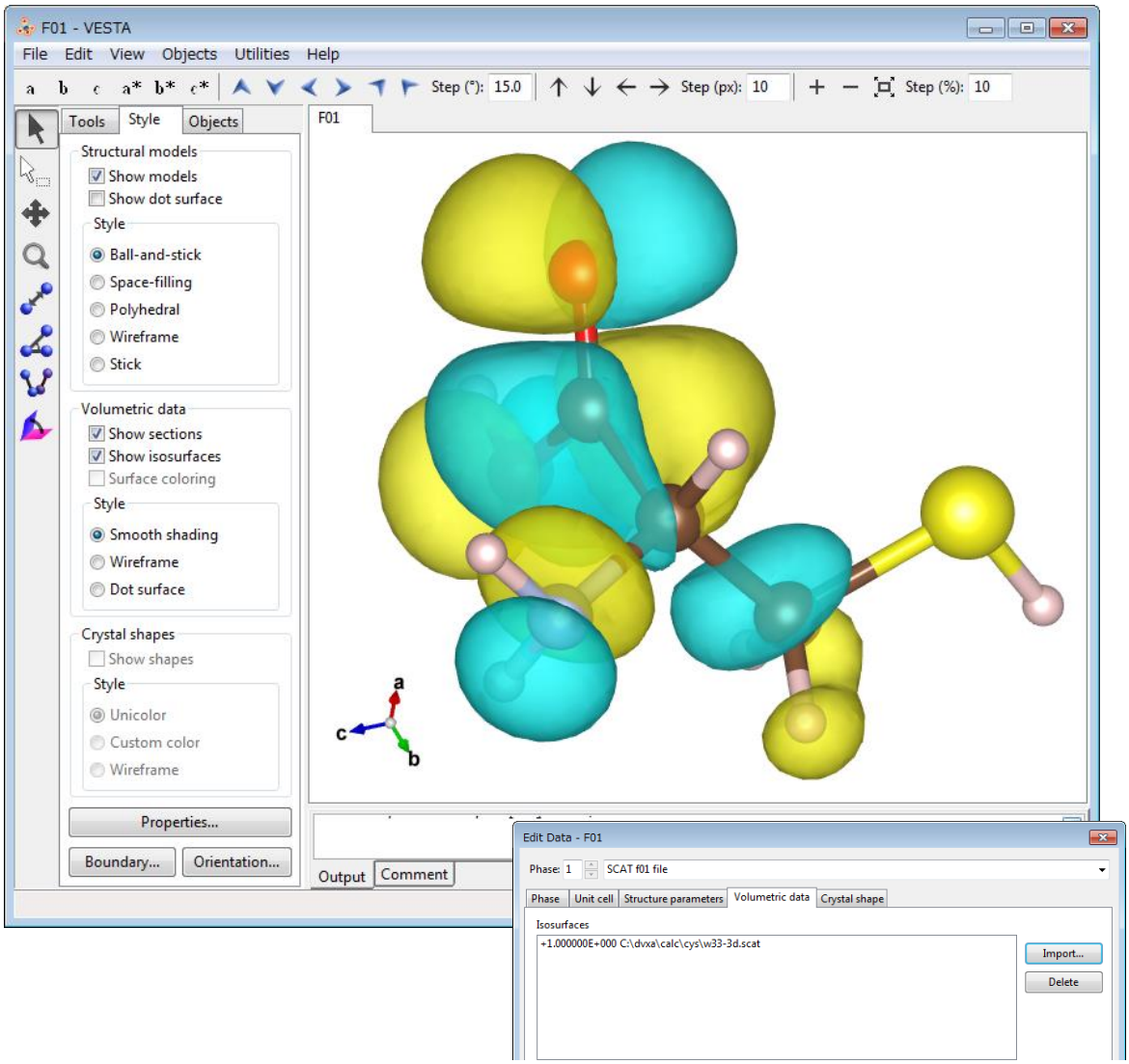
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 検索(S) ウィンドウ(W) マクロ

cys.mol | cys.xyz | F01 | f05 | f06z

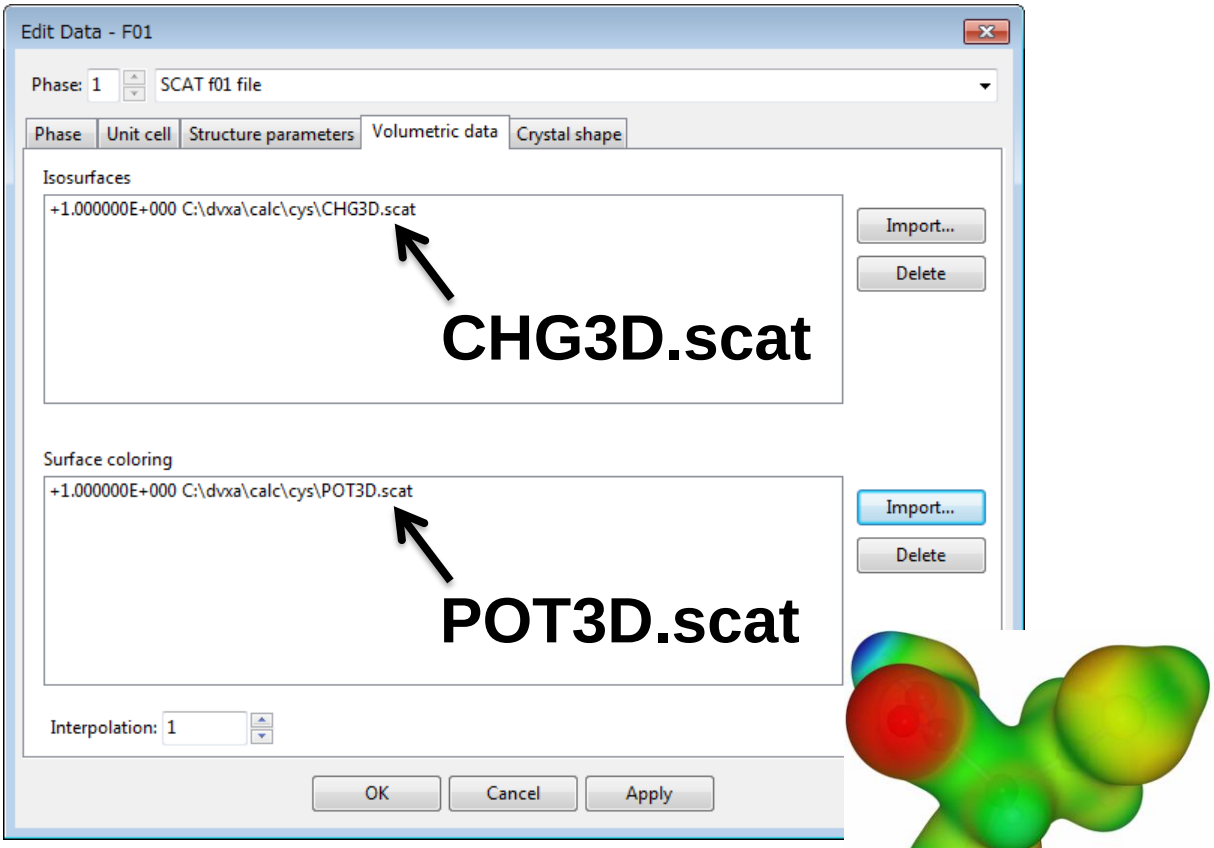
	Z	NEQ	X	Y	Z
2	7	1	-1.48030	-1.31560	0.17630
3	6	2	-0.24370	-1.05760	-0.60220
4	6	3	1.01780	-1.38680	0.19940
5	8	4	1.81420	-2.28460	0.00760
6	6	5	-0.24090	0.39100	-1.09840
7	16	6	0.68670	0.49120	-2.67000
8	8	7	1.25440	-0.61490	1.28760
9	1	8	-1.51410	-0.73050	0.98400
10	1	9	-1.51480	-2.27390	0.44950
11	1	10	-0.27610	-1.74400	-1.49000
12	1	11	-1.28080	0.73480	-1.26440
13	1	12	0.18370	1.07690	-0.34260
14	1	13	0.70900	1.79040	-2.81160
15	1	14	2.06200	-0.89120	1.71040

硫黄の 3p 軌道と水素の 1s 軌道は，位相が異なり反結合性だということも分かります．

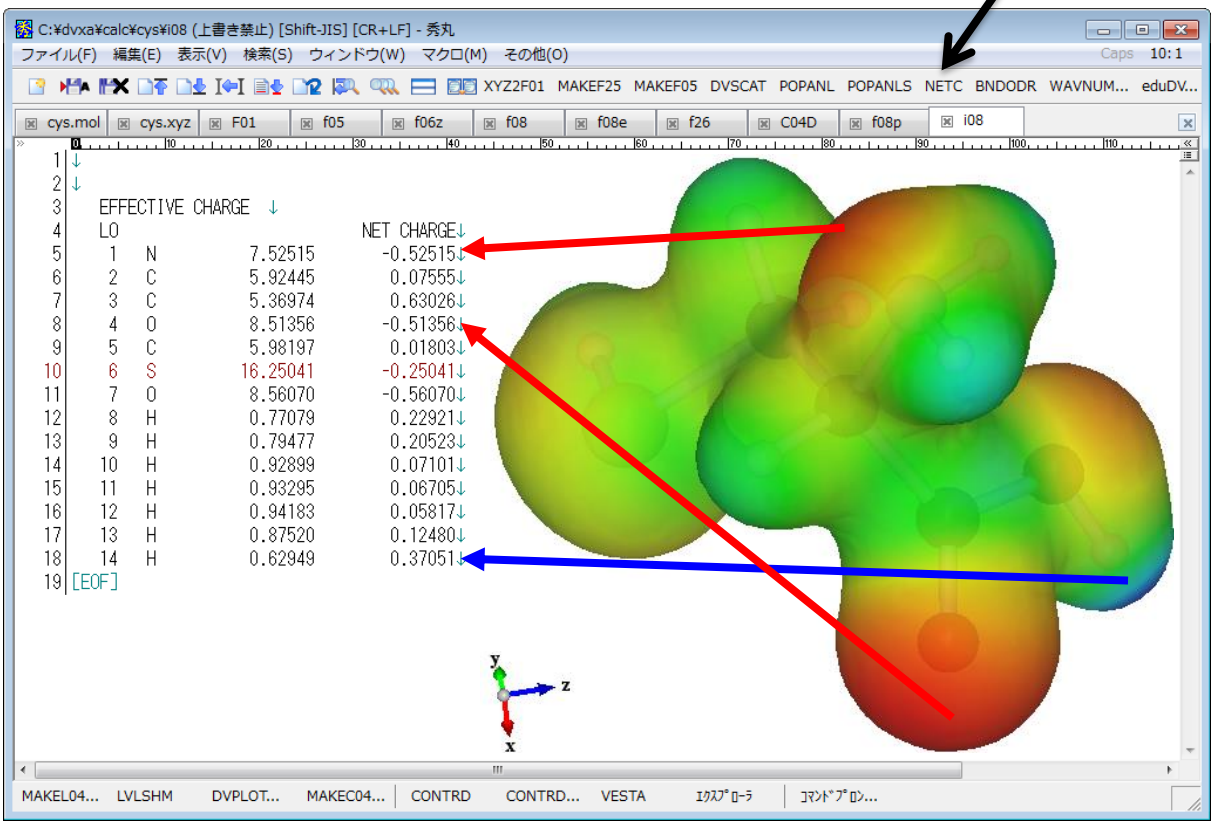
19. 同様に LUMO を描いてみると以下のような図になります．



20. 静電ポテンシャルマップはこのようになりました（Isosurfave level = 0.02）.

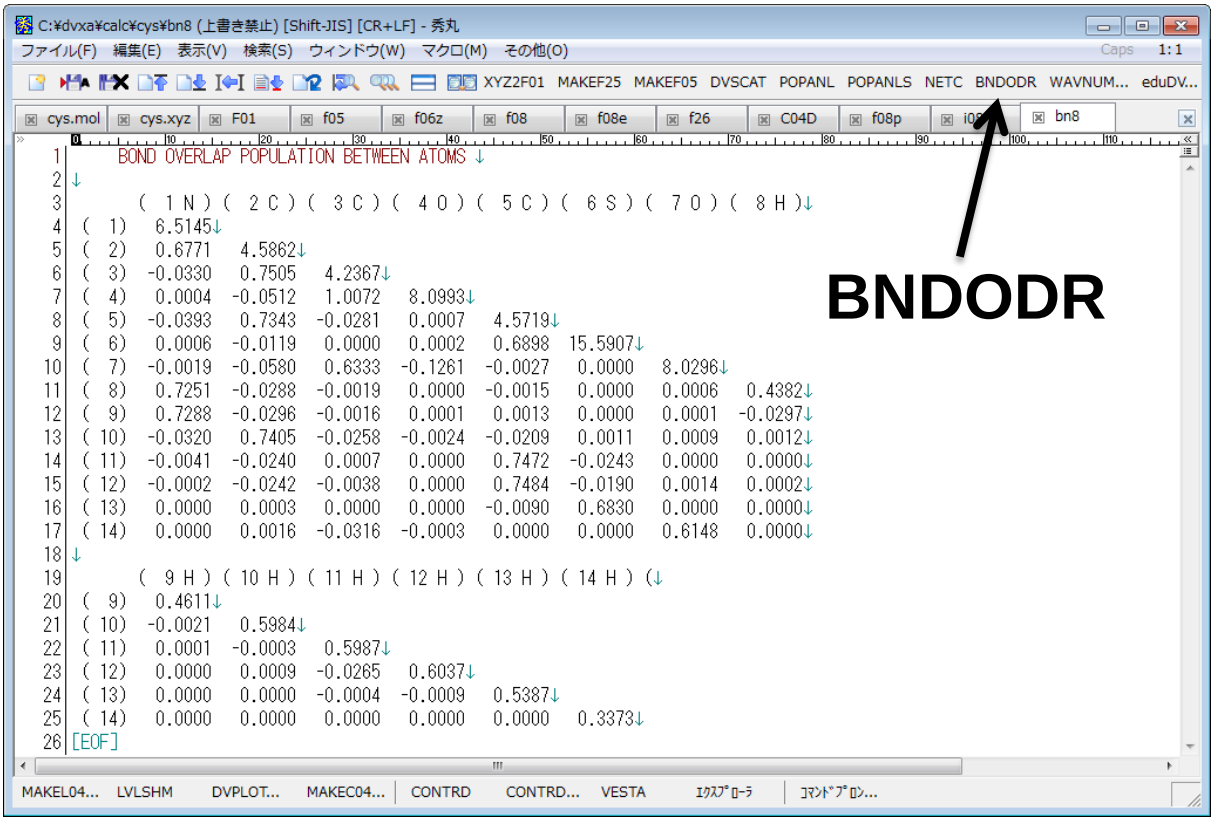


21. 秀丸エディタに戻り，メニューバーの【NETC】ボタンを押すと，各原子の有効電荷（Net Charge）を求めて表示してくれます.



プログラム **NETC** の計算結果ファイル **I08** を見ると，アミノ基の窒素原子およびカルボキシ基の酸素原子にかなり電子が偏っていることが分かります．チオール基の硫黄原子もどちらかといえばマイナスに偏っていますが，アミノ基の窒素原子やカルボキシ基の酸素原子に比べればその程度は半分程度です．これはさきほどで見た静電ポテンシャルマップ（等電子密度表面に静電ポテンシャルの大小で彩色した図）の傾向と完全に一致しています．静電ポテンシャルマップでは，赤いところの原子は負の電荷，青いところの原子は正の電荷の傾向があることを示しています．

22. メニューバーの【BNDODR】ボタンを押すと，各原子間の有効共有結合電荷（Bond Overlap Population）を求めて表示してくれます．




```
    BOND OVERLAP POPULATION BETWEEN ATOMS ↓
↓
        ( 1 N )( 2 C )( 3 C )( 4 O )( 5 C )( 6 S )( 7 O )( 8 H )↓
( 1)   6.5145↓
( 2)   0.6771   4.5862↓
( 3)  -0.0330   0.7505   4.2367↓
( 4)   0.0004  -0.0512   1.0072   8.0993↓
( 5)  -0.0393   0.7343  -0.0281   0.0007   4.5719↓
( 6)   0.0006  -0.0119   0.0000   0.0002   0.6898  15.5907↓
( 7)  -0.0019  -0.0580   0.6333  -0.1261  -0.0027   0.0000   8.0296↓
( 8)   0.7251  -0.0288  -0.0019   0.0000  -0.0015   0.0000   0.0006   0.4382↓
( 9)   0.7288  -0.0296  -0.0016   0.0001   0.0013   0.0000   0.0001  -0.0297↓
( 10)  -0.0320   0.7405  -0.0258  -0.0024  -0.0209   0.0011   0.0009   0.0012↓
( 11)  -0.0041  -0.0240   0.0007   0.0000   0.7472  -0.0243   0.0000   0.0000↓
( 12)  -0.0002  -0.0242  -0.0038   0.0000   0.7484  -0.0190   0.0014   0.0002↓
( 13)   0.0000   0.0003   0.0000   0.0000  -0.0090   0.6830   0.0000   0.0000↓
( 14)   0.0000   0.0016  -0.0316  -0.0003   0.0000   0.0000   0.6148   0.0000↓
↓
        ( 9 H )( 10 H )( 11 H )( 12 H )( 13 H )( 14 H )(↓
( 9)   0.4611↓
( 10)  -0.0021   0.5984↓
( 11)   0.0001  -0.0003   0.5987↓
( 12)   0.0000   0.0009  -0.0265   0.6037↓
( 13)   0.0000   0.0000  -0.0004  -0.0009   0.5387↓
( 14)   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000   0.0000   0.3373↓
[EOF]
```

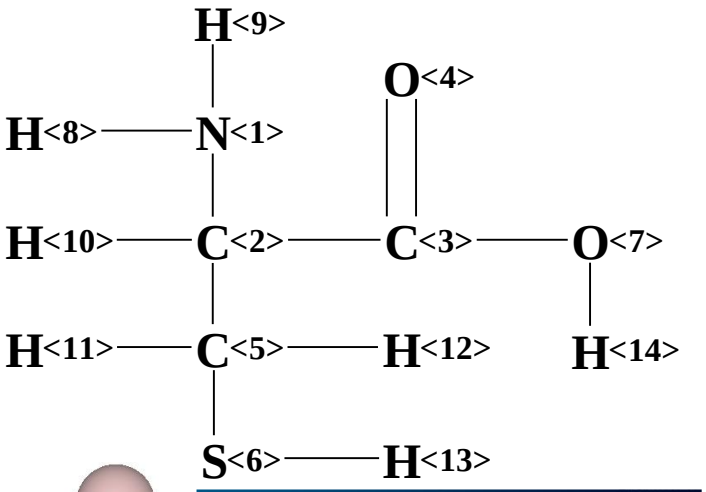
BN8 はプリンタで印刷して数字の大きな箇所を蛍光ペン等でマーキングすると，どの原子とどの原子の間にどれぐらい強い結合があるのかがよく分かります．共有結合性判定ができるのです．

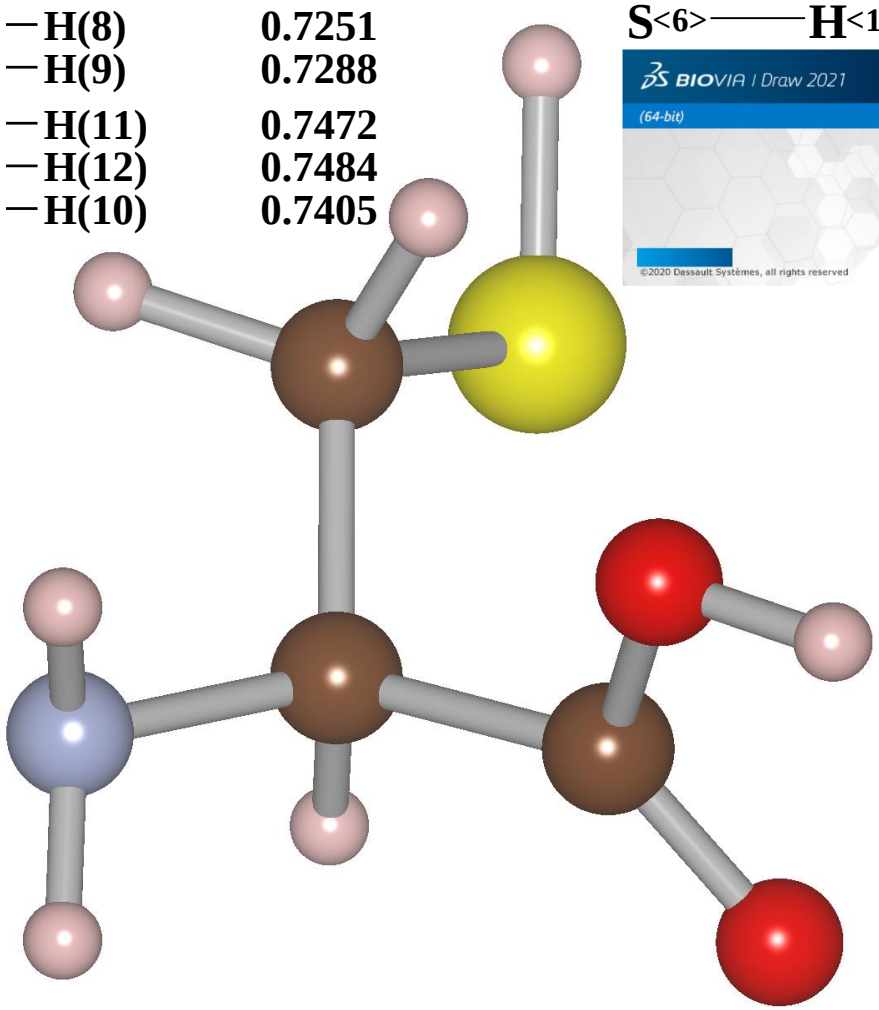
```
    BOND OVERLAP POPULATION BETWEEN ATOMS
        ( 1 N )( 2 C )( 3 C )( 4 O )( 5 C )( 6 S )( 7 O )( 8 H )
( 1)   6.5145
( 2)   0.6771   4.5862
( 3)  -0.0330   0.7505   4.2367
( 4)   0.0004  -0.0512   1.0072   8.0993
( 5)  -0.0393   0.7343  -0.0281   0.0007   4.5719
( 6)   0.0006  -0.0119   0.0000   0.0002   0.6898  15.5907
( 7)  -0.0019  -0.0580   0.6333  -0.1261  -0.0027   0.0000   8.0296
( 8)   0.7251  -0.0288  -0.0019   0.0000  -0.0015   0.0000   0.0006   0.4382
( 9)   0.7288  -0.0296  -0.0016   0.0001   0.0013   0.0000   0.0001  -0.0297
( 10)  -0.0320   0.7405  -0.0258  -0.0024  -0.0209   0.0011   0.0009   0.0012
( 11)  -0.0041  -0.0240   0.0007   0.0000   0.7472  -0.0243   0.0000   0.0000
( 12)  -0.0002  -0.0242  -0.0038   0.0000   0.7484  -0.0190   0.0014   0.0002
( 13)   0.0000   0.0003   0.0000   0.0000  -0.0090   0.6830   0.0000   0.0000
( 14)   0.0000   0.0016  -0.0316  -0.0003   0.0000   0.0000   0.6148   0.0000
```

	(9 H)	(10 H)	(11 H)	(12 H)	(13 H)	(14 H) (
(9)	0.4611					
(10)	−0.0021	0.5984				
(11)	0.0001	−0.0003	0.5987			
(12)	0.0000	0.0009	−0.0265	0.6037		
(13)	0.0000	0.0000	−0.0004	−0.0009	0.5387	
(14)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.3373

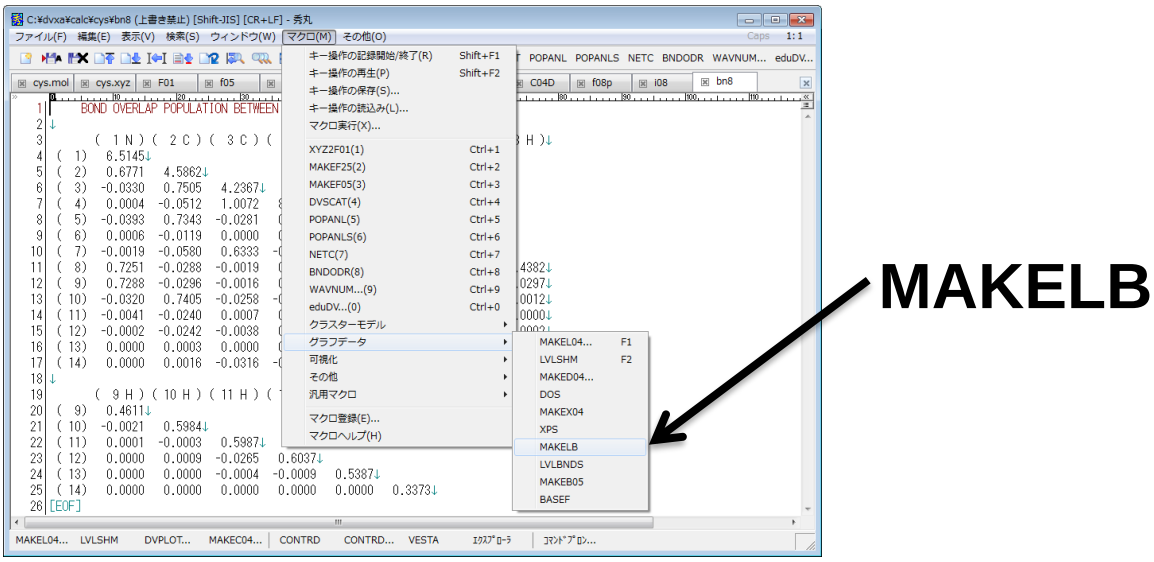
BIOVIA Draw 2021 などで下図のような NEQ 番号を付した原子結合図を作成しておくと，解釈が容易になります．すべての結合の線の定量的な結合の強さ（共有結合性の大きさ）が以下のように求まりました．二重結合性の結合では数値が大きくなっていることが分かります．

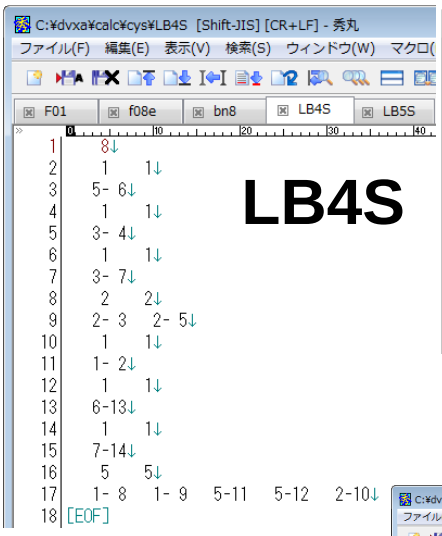
S(6)−C(5)	**0.6898**
C(3)＝O(4)	**1.0072**
C(3)−O(7)	**0.6333**
C(2)−C(3)	**0.7505**
C(2)−C(5)	**0.7343**
N(1)−C(2)	**0.6771**
S(6)−H(13)	**0.6830**
O(7)−H(14)	**0.6148**
N(1)−H(8)	**0.7251**
N(1)−H(9)	**0.7288**
C(5)−H(11)	**0.7472**
C(5)−H(12)	**0.7484**
C(2)−H(10)	**0.7405**

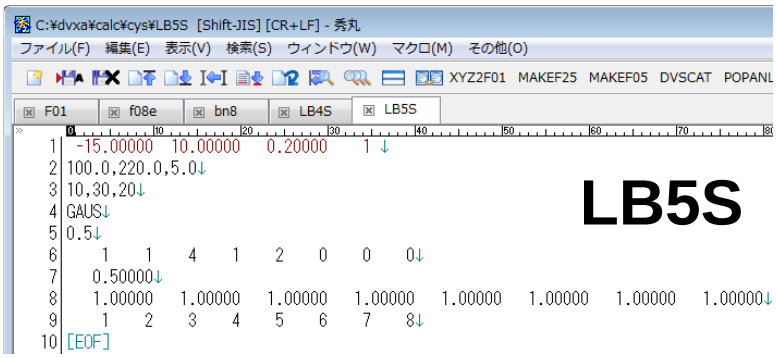


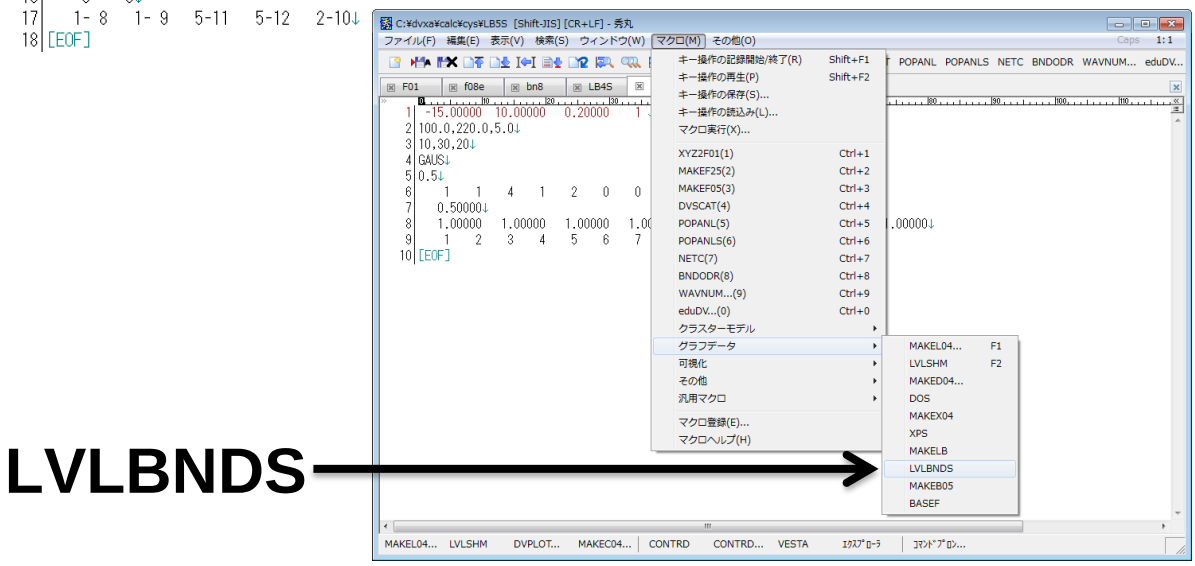


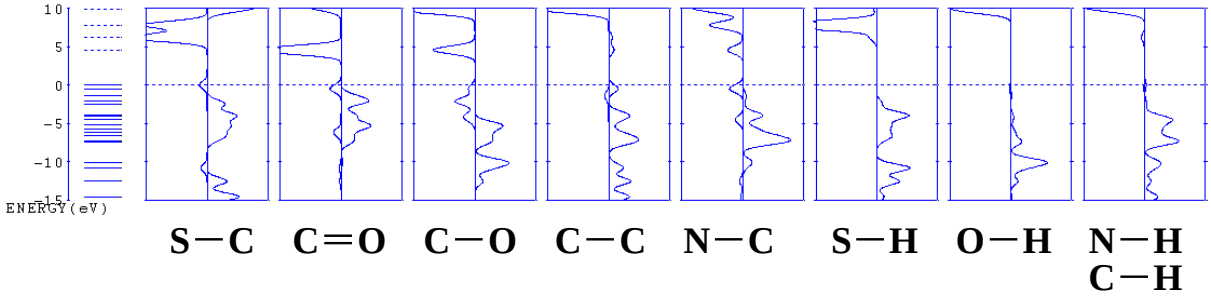
23. メニューバーのマクロ(M)−グラフデーター【MAKELB】をクリックします．すると
プログラム LVLBNDS の入力ファイル LB4S および LB5S のひな形が準備されます．
このひな形は書籍「はじめての電子状態計算」の p. 119 の図 7.13（LB4S）および p. 120 の図 7.14（LB5S）そのままの形式がコピーされるだけです．必ず BNDODR の入力ファイル BN8 を見ながら LB4S および LB5S は編集作業を行う必要があります．





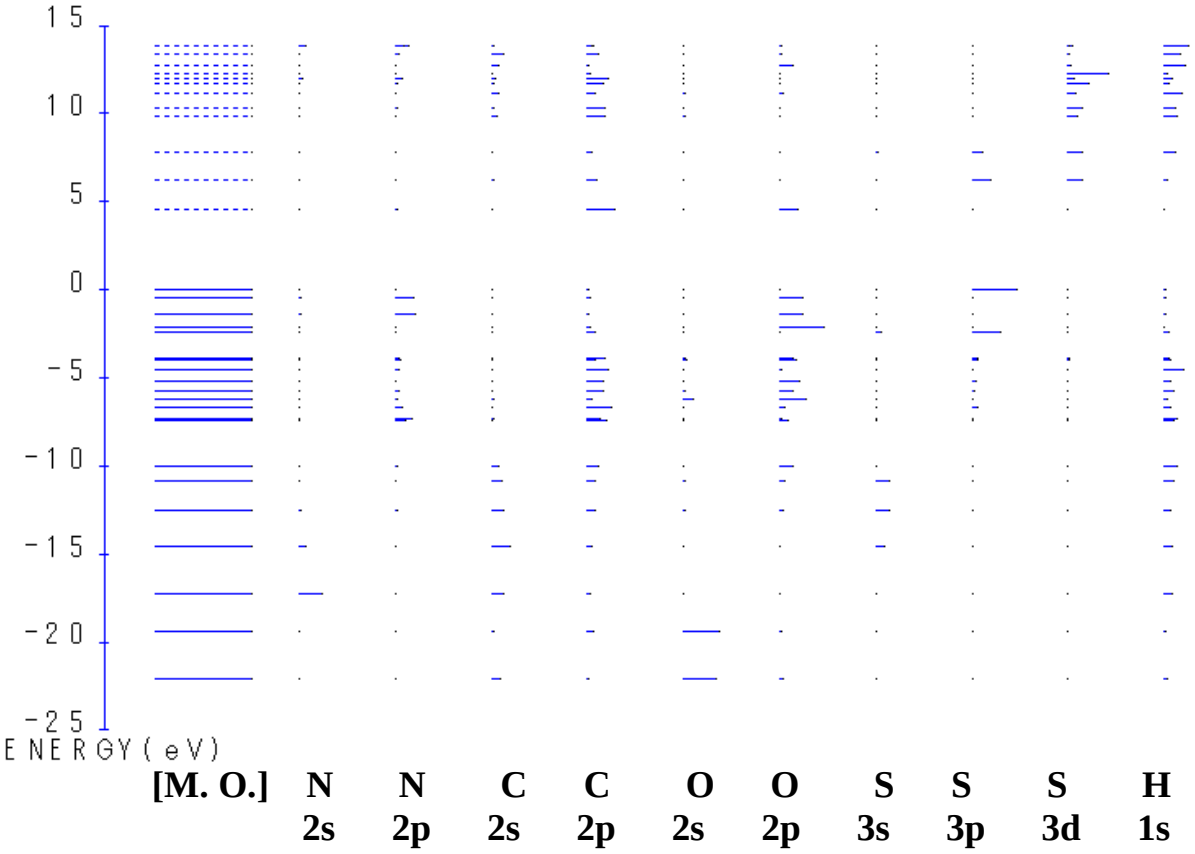






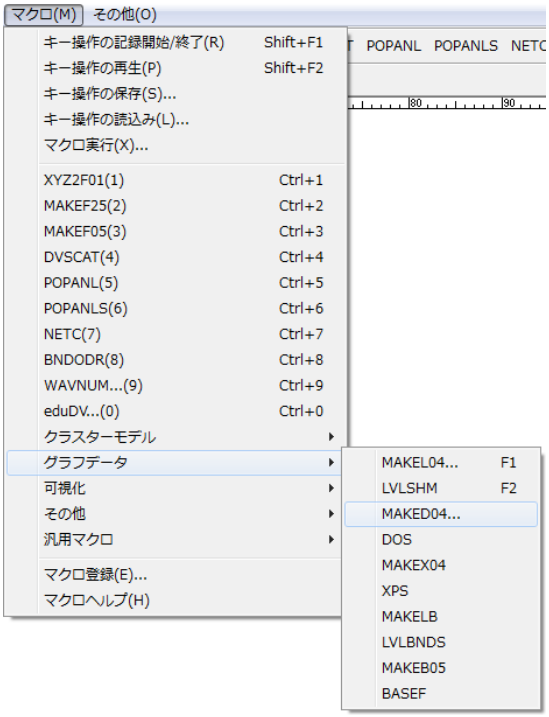
LB4S および LB5S の編集作業・上書き保存の後，メニューバーのマクロ(M)−グラフデータ−【LVLBNDS】をクリックしますと，プログラム LVLBNDS が実行され，自動的に計算結果ファイル LB7S がプログラム DVPLOT に引き渡されて，上図のようなグラフ，各原子間の共有結合性を示す有効共有結合電荷(Bond Overlap Population)が自動的にプロット・画面表示されます（グラフの下の黒文字のキャプションは自動表示されません）．各原子間結合において，右側が結合成分の分布曲線，左側が反結合成分の分布曲線です．

24. 左下の【MAKEL04】ボタンをクリックするとコマンドプロンプト画面が起動しますので，今回は， 2) Set inner atom を選択します（キーボードから“2”を入力します）．プログラム MAKEL04 は L04 および L05 の準備・作成を行います．必要に応じて L04 および L05 は編集作業を行い，上書き保存して下さい（L04 は次頁参照）．次に【LVLSHM】ボタンをクリックするとエネルギー準位図が作成されます．【LVLSHM】をクリックするとプログラム LVLSHM が実行され，自動的に計算結果ファイル L07 がプログラム DVPLOT に引き渡されて，下図のようなエネルギー準位図がプロット・画面表示されます（グラフの下の黒文字のキャプションは自動表示されません）．

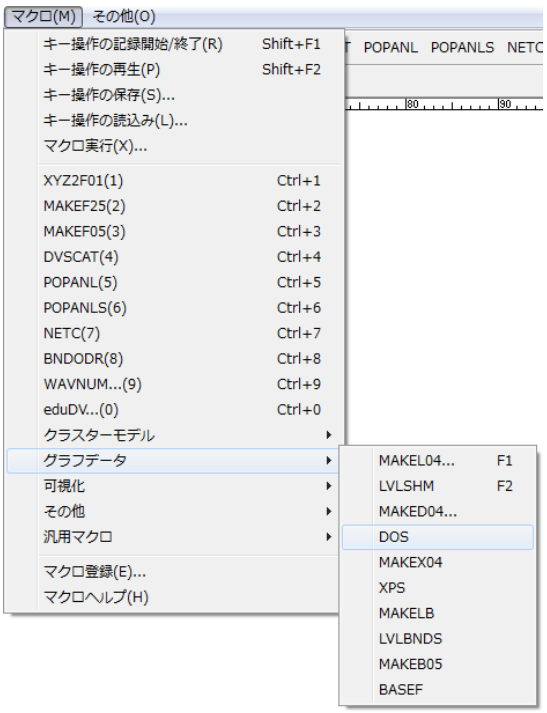


```
F01  F08E  BN8  L04  L05
-25.00000  15.00000   5.00000   1   0   0.00000↓
  10   0   1   2   0   3   4   0   3   4   0   5   6   0   3   4↓
   0   0   0   7   8   9   0   5   6  10  10  10  10  10  10  10↓
↓
↓
  14  1N  1N  1N  2C  2C  2C  3C  3C  3C  4O  4O  4O  5C  5C  5C ↓
  6S  6S  6S  6S  6S  6S  7O  7O  7O  8H  9H 10H 11H 12H 13H 14H ↓
```

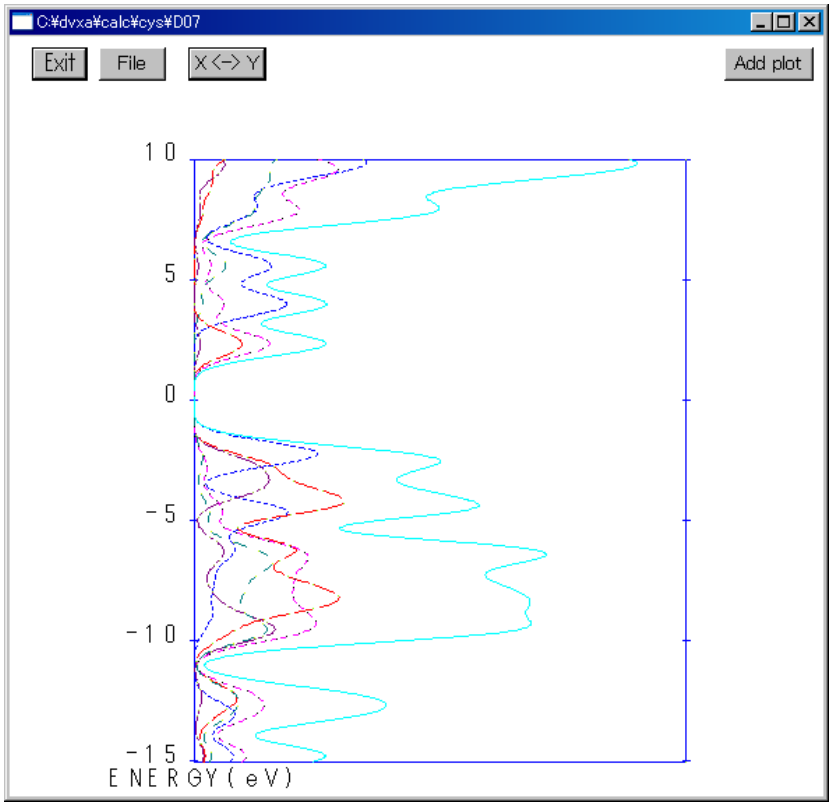
25. メニューバーのマクロ(M)−グラフデータ−【MAKED04】ボタンを押すだけで，自動的に **D04** および **D05** が準備されます．
D04 および **D05** は必要に応じて編集作業を行い，上書き保存して下さい．
メニューバーのマクロ(M)−グラフデータ−【DOS】ボタンをクリックしますと，プログラム **DOS** が実行され，自動的に計算結果ファイル **D07** および **D07S** がプログラム **DVPLOT** に引き渡されて，下図のような状態密度曲線が自動的に描画・画面表示されます．



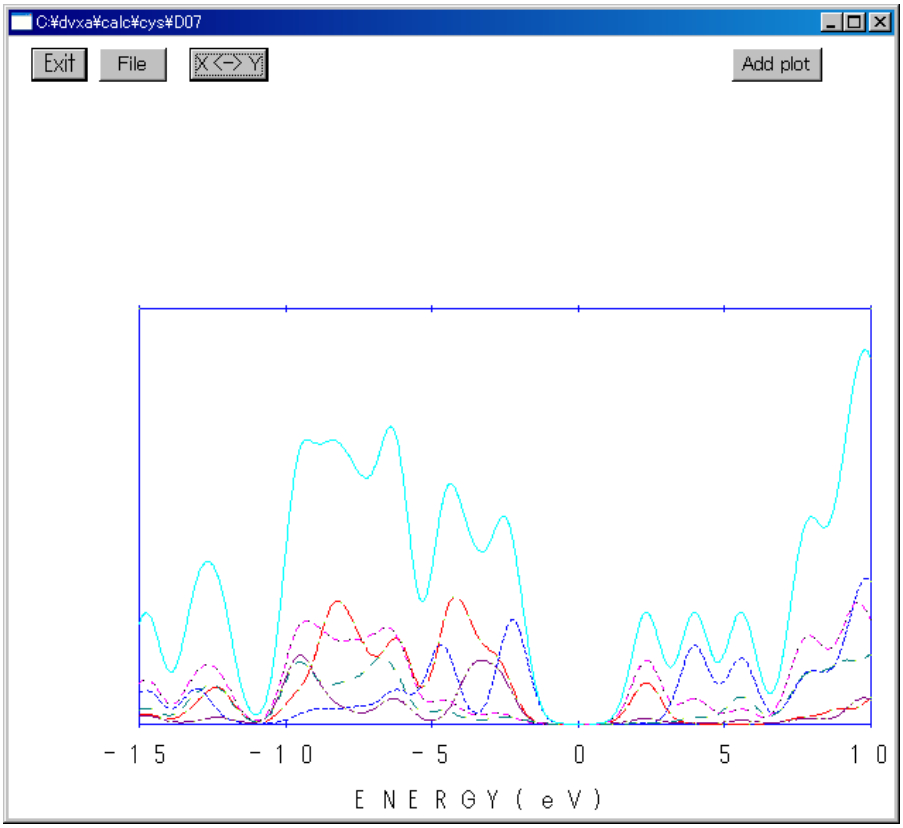

```
F01  F08E  BN8  D04  D05
GAUS↓
 -15.00000  10.00000   0.20000   0↓
   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5 ↓
   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5 ↓
   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5 ↓
   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5   0.5 ↓
    5   3   3   3   4   4   4   4   4   4   2   2   2   4   4   4↓
    1   1   1   1   1   1   2   2   2   5   5   5   5   5   5   5↓
   1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000↓
   1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000↓
   1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000↓
   1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000  1.00000↓
↓
↓
  14  1N  1N  1N  2C  2C  2C  3C  3C  3C  4O  4O  4O  5C  5C  5C ↓
  6S  6S  6S  6S  6S  6S  7O  7O  7O  8H  9H 10H 11H 12H 13H 14H ↓
↓
  1 N  1s  1 N  2s  1 N  2p  2 C  1s  2 C  2s  2 C  2p  3 C  1s  3 C  2s ↓
  3 C  2p  4 O  1s  4 O  2s  4 O  2p  5 C  1s  5 C  2s  5 C  2p  6 S  1s ↓
  6 S  2s  6 S  2p  6 S  3s  6 S  3p  6 S  3d  7 O  1s  7 O  2s  7 O  2p ↓
  8 H  1s  9 H  1s 10 H  1s 11 H  1s 12 H  1s 13 H  1s 14 H  1s ↓
[EOF]
```



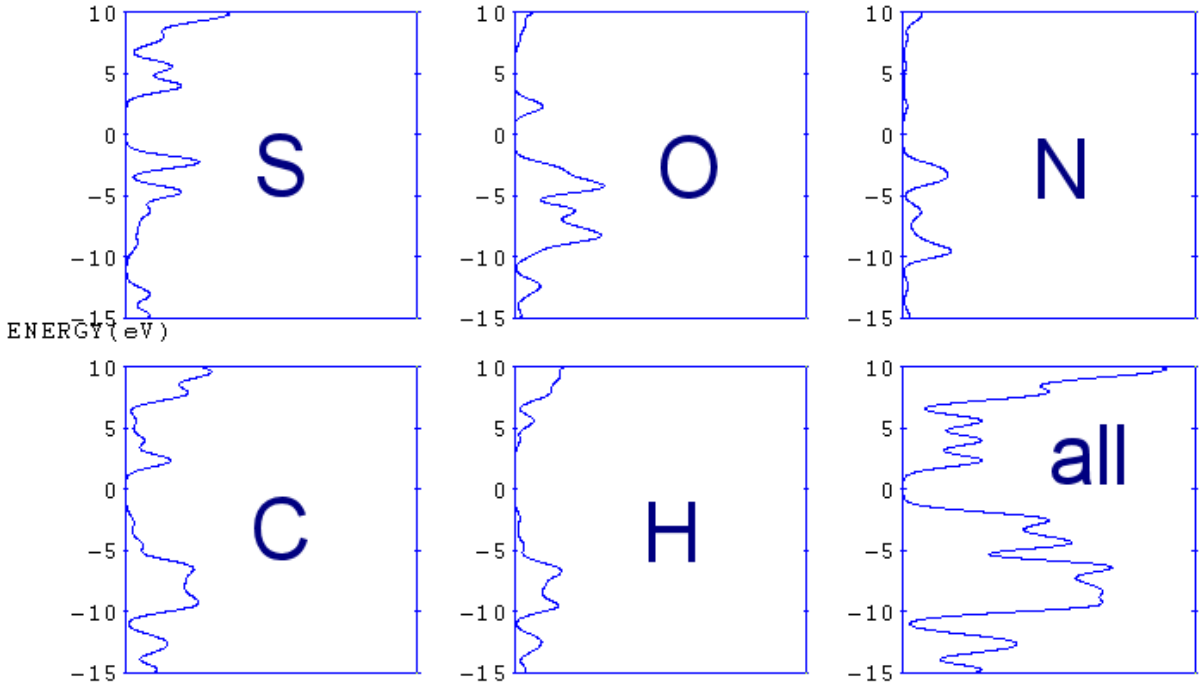
ＤＶ−Ｘα法計算支援環境には，水野正隆氏によって作成された新版のプログラム **DVPLOT** が搭載されています．書籍「はじめての電子状態計算」添付 CD−ROM に同梱されているプログラム **DVPLOT** からはかなりの進化を遂げています．



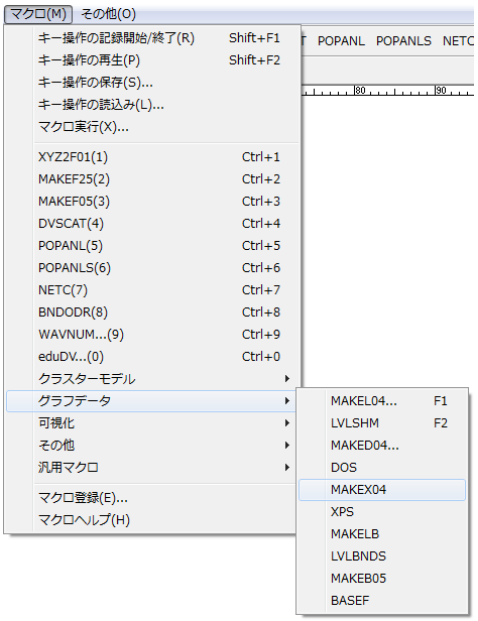
読み込むファイル名を引数として指定できるようになったことが一点，あとは右図を見ていただければ分かるように，Ｘ軸とＹ軸を入れ替えて描画する機能（従来の **DV PLOTH** の機能に該当）や，Add plot ボタンを押すことにより，複数のグラフを比較表示できるようにもなりました．また従来の **DVPLOTS** の機能も内蔵しています．



Ｘ軸とＹ軸を入れ替えてプロットした場面（上図）

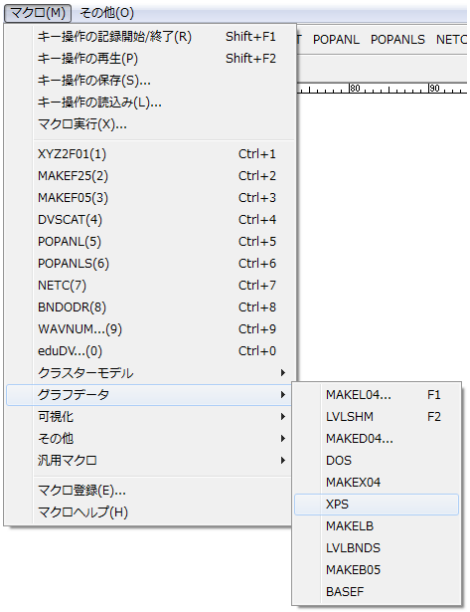


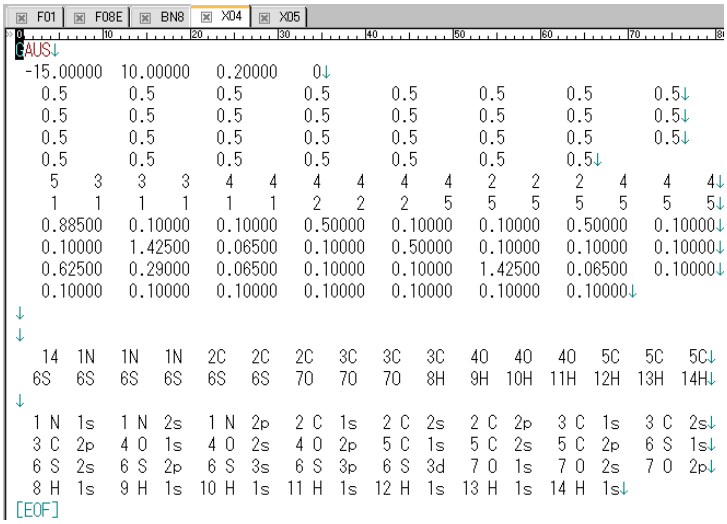
D07S をプロットした場面（上図）



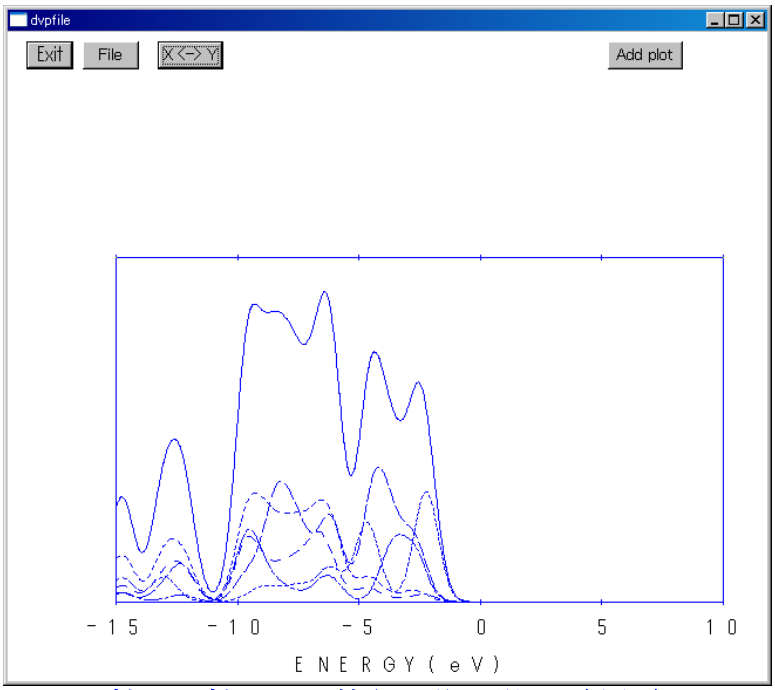
26. メニューバーのマクロ(M)−グラフデーター【MAKEX04】ボタンを押すだけで，自動的に X04 および X05 が準備されます．X04 および X05 は必要に応じて編集作業を行い，上書き保存して下さい．

メニューバーのマクロ(M)−グラフデーター【XPS】ボタンをクリックしますと，プログラム XPS が実行され，自動的に計算結果ファイル X07 および X07S がプログラム DVPLOT に引き渡されて，次ページのようなX線光電子スペクトルが自動的にプロットされます．



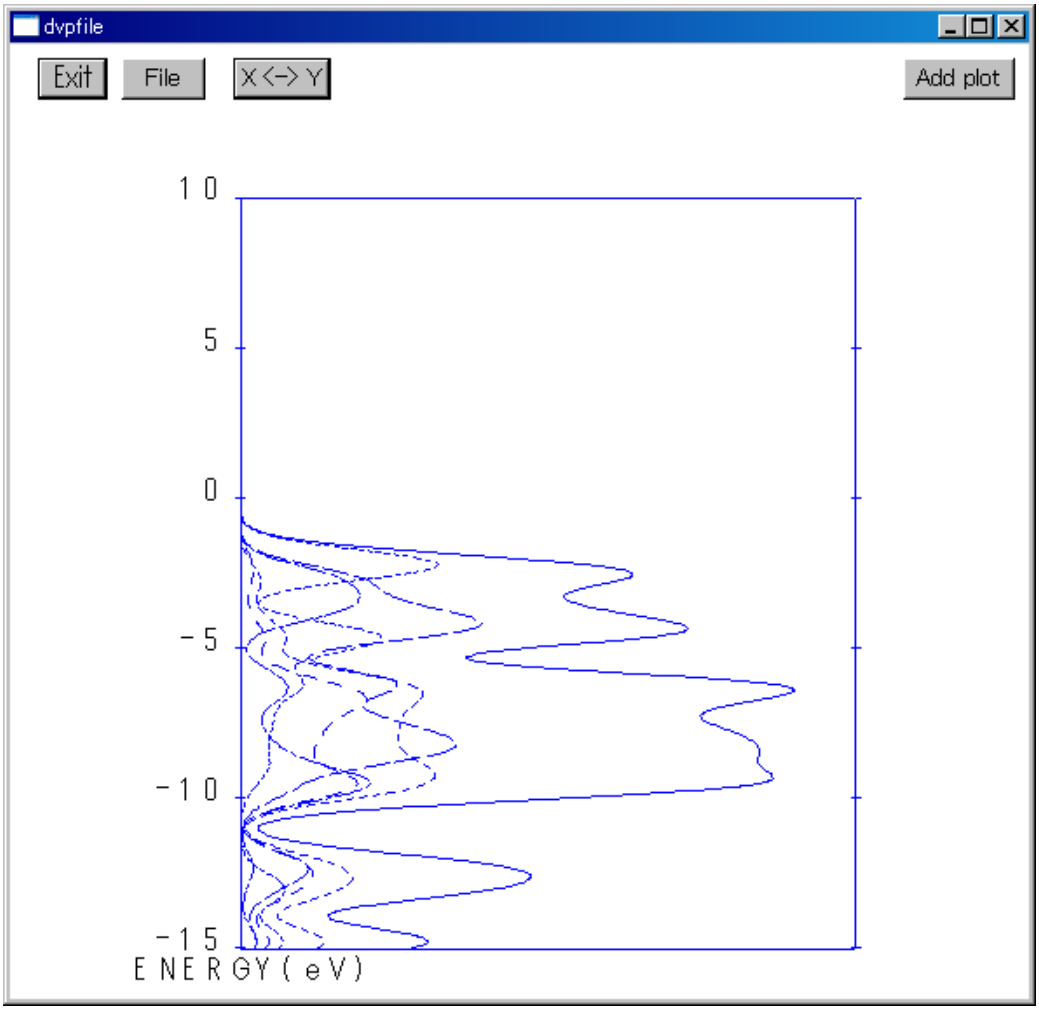


X04 および X05 は D04 および D05 とほぼ同じ書式です．ただ X04 では各原子軌道の光イオン化断面積の値をその原子軌道に入りうる電子数で割った数字を入力する箇所があります．前頁の X04 ではスコフィールドによる Mg-Kαによる光イオン化断面積の値(電子 1 個あたりの値)を用いました．また XPS では X04 の 1 行目を GAUS とすることにより，占有軌道のみの状態密度をガウス関数で描きます．X04 の 1 行目を AGAU とすれば非占有軌道のみの状態密度をガウス関数で描くことができます．

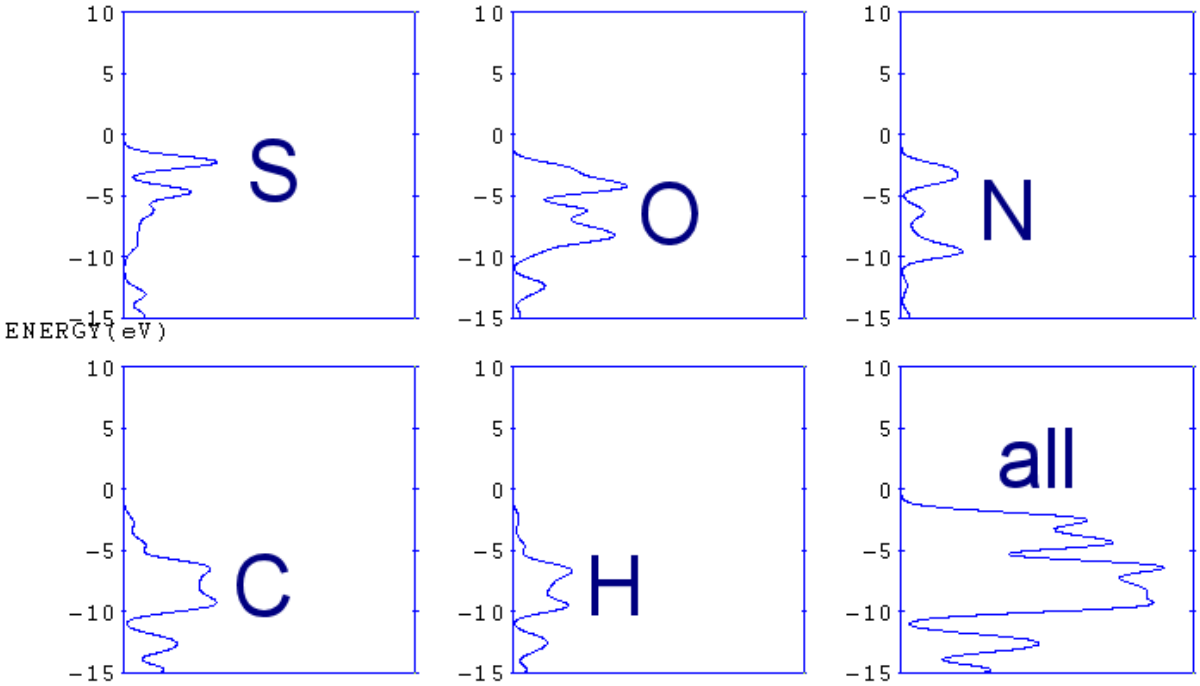


X軸とY軸を入れ替えた後の場面（上図）

ローレンツ関数で描く場合は，占有軌道のみの場合は LORE，非占有軌道のみの場合は ALOR と指定することにより目的のスペクトルを描くことができます．

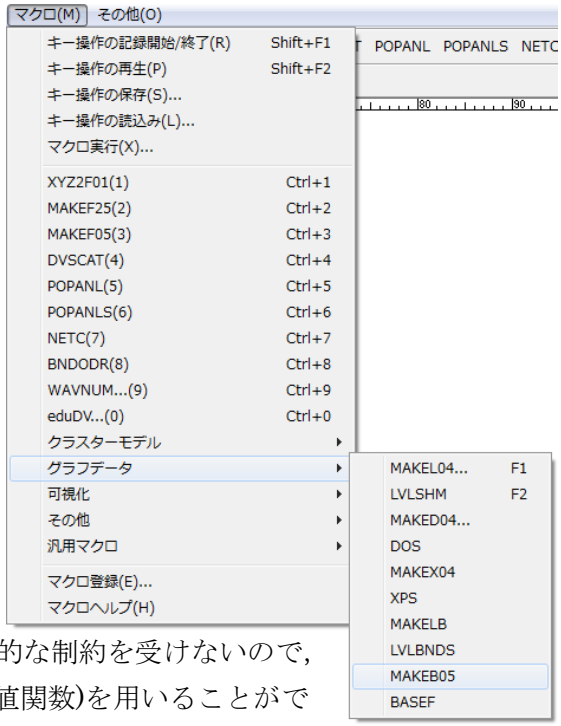


X軸とY軸を入れ替える前の場面（上図）



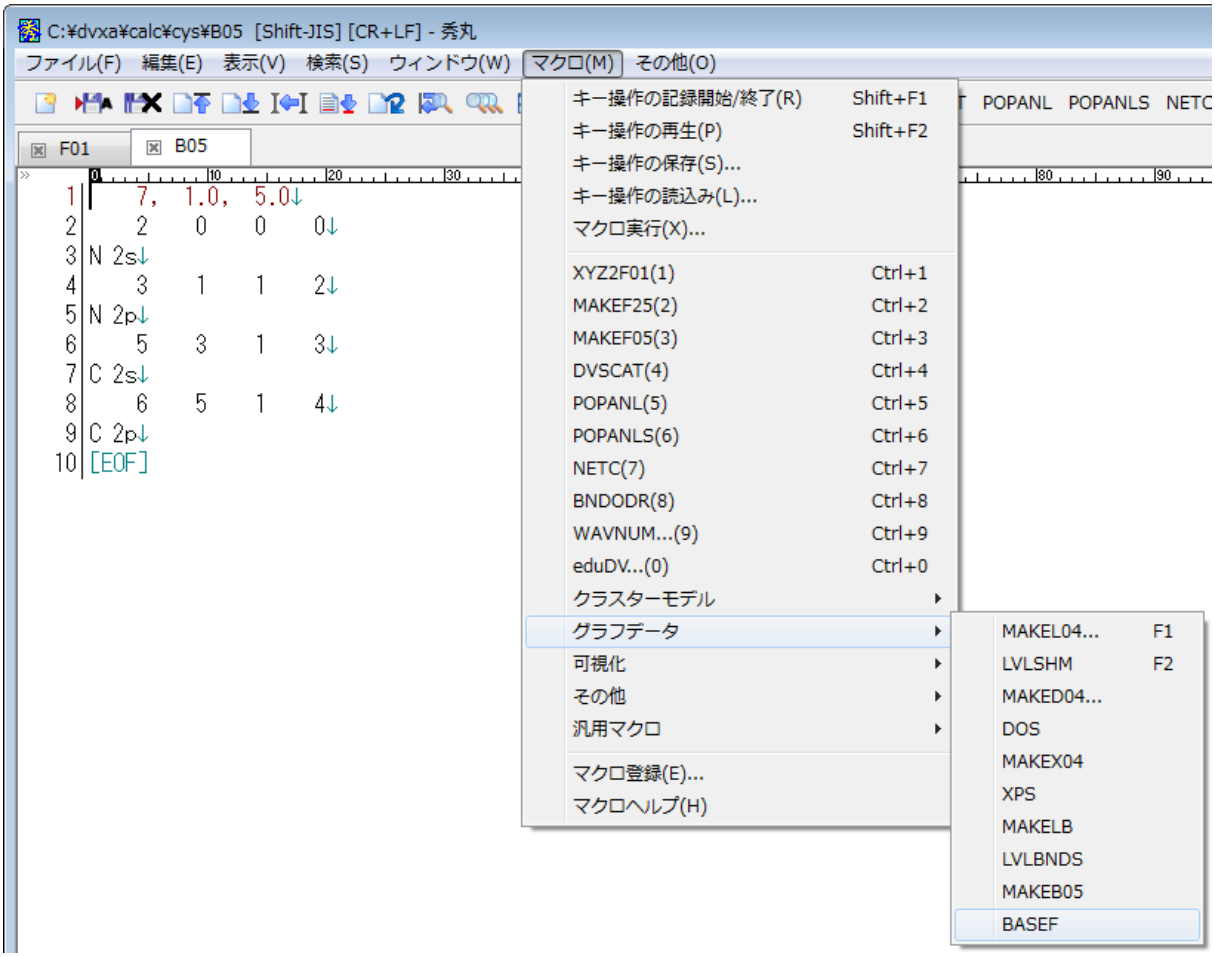
X07S をプロットした場面（上図）

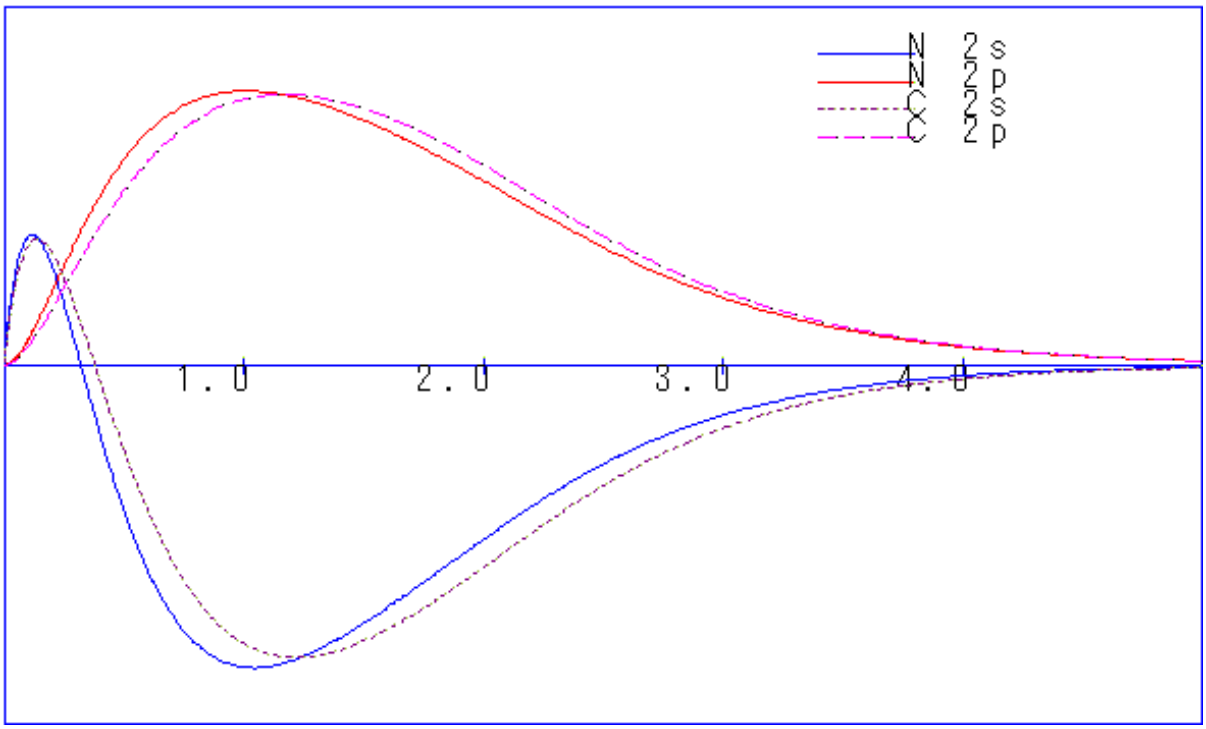
27. メニューバーのマクロ(M)－グラフデータ－【MAKEB05】ボタンを押すだけで，自動的に B05 が準備されます．B05 は必要に応じて編集作業を行い，上書き保存して下さい．（書籍：はじめての電子状態計算の説明を参照しながら，編集作業をして下さい）



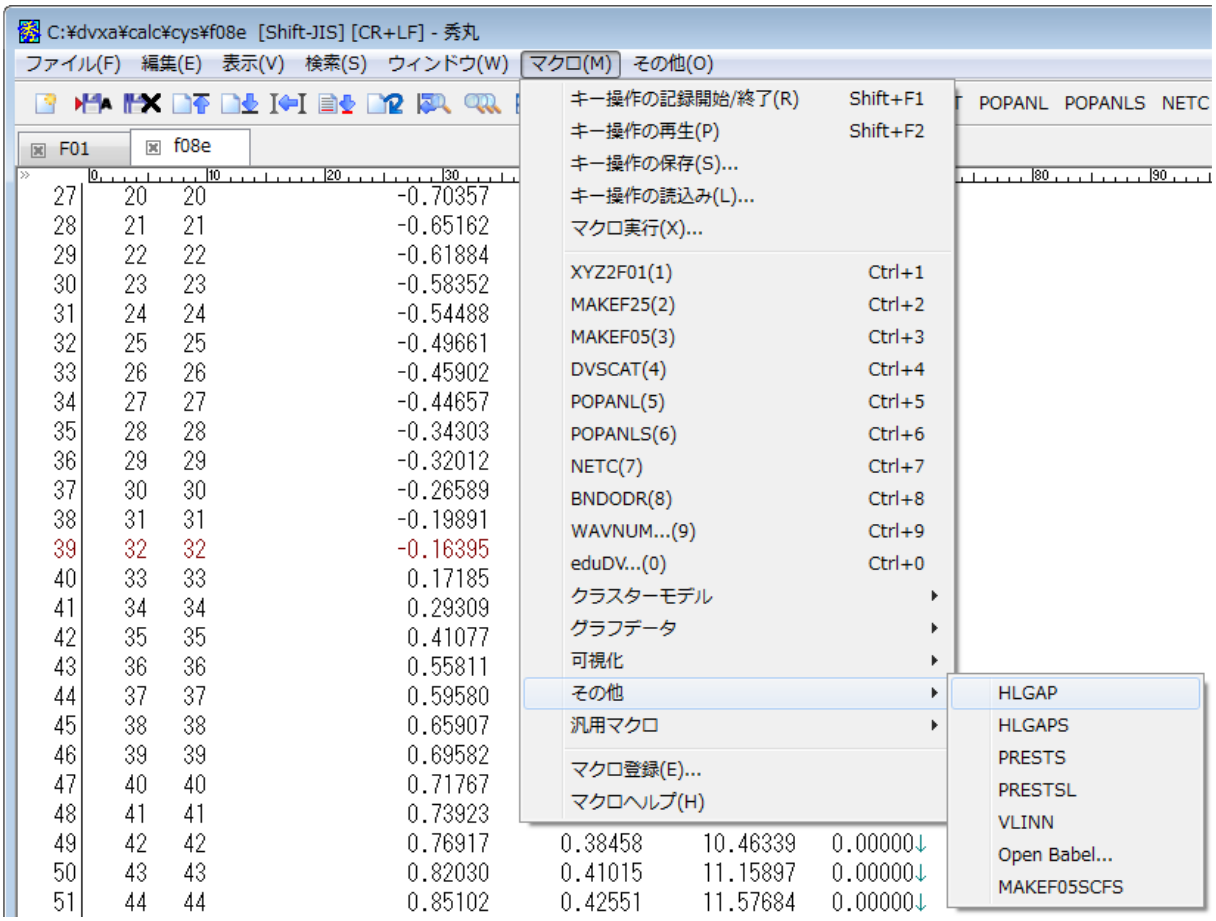
メニューバーのマクロ(M)－グラフデータ－【BASEF】ボタンをクリックしますと，プログラム BASEF が実行され，自動的に計算結果ファイル B07 がプログラム DVPLOT に引き渡されて，次ページのような，**DV−Xα 分子軌道計算法**でセルフコンシステントな繰り返し計算で最適化された原子基底関数の動径部分が自動的にプロット・画面表示されます．

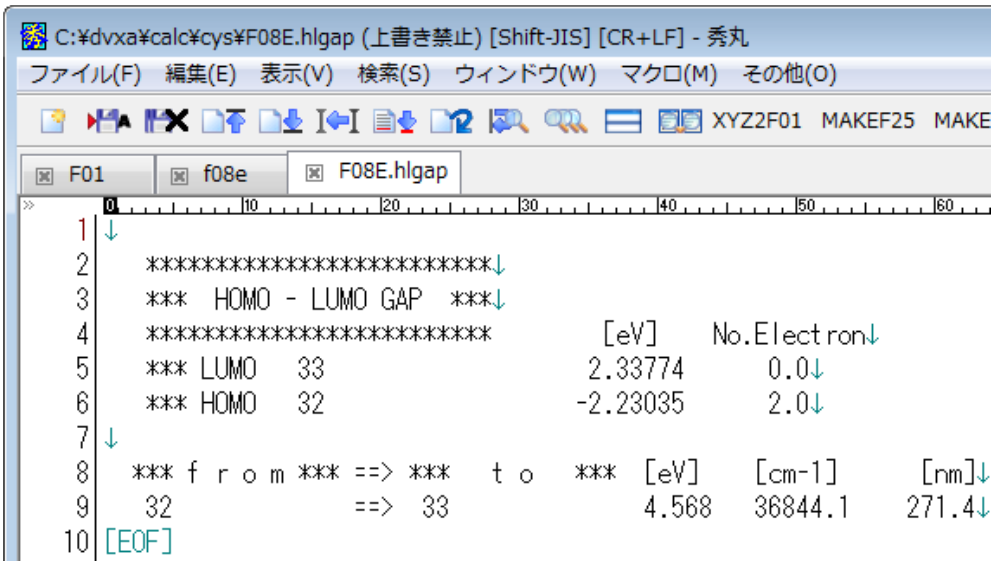
DV−Xα 分子軌道計算法では原子積分の際の数学的な制約を受けないので，LCAO の基底関数としては最適な原子軌道関数(数値関数)を用いることができます．だからこそ，セルフコンシステントチャージになるまで繰り返し計算されて最適化された最終的な原子軌道関数（基底関数）がどのような形状になったのかを目視する作業は重要です．**DV−Xα 分子軌道計算**が終了（収束）した後には，BASEF で各原子の特に HOMO-LUMO 近傍に関与している原子軌道関数（基底関数）の動径部分をプロットしてその形状を目視することをお勧めします．特に F05 の 3 行目左端 A4 フォーマット(Fortran77 の書式に関する文法で A4 は文字型変数で半角 4 文字分という意味)の変数を“SCFS”とした SCAT 計算（本冊子の 146～149 頁を参照）を行った場合は，隣接する原子の電子も感じながらポテンシャルが作成され，それを元に原子基底関数がセルフコンシステントチャージになるまで最適化されますので，最適化された原子基底関数がおかしな形になっていないか，人間が目視して確認する作業は極めて重要です．


C:¥dvxa¥calc¥cys¥B05 [Shift-JIS] [CR+LF] - 秀丸
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 検索(S) ウィンドウ(W) マクロ(M) その他(O)
F01
B05
7, 1.0, 5.0
2 0 0 0
N 2s
3 1 1 2
N 2p
5 3 1 3
C 2s
6 5 1 4
C 2p
[EOF]
キー操作の記録開始/終了(R) Shift+F1
キー操作の再生(P) Shift+F2
キー操作の保存(S)...
キー操作の読込み(L)...
マクロ実行(X)...
XYZ2F01(1) Ctrl+1
MAKEF25(2) Ctrl+2
MAKEF05(3) Ctrl+3
DVSCAT(4) Ctrl+4
POPANL(5) Ctrl+5
POPANLS(6) Ctrl+6
NETC(7) Ctrl+7
BNDODR(8) Ctrl+8
WAVNUM...(9) Ctrl+9
eduDV...(0) Ctrl+0
クラスターモデル
グラフデータ
可視化
その他
汎用マクロ
マクロ登録(E)...
マクロヘルプ(H)
MAKEL04... F1
LVLSHM F2
MAKED04...
DOS
MAKEX04
XPS
MAKELB
LVLBNDS
MAKEB05
BASEF

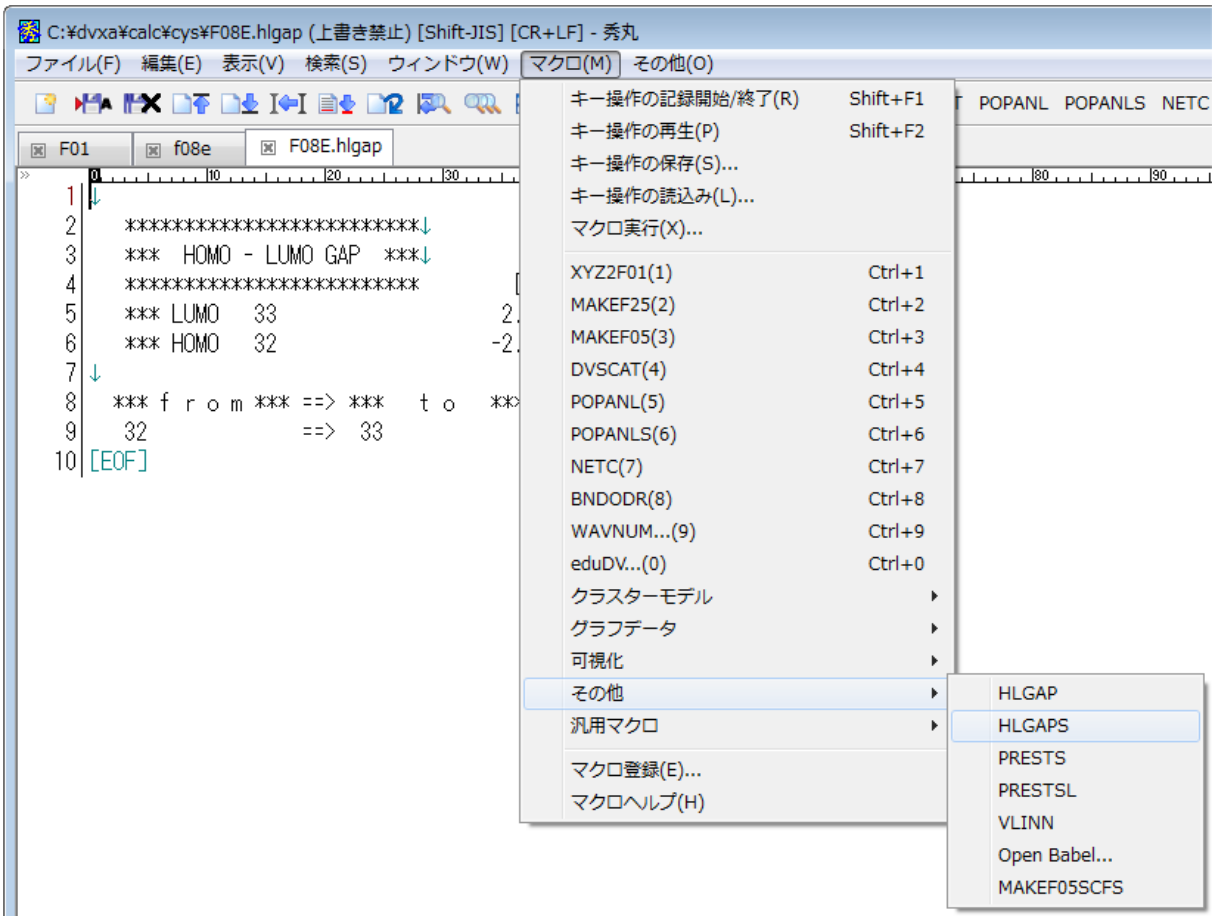

N 2 s
N 2 p
C 2 s
C 2 p
1.0
2.0
3.0
4.0

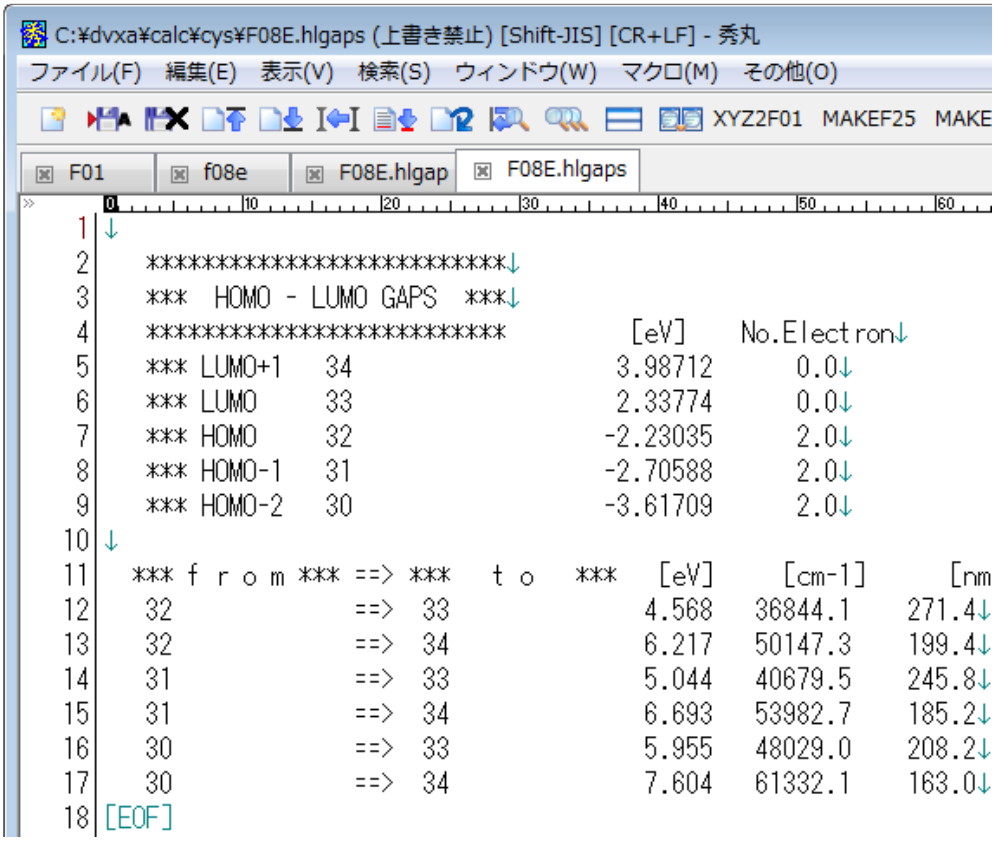
28. メニューバーのマクロ(M)−その他−【HLGAP】ボタンを押すと，HOMO と LUMO のエネルギー間隔を計算し，波数 cm^{-1}，波長 nm 単位に変換して出力されます.





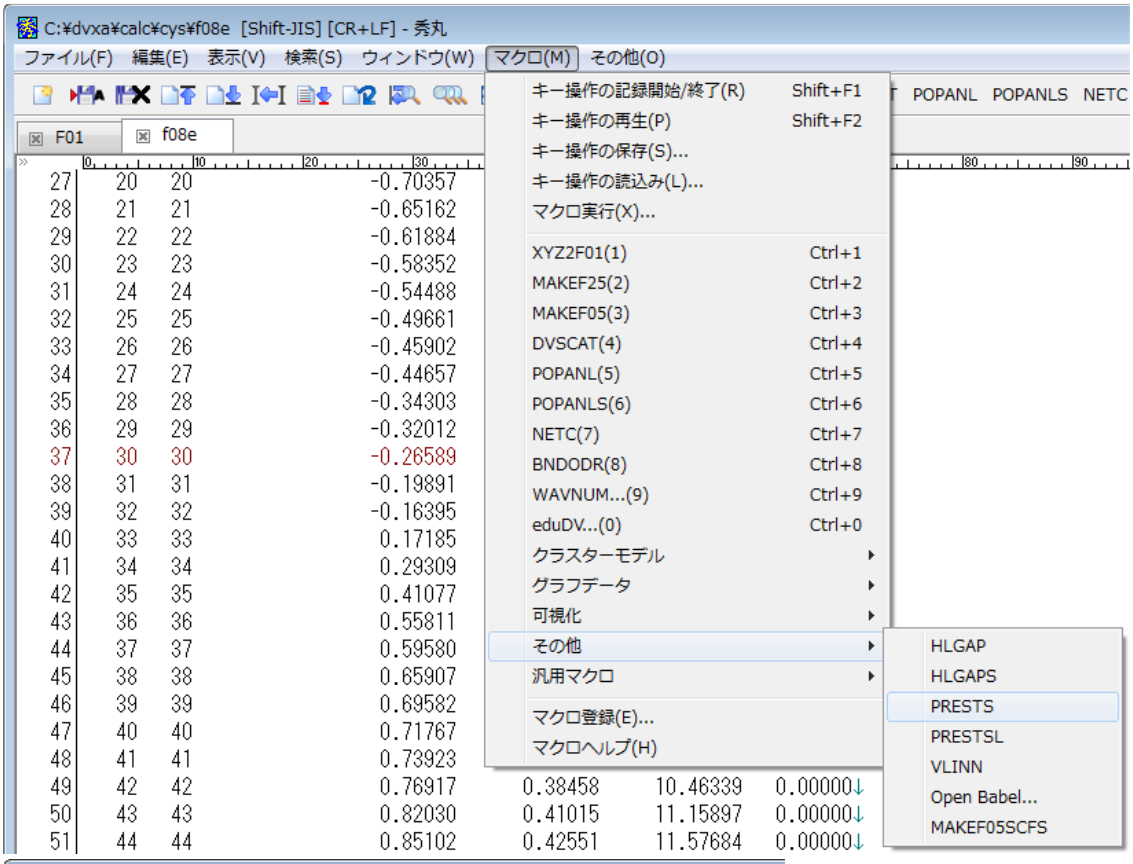
29. メニューバーのマクロ(M)−その他−【HLGAPS】ボタンを押すと，HOMO−LUMO 近傍の占有軌道と空軌道のエネルギー間隔を計算し，波数 cm^{-1}，波長 nm 単位に変換して出力されます．

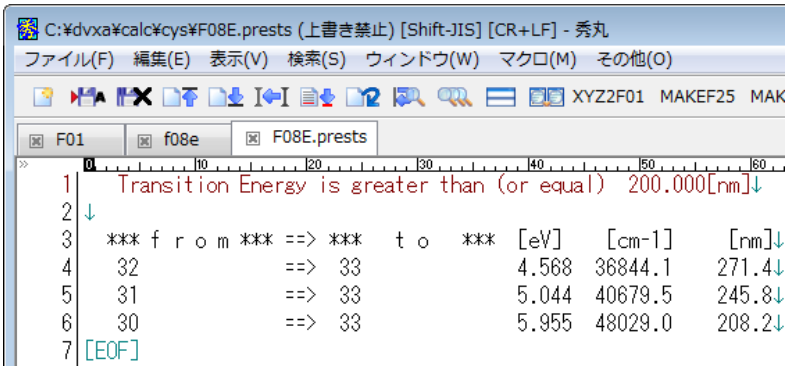




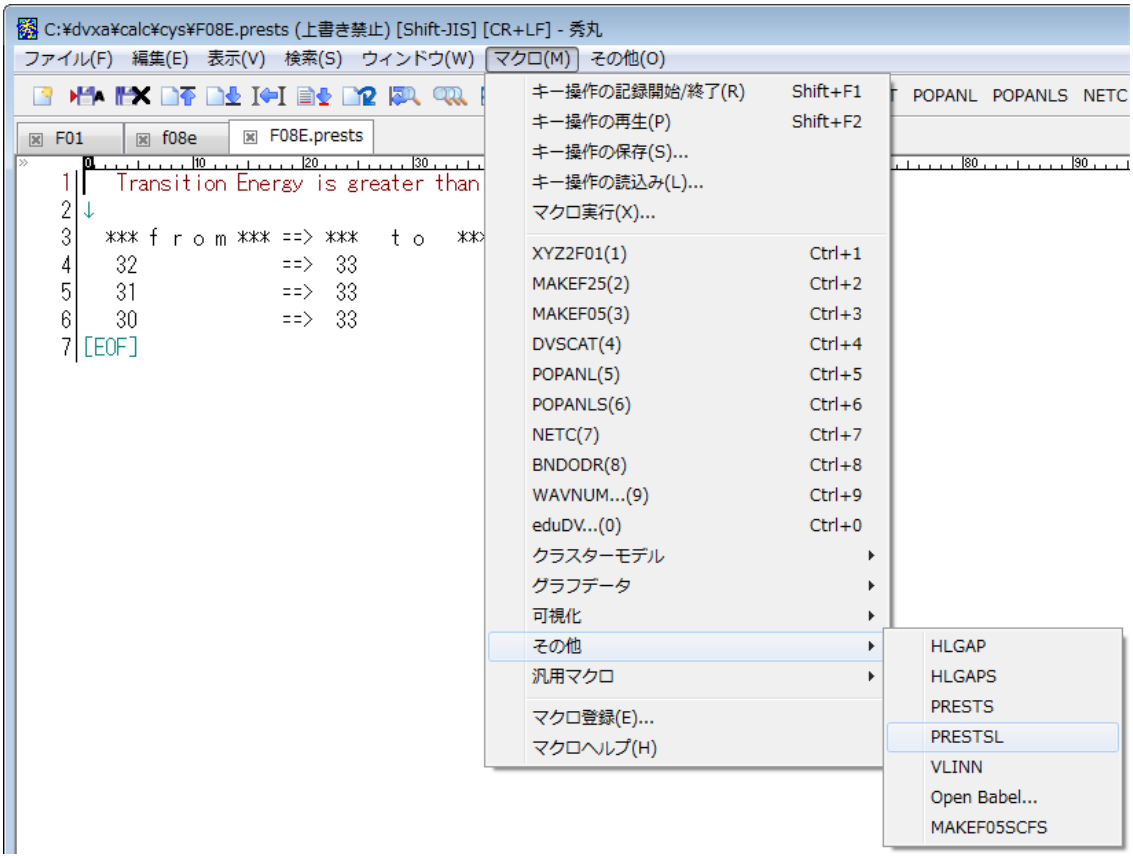
30. メニューバーのマクロ(M)−その他−**【PRESTS】**ボタンを押すと，HOMO−LUMO 近傍の占有軌道と空軌道のエネルギー間隔を計算し，**波長 200 nm より長波長の組み合わせ**について長波長側から短波長側へと並び替えた後，波数 cm^{-1}，波長 nm 単位に変換して出力されます．

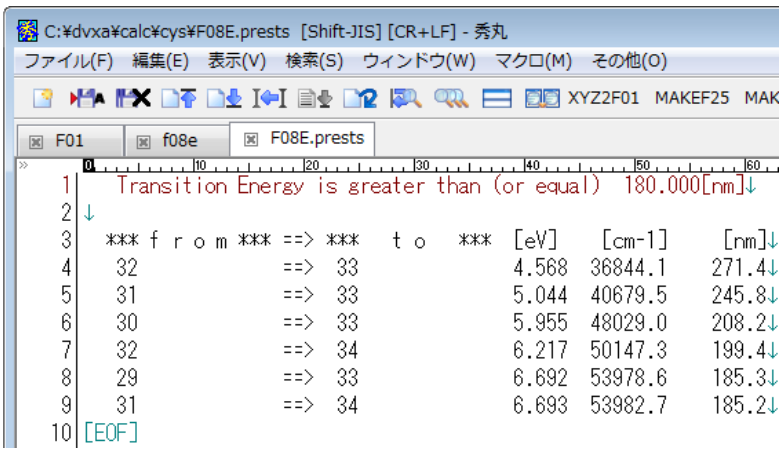
遷移の可能性のある組み合わせ（電子の入っている分子軌道から電子の入っていない分子軌道への遷移の組み合わせ）をすべて計算し，遷移エネルギーの大きい順に並び替え，化学の実験室での分光光度計で測定する吸収スペクトル（電子スペクトル）で遷移エネルギー（グラフの横軸）の単位として使われる波長(nm)に変換して **200 nm より長波長の組み合わせ**のみ出力してくれるので，**より精度の高い遷移エネルギーを計算するときに用いる Slater Transition State の計算**をする前に実行すると便利なプログラムです．**Pre-S**later **T**ransition **S**tate より **PRESTS** と名付けました（1992 年 1 月当時 M2 の岡山理大院・坂根が作成）．ただし電子が中途半端に入っている分子軌道（2 個まで入ることができるのに 1 個しか入っていない分子軌道，4 個まで入ることができる二重縮退分子軌道に 1 個〜3 個の電子が入っている場合など）への遷移の組は計算されませんので予めご注意下さい．そのような場合，**PRESTS** は **F08E** を読み込んで計算しておりますので，**F08E** を編集し，中途半端に電子の入っている HOMO の電子数を**一時的にゼロにする**ことにより中途半端に電子の入っている HOMO への遷移の組み合わせも計算することが可能です（**計算後，F08E を元に戻すことを忘れないで**下さい）．**Slater Transition State** の計算方法については **https://www.dvxa.org/hme/STS.html** に詳しく解説してあります．



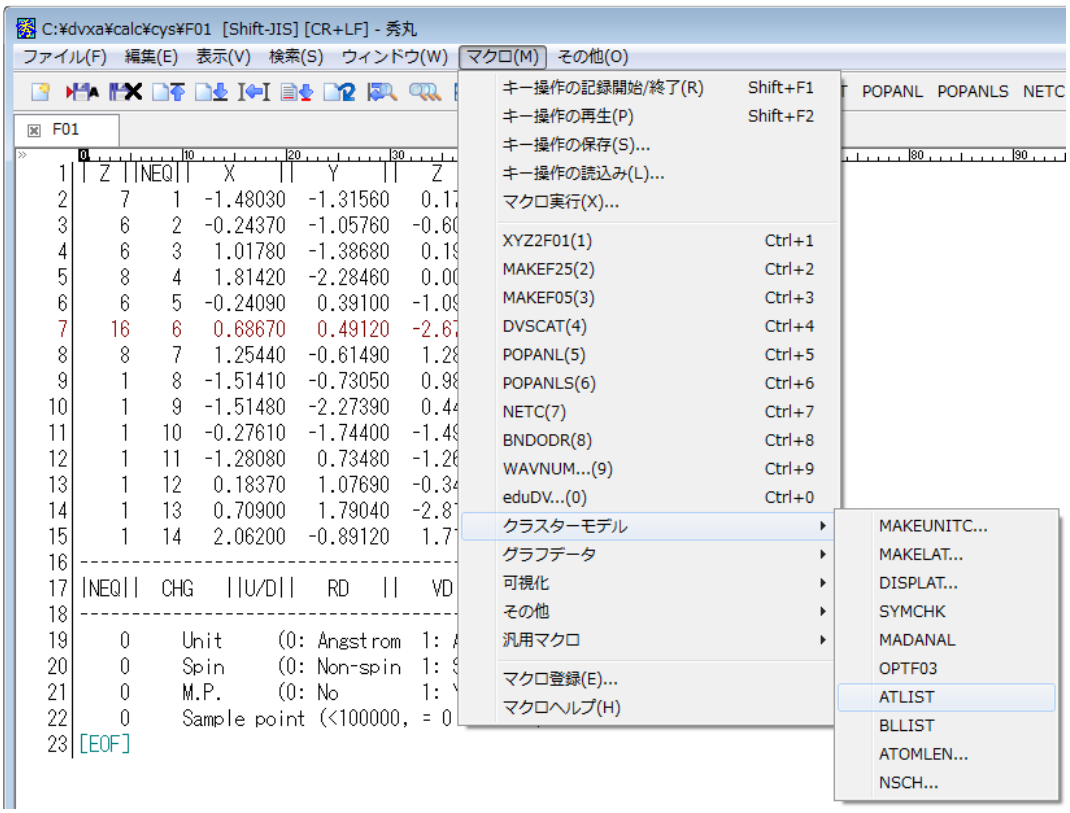


31. メニューバーのマクロ(M)−その他−【PRESTSL】ボタンを押すと，HOMO−LUMO 近傍の占有軌道と空軌道のエネルギー間隔を計算し，波長 180 nm より長波長の組み合わせについて長波長側から短波長側へと並び替えた後，波数 cm^{-1}，波長 nm 単位に変換して出力されます.

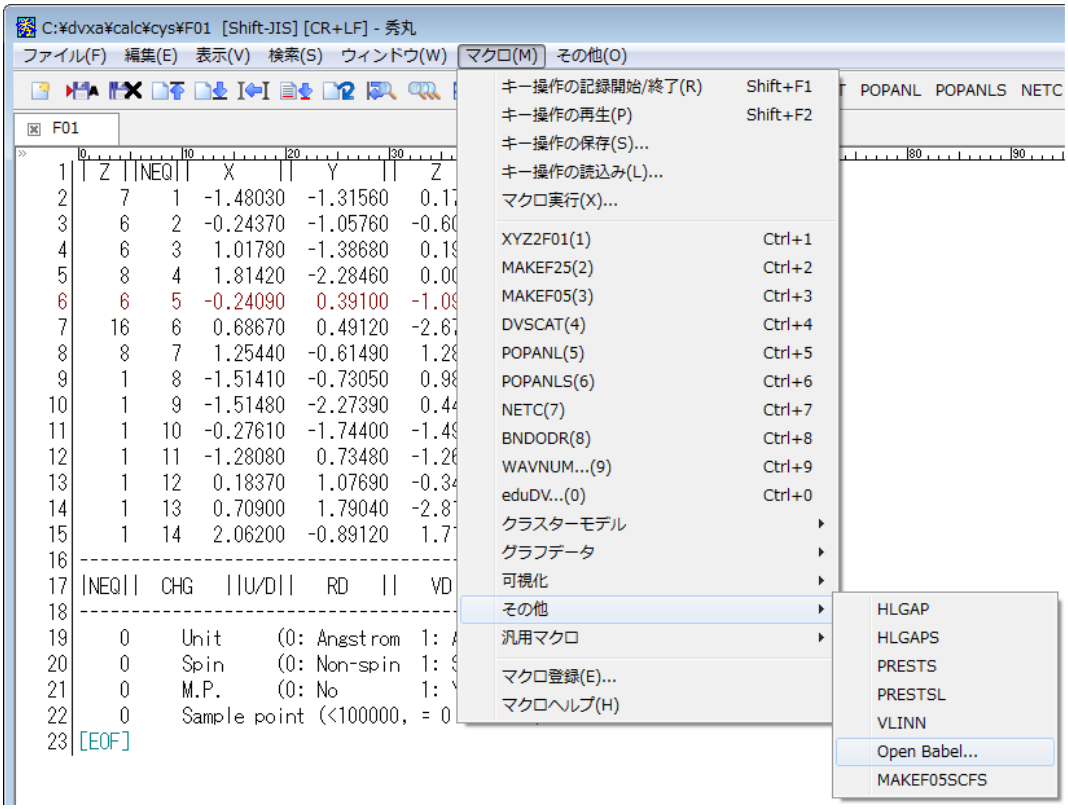




その他，メニューバーのマクロ(M)−クラスターモデルには，結晶のデータからクラスターモデルを作る **DISPLAT** プログラム群（**MAKEUNITC...**，**MAKELAT...**，**DISPLA...**），**SYMCHK**，**MADANAL**，**OPTF03**，**ATLIST**，**BLLIST**，**ATOMLEN...**，**NSCH...** が現在登録されています．



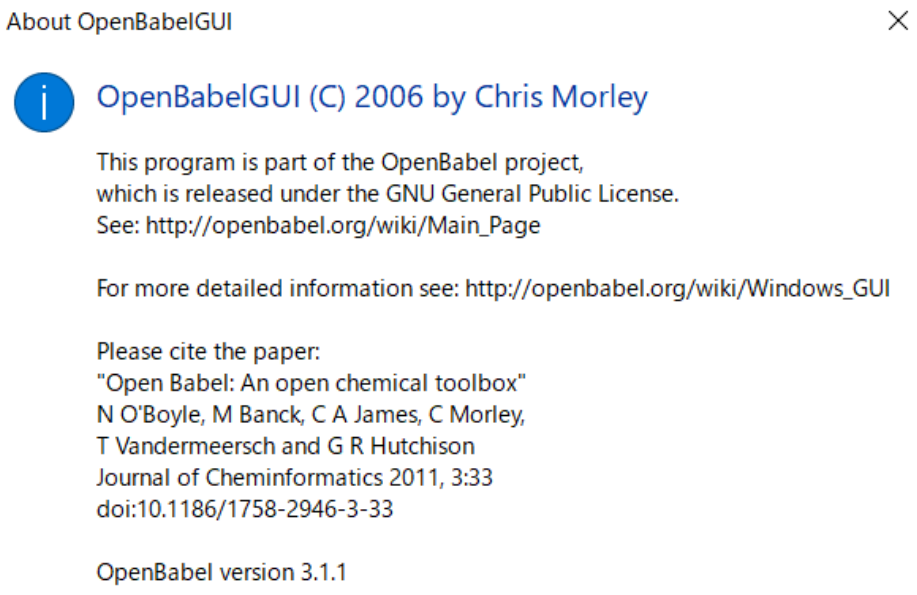
また，メニューバーのマクロ(M)−その他には，構造ファイル変換ユーティリティ **Open Babel** 用 GUI（**Open Babel GUI**）が登録されており，必要に応じて起動することができます．

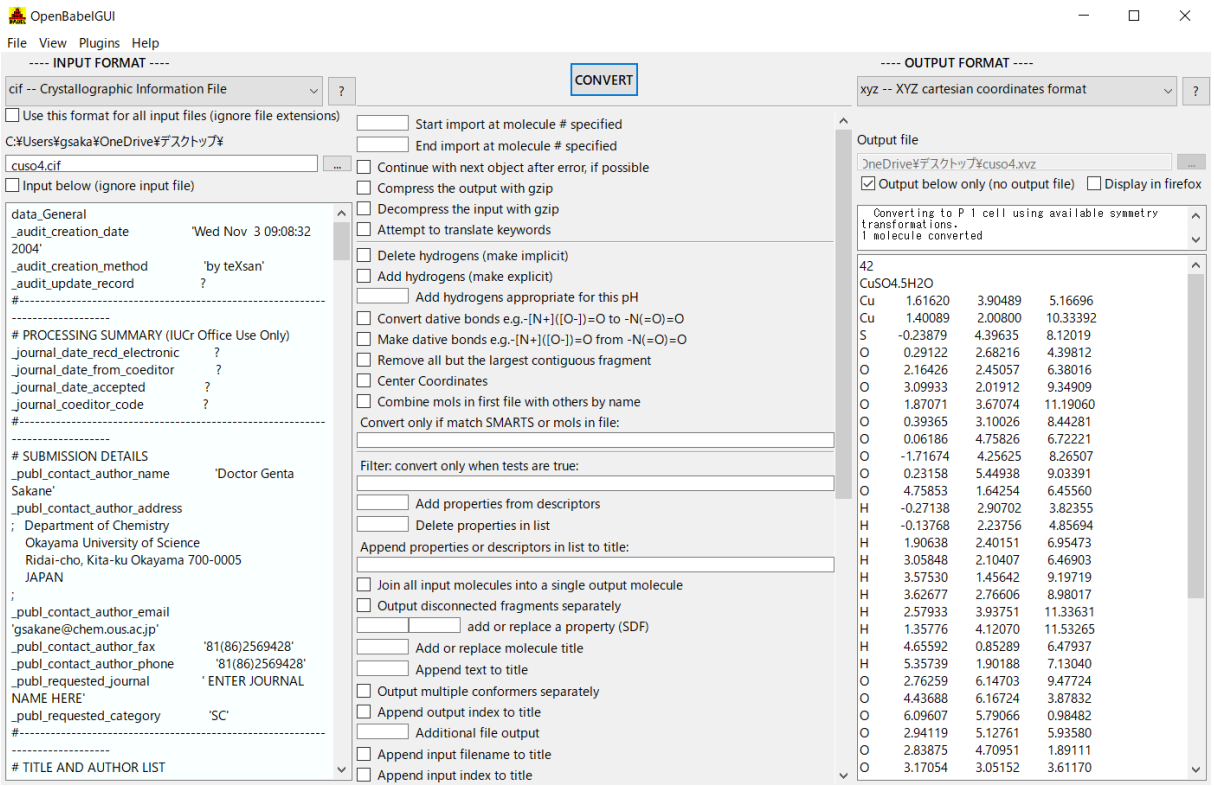


化学構造ファイル変換ユーティリティ **Open Babel** 用 GUI（**Open Babel GUI**）の Windows 版は，現在 Version 3.1.1 です．

http://openbabel.sourceforge.net/wiki/Category:Formats

によりますと，現在 **Open Babel** は 98 種類もの書式に対応しており，様々な書式の座標ファイルから出発して，まずは **Open Babel** により三次元統合可視化システム **VESTA** で読み込み可能な書式に座標ファイルを変換することによって，前述の手順通り，**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**によって **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算**を容易に行うことができます．





Open Babel については **https://openbabel.org/wiki/Main_Page** を参照して下さい．日本語での説明は **https://ja.wikipedia.org/wiki/OpenBabel** にあります．

追記：Open Watcom Fortran Version 1.6 でビルドされた新しい(次世代)**DV−*Xα* 法計算プログラム**実行ファイル一式(2007 年 9 月 4 日(火)に **DV−*Xα* 研究協会**のウェブサイト **www.dvxa.org** で一般公開済）を使った場合は，対称軌道(F25)を用いない計算（結晶学的な比喩で言えば，triclinic, $\mathbf{P_1}$ で計算する分子軌道計算）でも，原子数＝原子種(NEQ)数＝999 原子種まで計算が可能です.

試しに“パソコンで見る動く分子事典”添付 CD-ROM に入っていた **albatrossene**(6l.mol)という原子数 190，原子の種類の数(NEQ)190，原子軌道の数 418，総電子数は 760 個という巨大な有機分子を Windows Vista パソコン上の**ＤＶ−Ｘ *α* 法計算支援環境**で計算してみました.

本件，詳しくは岡山理科大学・坂根の以下の URL のブログをご参照下さい.

【Windows Vista における，原子数 190 の有機分子“albatrossene”の DV−*Xα* 法分子軌道計算と HOMO の三次元可視化】

http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50155295.html

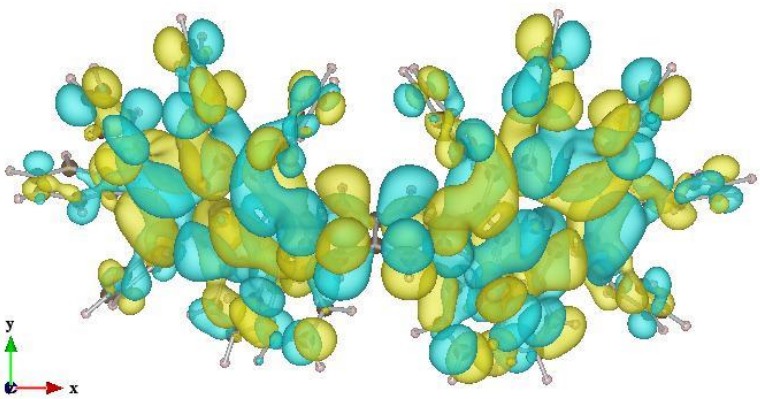
【Windows Vista における，原子数 190 の有機分子“albatrossene”の DV−*Xα* 法分子軌道計算と LUMO および静電ポテンシャルマップの三次元可視化】

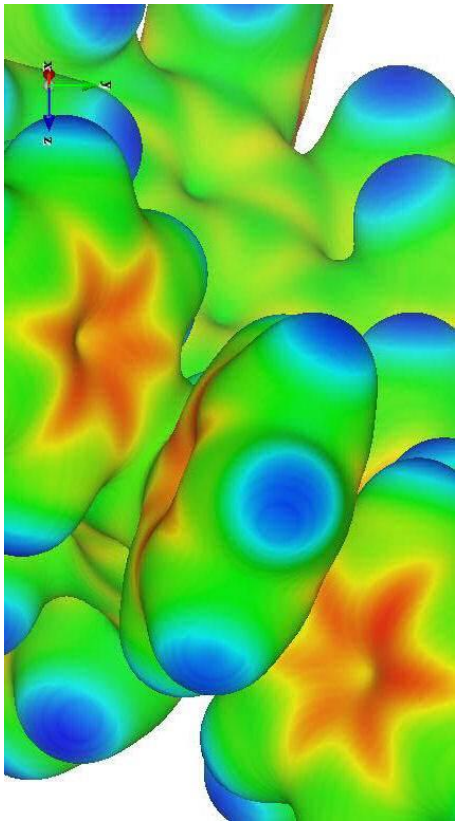
http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50155348.html

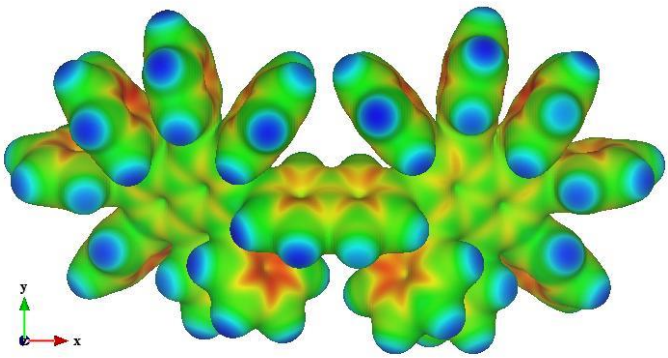
をご参照下さい．何の問題もなくしかも驚くほど短時間で，高精度な電子状態が求まりました.

【新公開プログラム紹介および環境構築方法】に関しては以下をご参照下さい.

http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50160415.html







【原子数 190 の有機分子“albatrossene”（$C_{114}H_{76}$）の F05 の先頭部分】

```
    8
  MOLECULAR CALCULATION OF *****            3.50000   -1.00000      1
SCFSQGRN       10   30020000      199999      0      0     -3      0      0.1000000000D-05
  190   190   418   190   190        0
    1   6.0     2   6.0     3   6.0     4   6.0     5   6.0     6   6.0     7   6.0     8   6.0
    9   6.0    10   6.0    11   6.0    12   6.0    13   6.0    14   6.0    15   6.0    16   6.0
   17   6.0    18   6.0    19   6.0    20   6.0    21   6.0    22   6.0    23   6.0    24   6.0
   25   6.0    26   6.0    27   6.0    28   6.0    29   6.0    30   6.0    31   6.0    32   1.0
   33   1.0    34   1.0    35   1.0    36   1.0    37   1.0    38   1.0    39   1.0    40   1.0
   41   1.0    42   1.0    43   6.0    44   1.0    45   1.0    46   1.0    47   1.0    48   1.0
   49   1.0    50   1.0    51   6.0    52   6.0    53   6.0    54   6.0    55   6.0    56   6.0
   57   6.0    58   6.0    59   6.0    60   6.0    61   6.0    62   6.0    63   6.0    64   6.0
   65   6.0    66   6.0    67   6.0    68   6.0    69   6.0    70   6.0    71   6.0    72   6.0
   73   6.0    74   6.0    75   6.0    76   6.0    77   6.0    78   1.0    79   1.0    80   1.0
   81   1.0    82   1.0    83   1.0    84   1.0    85   1.0    86   1.0    87   1.0    88   1.0
   89   1.0    90   1.0    91   1.0    92   1.0    93   1.0    94   1.0    95   1.0    96   1.0
   97   1.0    98   6.0    99   6.0   100   6.0   101   6.0   102   6.0   103   6.0   104   6.0
  105   6.0   106   6.0   107   6.0   108   6.0   109   6.0   110   6.0   111   6.0   112   6.0
  113   6.0   114   6.0   115   6.0   116   6.0   117   6.0   118   6.0   119   6.0   120   6.0
  121   6.0   122   6.0   123   6.0   124   6.0   125   6.0   126   6.0   127   6.0   128   6.0
  129   6.0   130   6.0   131   6.0   132   6.0   133   6.0   134   6.0   135   6.0   136   6.0
  137   6.0   138   6.0   139   6.0   140   6.0   141   6.0   142   6.0   143   6.0   144   6.0
  145   6.0   146   6.0   147   6.0   148   6.0   149   6.0   150   6.0   151   6.0   152   6.0
  153   1.0   154   1.0   155   1.0   156   1.0   157   1.0   158   1.0   159   1.0   160   1.0
  161   1.0   162   1.0   163   1.0   164   1.0   165   1.0   166   1.0   167   1.0   168   1.0
  169   1.0   170   1.0   171   1.0   172   1.0   173   1.0   174   1.0   175   1.0   176   1.0
  177   1.0   178   1.0   179   1.0   180   1.0   181   1.0   182   1.0   183   1.0   184   1.0
  185   1.0   186   1.0   187   1.0   188   1.0   189   1.0   190   1.0
  760.00000         0         0    0.00000         0         0    0.00000         0         0    0.00000
```

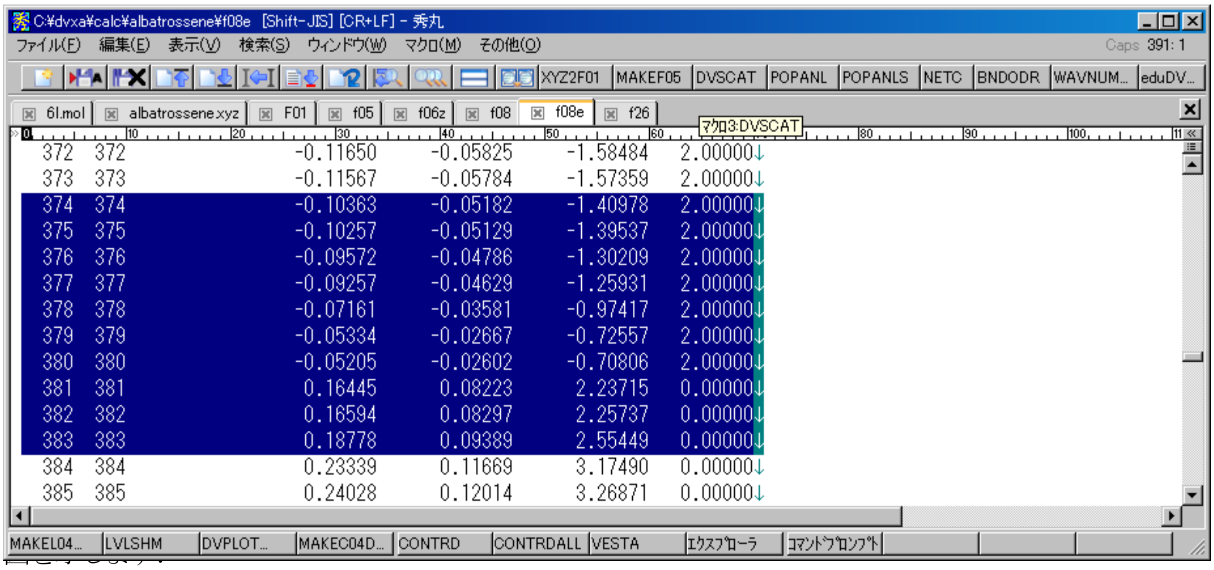
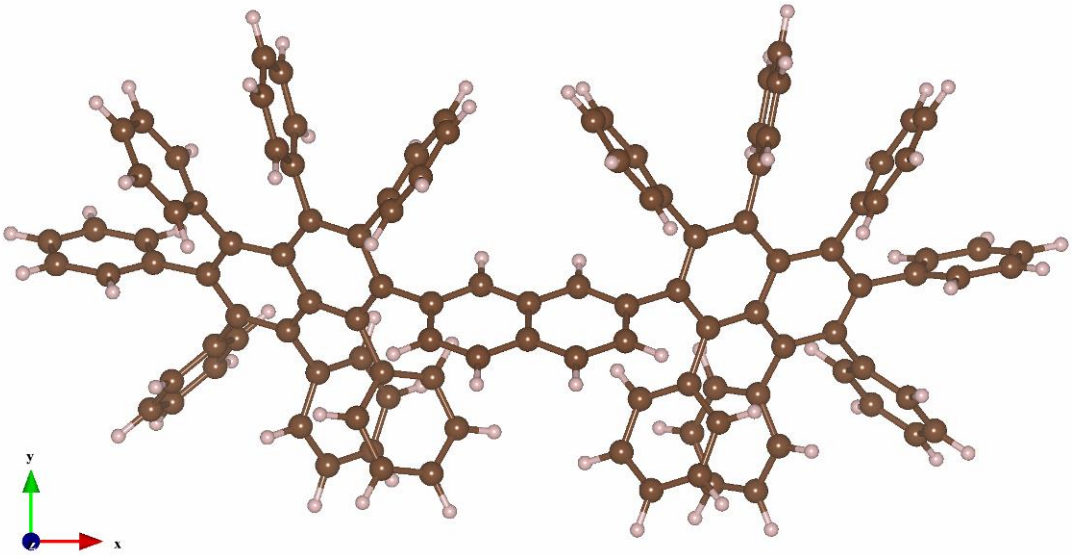


図 1．ボール＆スティック
図 2．分子軌道名“383”(LUMO+2)
図 3．分子軌道名“382”(LUMO+1)
図 4．分子軌道名“381”(LUMO)
図 5．分子軌道名“380”(HOMO)
図 6．分子軌道名“379”(HOMO−1)
図 7．分子軌道名“378”(HOMO−2)
図 8．分子軌道名“377”(HOMO−3)
図 9．分子軌道名“376”(HOMO−4)
図 10．分子軌道名“375”(HOMO−5)
図 11．分子軌道名“374”(HOMO−6)
図 12．静電ポテンシャルマップ
図 13. HOMO マップ
図 14. LUMO マップ



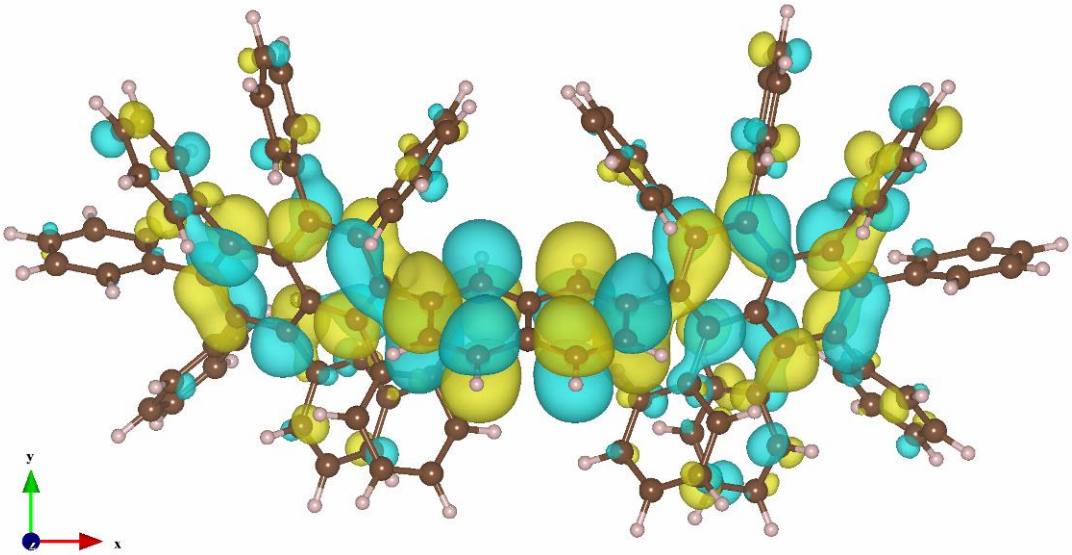


図 2. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“383”(LUMO+2)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

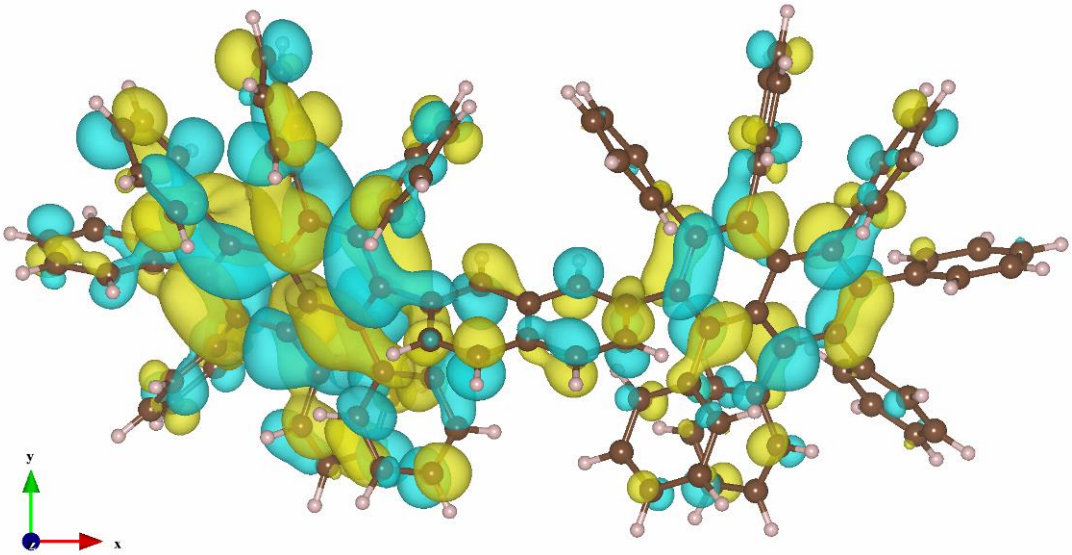


図 3. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“382”(LUMO+1)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

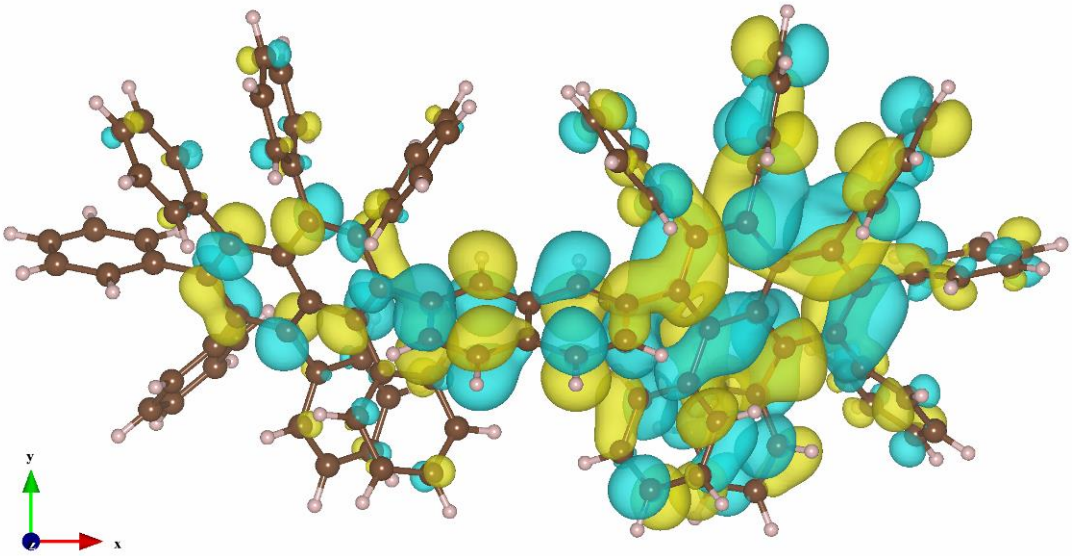


図 4. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“381”(LUMO)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

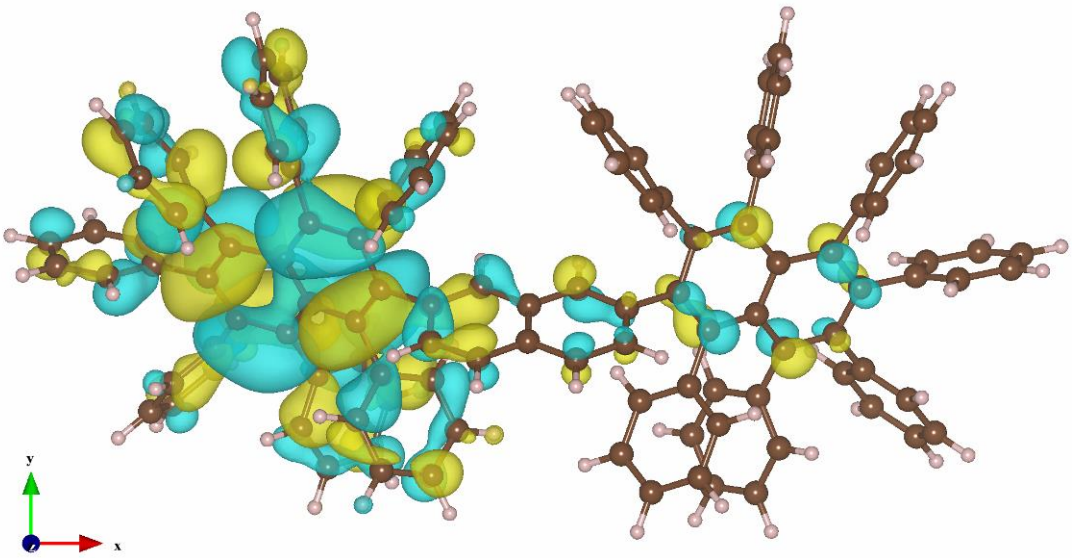


図 5. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“380”(HOMO)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

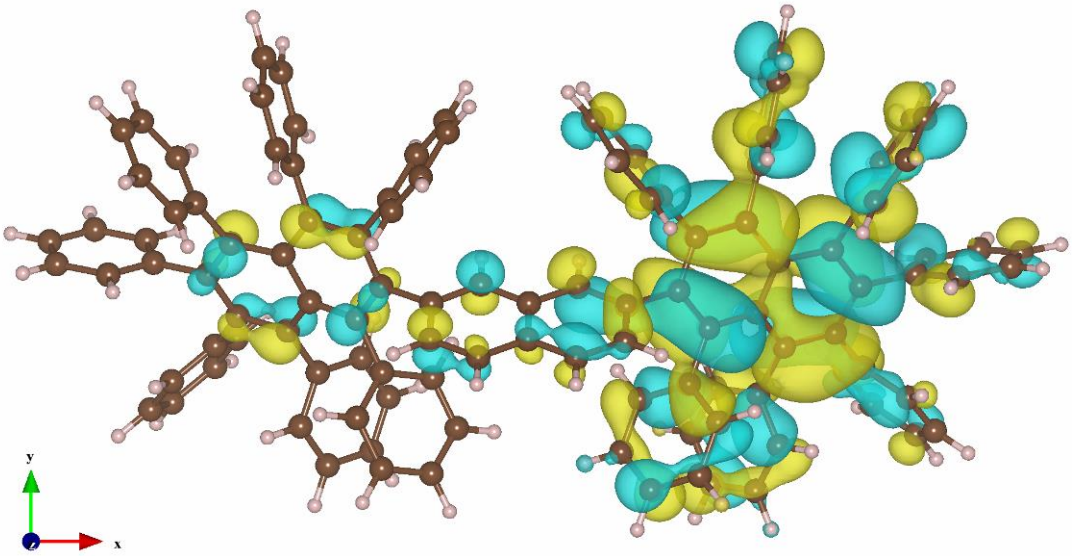


図 6. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“379”(HOMO−1)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

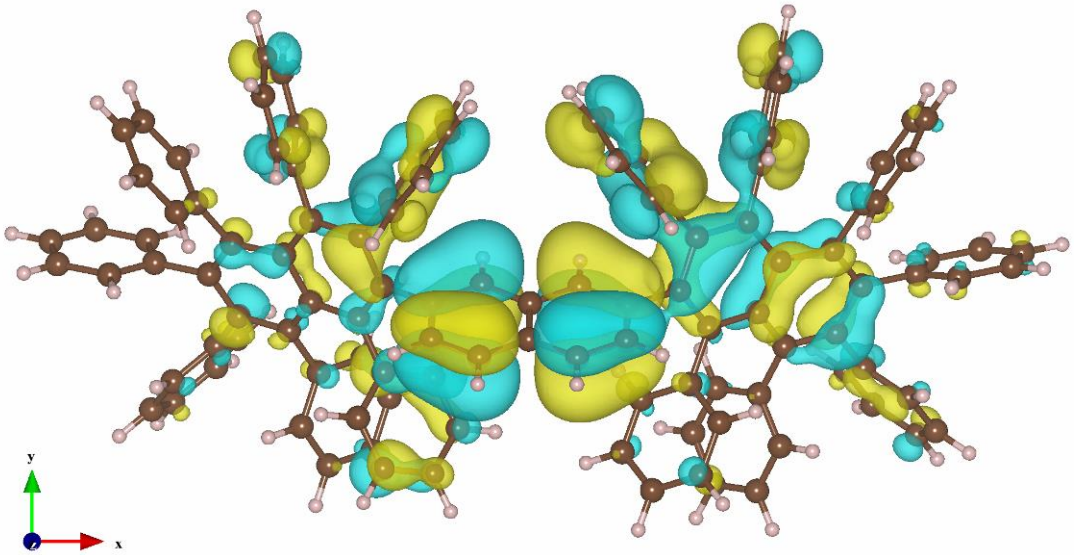


図 7. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“378”(HOMO−2)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

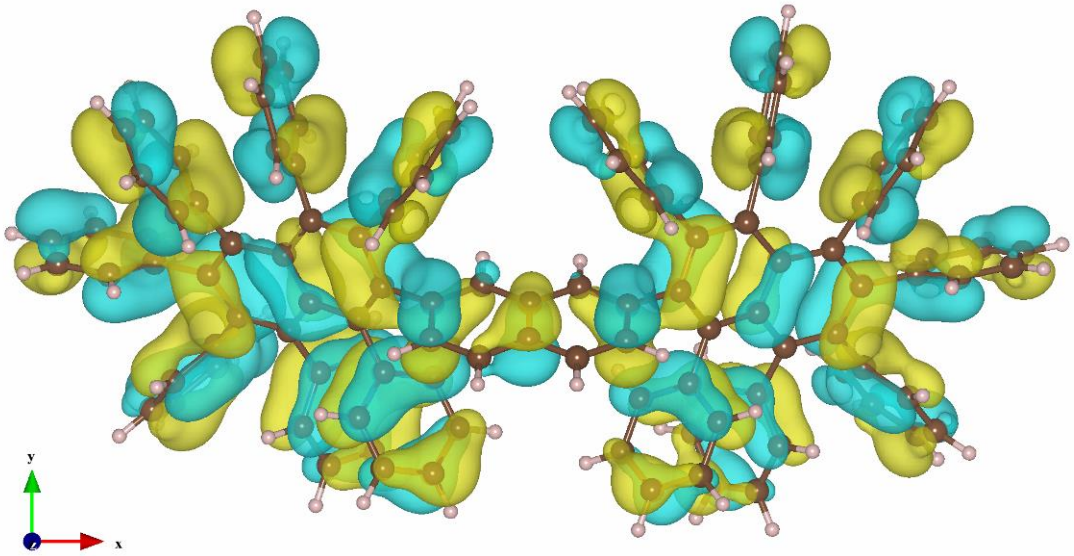


図 8. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“377”(HOMO−3)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

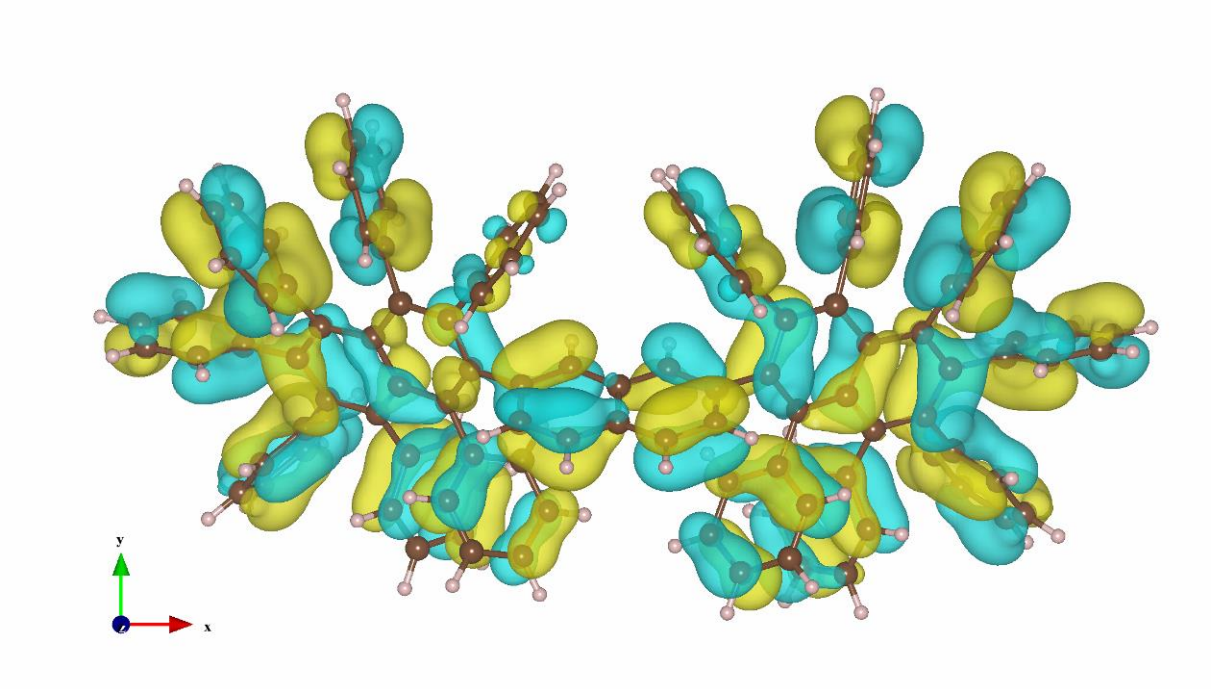


図 9. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“376”(HOMO−4)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

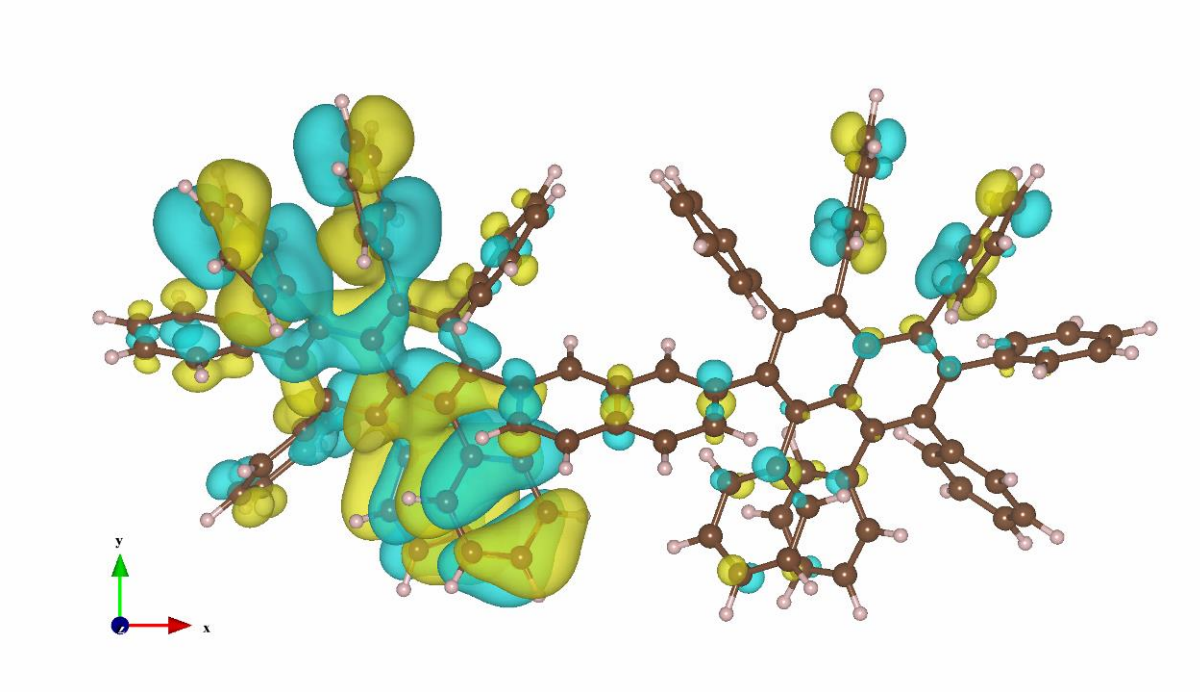


図 10. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の分子軌道“375”(HOMO−5)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

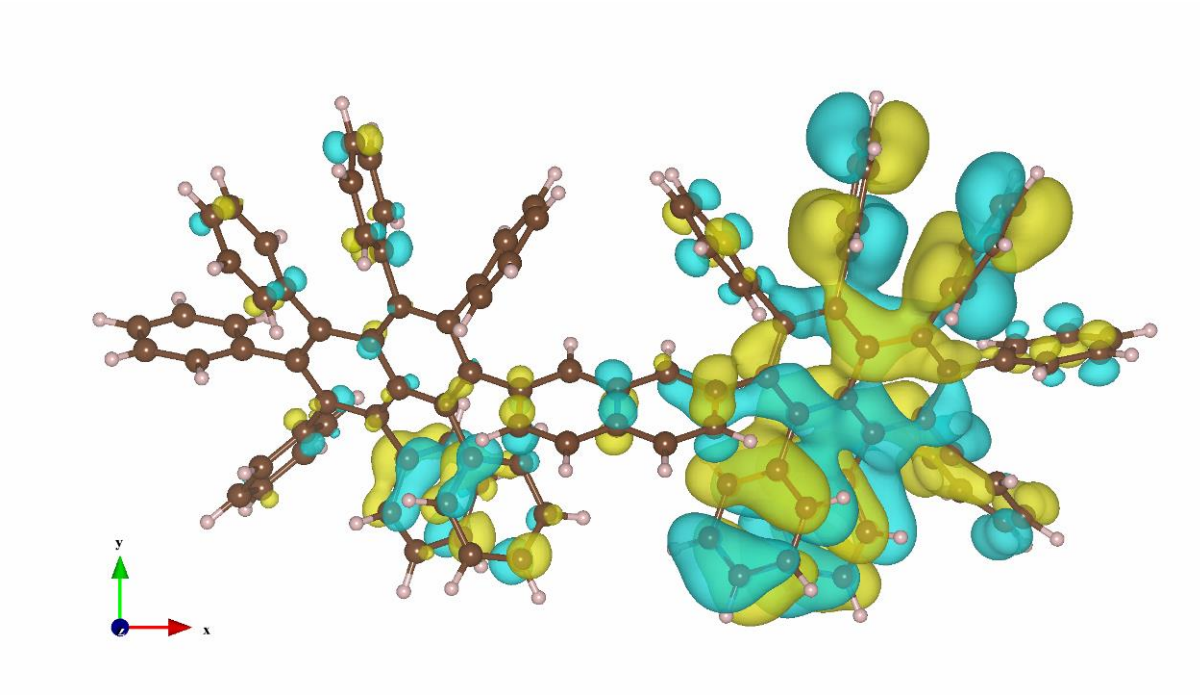


図 11. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の
分子軌道“374”(HOMO−6)の等値面表示(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

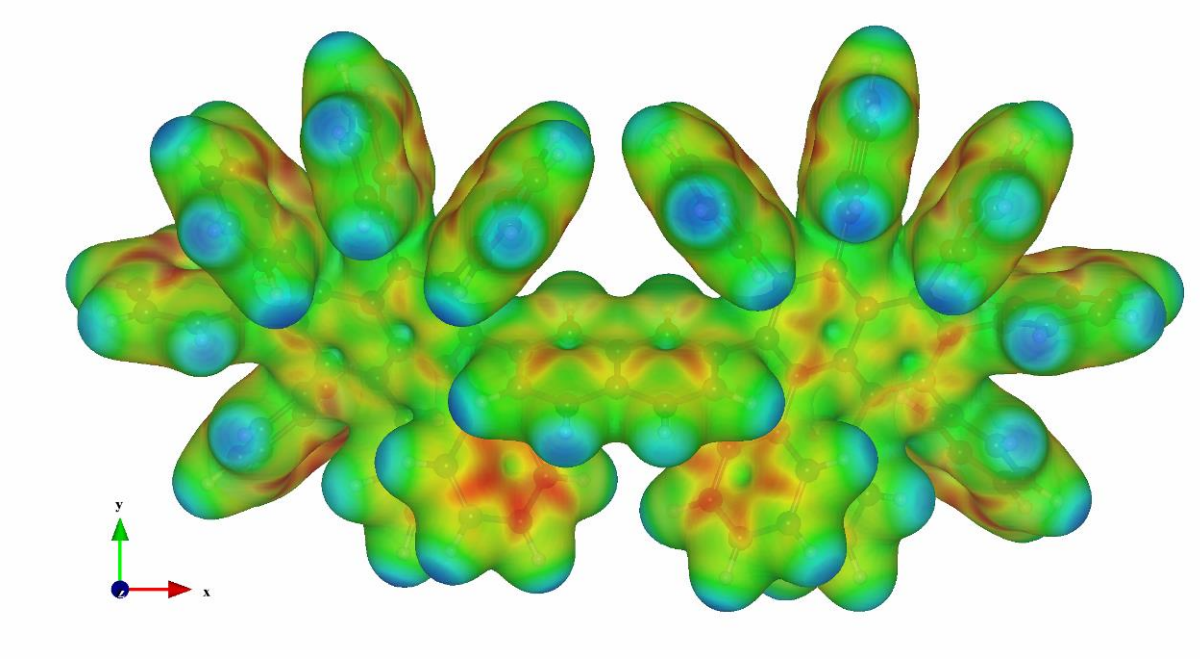


図 12. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の
静電ポテンシャルマップ
(等電子密度表面に静電ポテンシャルの大小で彩色を施した図)
(赤色:負の電荷をもつ原子がある場所, 青色:正の電荷を持つ原子がある場所)
(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

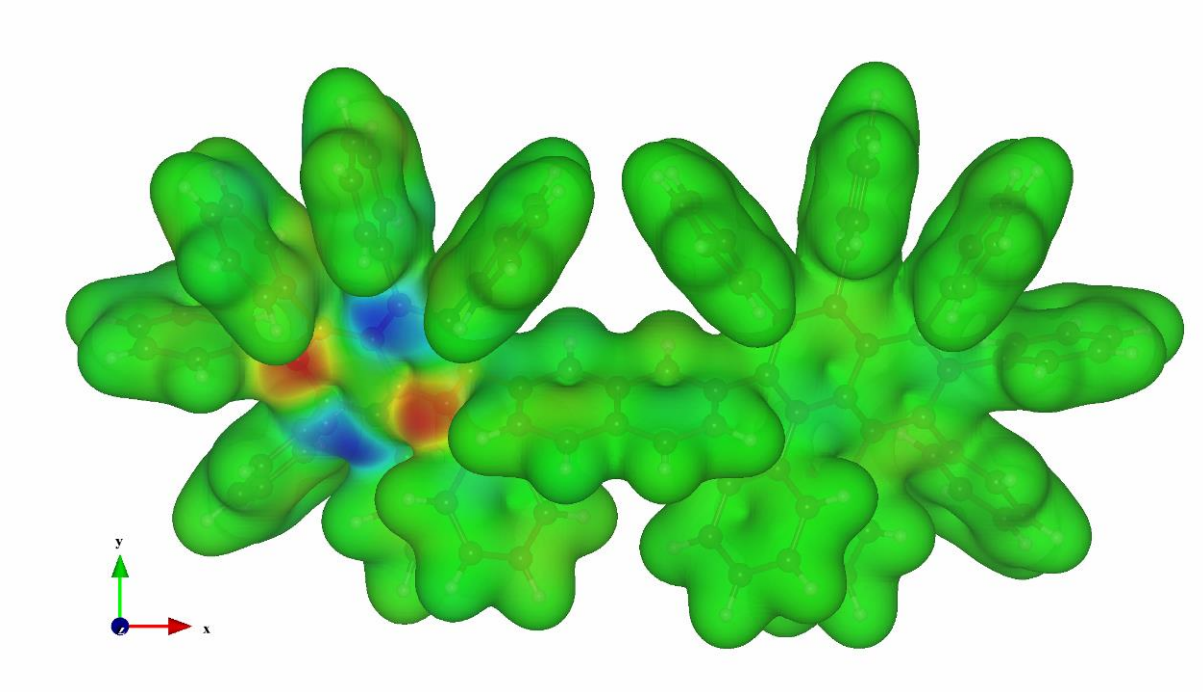


図 13. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の
HOMO マップ
(等電子密度表面に HOMO の大小で彩色を施した図)
(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

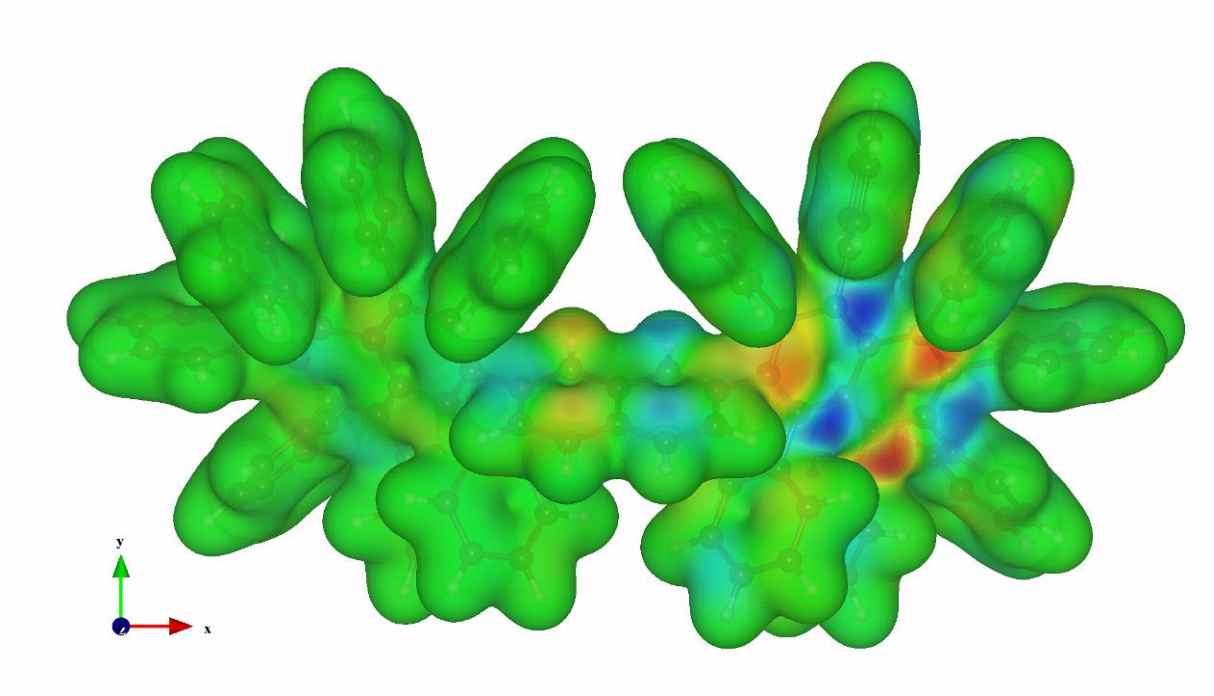


図 14. VESTA で描いた原子数 190 の有機分子“albatrossene”($C_{114}H_{76}$)の
LUMO マップ
(等電子密度表面に LUMO の大小で彩色を施した図)
(Isosurface level: $0.01a_0^{-3/2}$)

３．粉末・微小結晶解析結果の CIF（*.cif）を使う場合

人類はすでに 2 億 400 万種類を超える化学物質(有機・無機物質)の合成・単離を終え，さらにその数は増え続けています(https://www.cas.org/cas-data/cas-registry)．全ての化学物質は周期表の 118 種類の元素(https://iupac.org/what-we-do/periodic-table-of-elements/)の原子の組み合わせに過ぎません．

プラスの電荷を持った原子核とプラスの電荷を持った原子核がクーロン反発することなく結合できるのはマイナスの電荷をもった電子がそこに存在しているからです．電子の存在こそが化学結合（イオン結合，共有結合，配位結合，分子内水素結合，分子間水素結合，金属結合，単結合，二重結合，三重結合など）の正体です．しかし電子が存在していてもプラスの電荷を持った原子核とプラスの電荷を持った原子核が必ずしも化学結合するとは限りません．実験室で合成実験を試みてみないと，その化学物質は合成できるのかできないのか分からないのです．

DV−Xα分子軌道計算プログラムは研究の最先端で使われている本格的な電子状態計算（分子軌道計算）プログラムです．足立裕彦先生が開発されたプログラムで，現在では日本・韓国を中心に世界各国で使われています．第一原理計算の一種で周期表のほぼすべての原子を同じ精度で取り扱うことができます．二十数年前では何億円もする大型計算機やスーパーコンピュータ，何百万円もするエンジニアリング・ワークステーション(EWS)でしか計算ができなかった極めて本格的な分子軌道計算プログラムです．現在の標準的な Windows パソコン（ノートパソコンでも OK）は二十数年前の大型計算機，スパコン，EWS とほぼ同等，あるいはむしろ高性能ですから，今や，どなたでも気楽にパソコンで本格的な電子状態計算のできる時代が到来しているのです．

化学の本質は千姿万態の電子の世界です．化学の反応も，化学物質の色も，蛍光物質の発する光も，ミクロの世界の電子の立ち居振る舞いを我々人間はマクロに見ているに過ぎません．

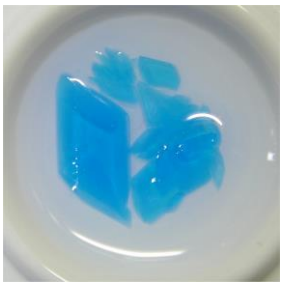
粉末や微結晶にＸ線を照射した場合，物質中の電子によってＸ線が反射（回折）するという現象が起こります．Ｘ線回折という実験はこの現象を利用して，粉末や微結晶におけるミクロサイズでの電子密度分布（＝原子核位置と原子番号）を測定・決定していることになります．

しかしそうして実験的に決定した電子密度分布情報だけでは原子番号と原子座標は決定できても，どの電子がどの原子のどの原子軌道の電子なのか，結合に使われている電子の数はどれぐらいなのか，電子は僅かにどこに偏って分布しているのか，などの議論はなかなかできません．

波動関数を二乗したものが電子の発見される確率の大きさ，内殻から電子の数の分だけそれを足していけば電子密度になります．逆に電子密度の情報からは元の波動関数の情報（位相の情報）は分かりません．波動関数の位相がプラスであろうとマイナスであろうと，二乗してしまえばプラスの値である電子の発見される確率の大きさになってしまいます．

実験的に求めた電子密度の情報からだけでは，そもそもその電子密度がどのような原子のどのような原子基底関数の集積から成っているのか，HOMO や LUMO がどんな形をしているのか，それが結合性の分子軌道なのか反結合性の分子軌道なのか，MO に関する情報は分かりません．せっかくＸ線回折という実験で電子密度分布を測定し，原子の種類と原子の座標を決定したのであれば，そのまま泉富士夫氏が開発された**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**で，量子化学に基づいた電子状態計算を行ってみることをお勧めします．

CIF(*.cif)さえ用意できているならば**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**でそれを open し，まずは【VESTA】ボタンを押してみて下さい．あとは前述の*.mol の時と同様に，作業の順序に予め配置されているボタンを押していくだけで驚くほど沢山の知見が得られます．そして様々な実験（例えば電子スペクトル，Ｘ線光電子スペクトルなど）から得られた物性の帰属（理解）にも役立つことでしょう．**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**は，世代や分野の壁を取り去り，学生，教員，初心研究者，熟練研究者，どなたにも使い始めやすく（経済的にも，技術的にも），痒いところに手が届くように心地よく便利なユニバーサルデザインの電子状態計算システムです．



例えば**硫酸銅五水和物 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$** の単結晶X線構造解析の**CIF** から銅錯陽イオンの**電子状態**を計算してみましょう.

硫酸銅五水和物 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ の結晶構造については下記文献に詳しい情報があります.

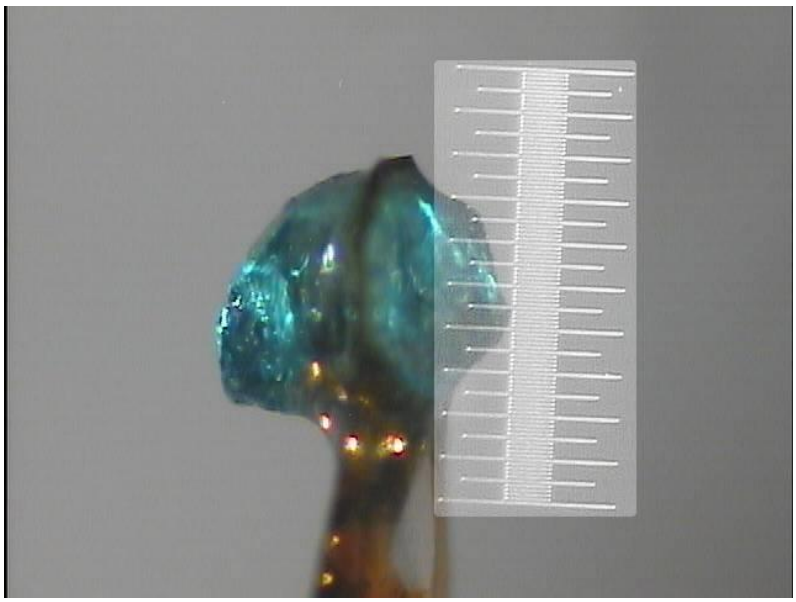
【文献】J. N. Varghese and E. N. Maslen,
"Electron Density in Non-Ideal Metal Complexes. I. Copper Sulphate Pentahydrate",
Acta Cryst., **B41**, 184-190 (1985).

ここでは，岡山理科大学 理学部 化学科の Rigaku Mercury CCD 単結晶X線自動解析装置でX線構造を決定した **CIF ファイル**を計算に用います.

岡山理科大学 理学部 化学科 でX線構造決定した硫酸銅五水和物の **CIF ファイル**は以下の URL からダウンロード入手することができます.

【硫酸銅五水和物の結晶構造】

https://www.dvxa.org/hme/cuso4/cuso4.html



【硫酸銅五水和物の **CIF**】

https://www.dvxa.org/hme/cuso4/cuso4.cif

Crystal Data

Crystal System: Triclinic

Space Group: $P\bar{1}$

a = 5.963(7) Å
b = 6.084(6) Å
c = 10.62(1) Å
α = 77.29(3) °
β = 82.42(4) °
γ = 72.48(3) °
V = 357.5(7) Å^3
Z = 2

Diffractometer: Rigaku/MSC Mercury CCD

Radiation: Mo Kα (λ = 0.71070 Å)

Temperature: -180℃

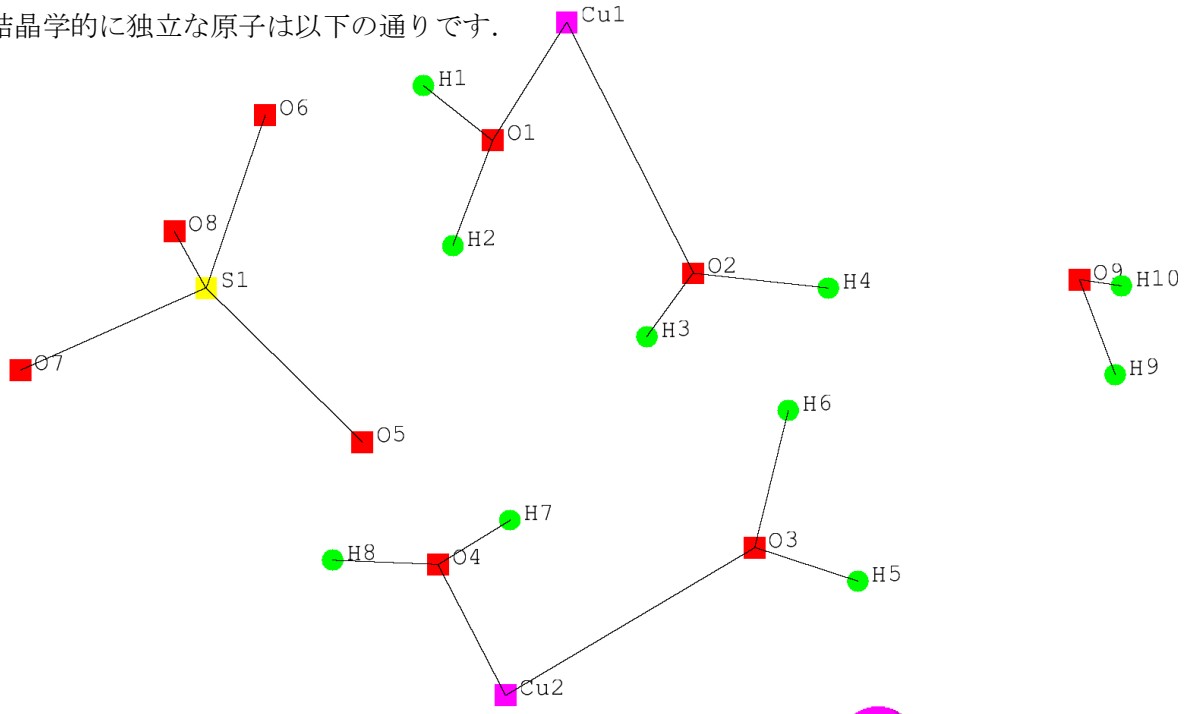
Voltage, Current: 50kV, 30mA

$2\theta_{max}$: 55°

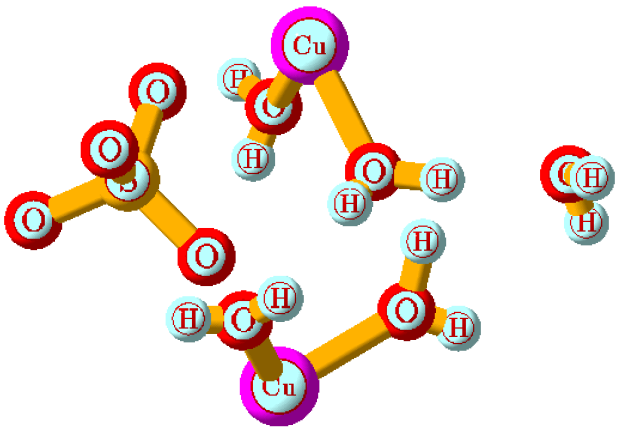
R = 5.4 %, Rw = 6.9 %

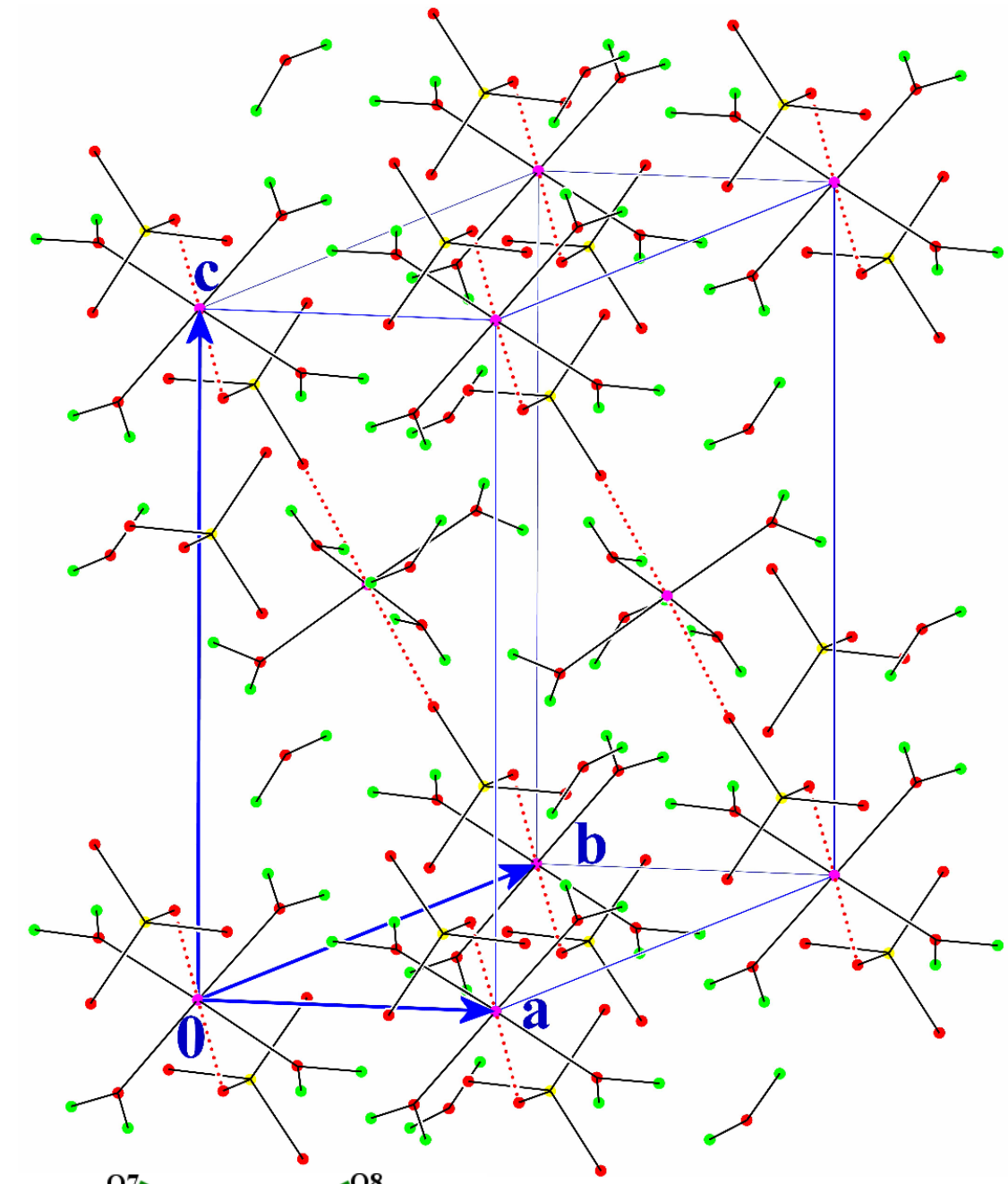
R1 = 2.7 % (I > 2.0σ(I))

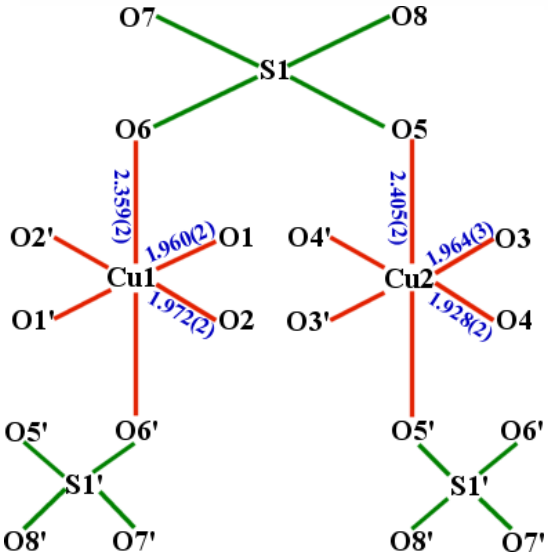
結晶学的に独立な原子は以下の通りです.

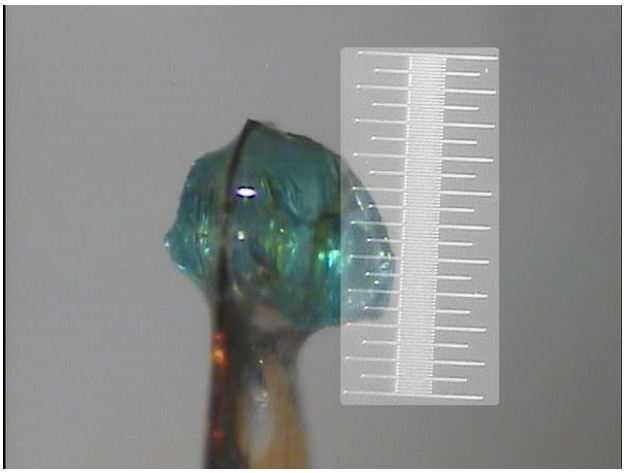


copper sulfate(II) pentahydrate



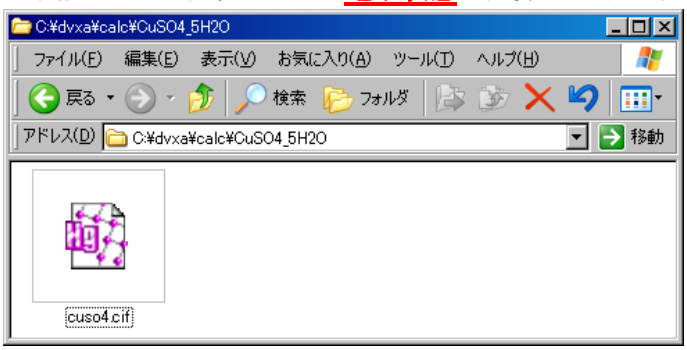

c
b
a
0


O7
O8
S1
O6
O5
2.359(2)
2.405(2)
O2'
1.960(2)
O1
O4'
1.964(3)
O3
Cu1
Cu2
O1'
1.972(2)
O2
O3'
1.928(2)
O4
O5'
O6'
O5'
O6'
S1'
S1'
O8'
O7'
O8'
O7'

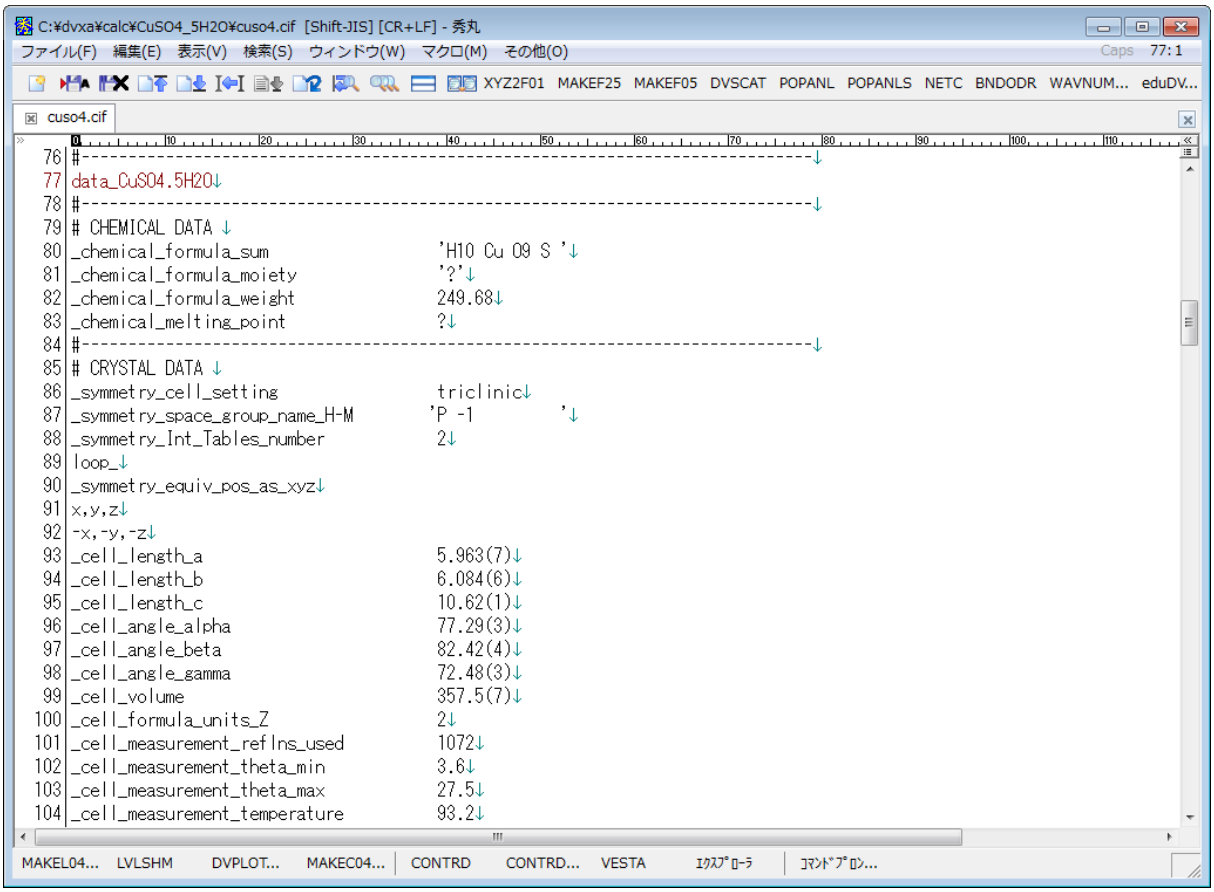


では“硫酸銅五水和物”の **CIF**, **cuso4.cif** を出発として銅錯イオンの電子状態を計算してみます.

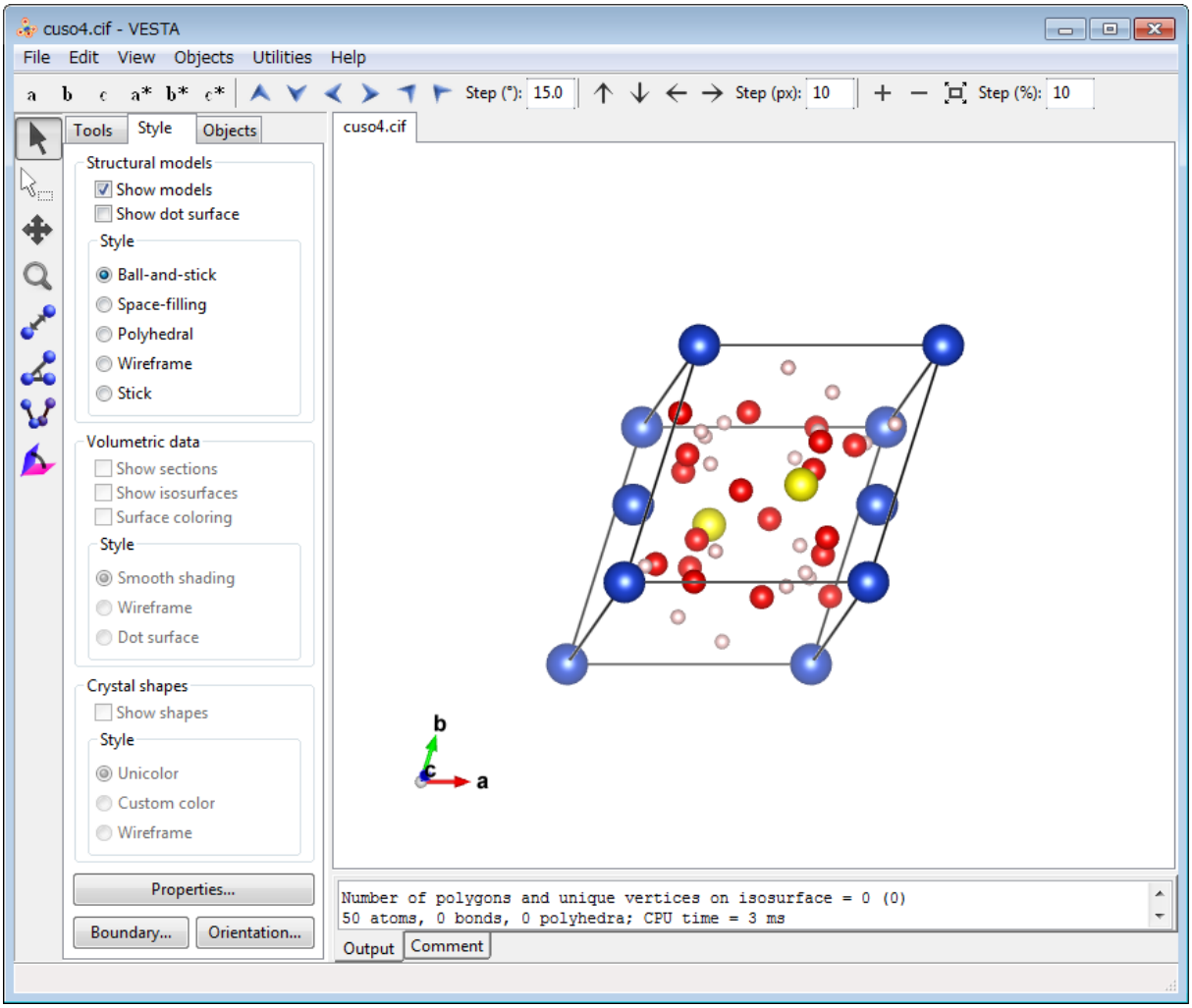
1．まず, **C:¥DVXA¥CALC** フォルダ内に新規フォルダを作成し, **CuSO4_5H2O** という名前をつけます.
C:¥DVXA¥CALC¥CuSO4_5H2O フォルダ内に **cuso4.cif** をコピーします.



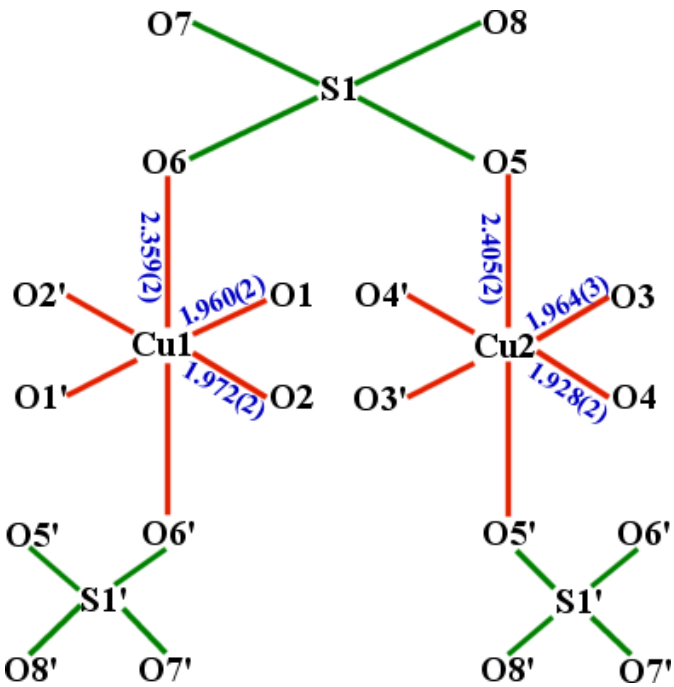
2．秀丸エディタを起動し, **C:¥DVXA¥CALC¥CuSO4_5H2O¥cuso4.cif** を開きます.



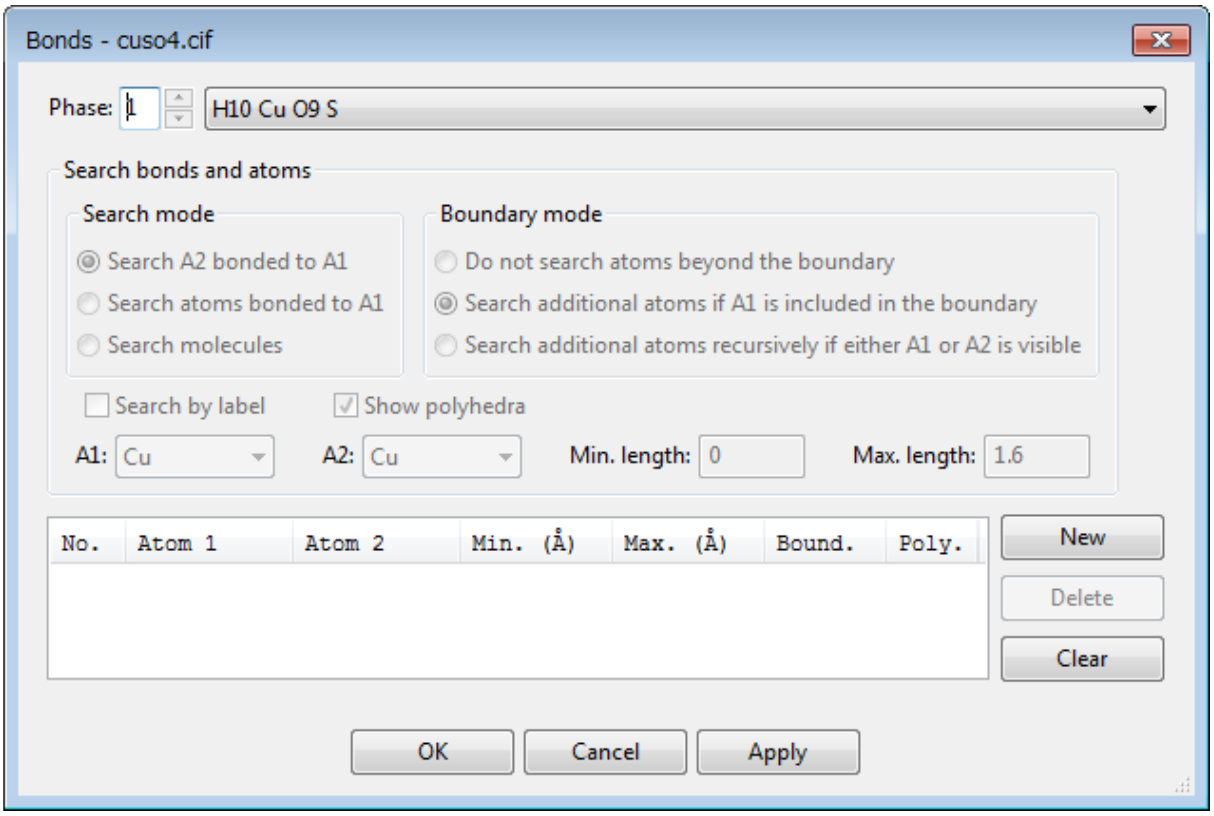
3．【VESTA】ボタンを押します（クリックします）．VESTA が立ち上がります.



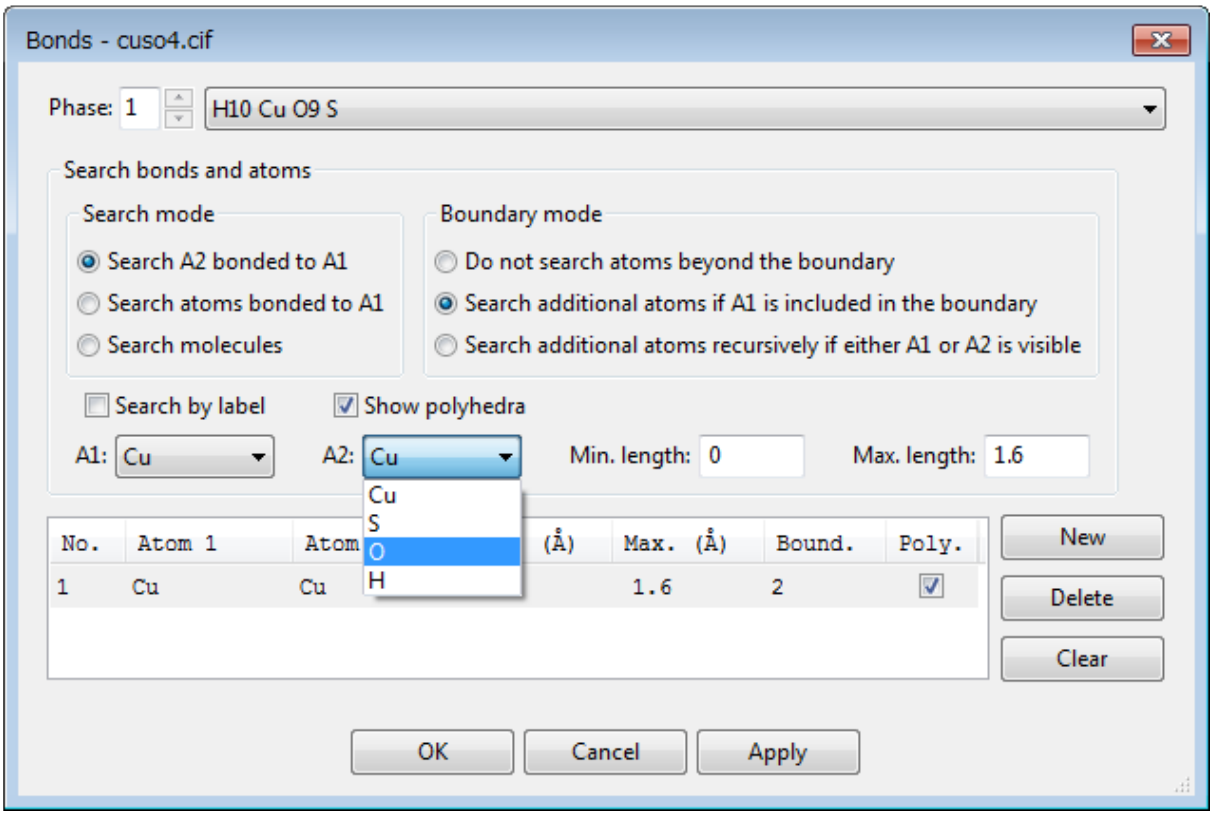

```
#-------------------------------------------
_geom_special_details↓
;↓
 ?↓
;↓
loop_↓
_geom_bond_atom_site_label_1↓
_geom_bond_atom_site_label_2↓
_geom_bond_distance↓
_geom_bond_site_symmetry_1↓
_geom_bond_site_symmetry_2↓
_geom_bond_publ_flag↓
 CU1        O1         1.960(2)    . . yes↓
 CU1        O1         1.960(2)    . 2_566 yes↓
 CU1        O2         1.972(2)    . . yes↓
 CU1        O2         1.972(2)    . 2_566 yes↓
 CU2        O3         1.964(3)    . . yes↓
 CU2        O3         1.964(3)    . 2_557 yes↓
 CU2        O4         1.928(2)    . . yes↓
 CU2        O4         1.928(2)    . 2_557 yes↓
 S1         O5         1.478(2)    . . yes↓
 S1         O6         1.475(2)    . . yes↓
 S1         O7         1.492(2)    . . yes↓
 S1         O8         1.472(2)    . . yes↓
#-------------------------------------------
```



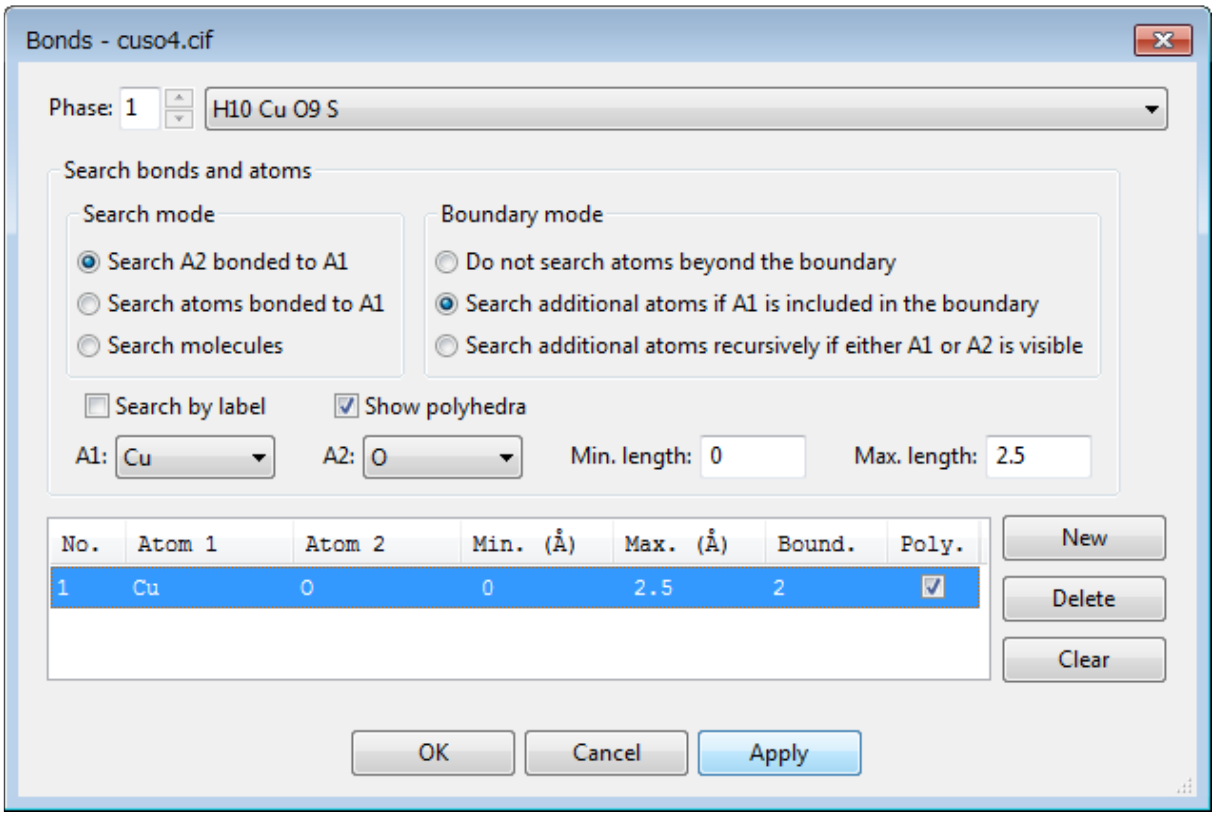
4．VESTA のメニューバーの Edit - Bonds…(Ctrl+B)で **Bonds** ウィンドウを開きます．



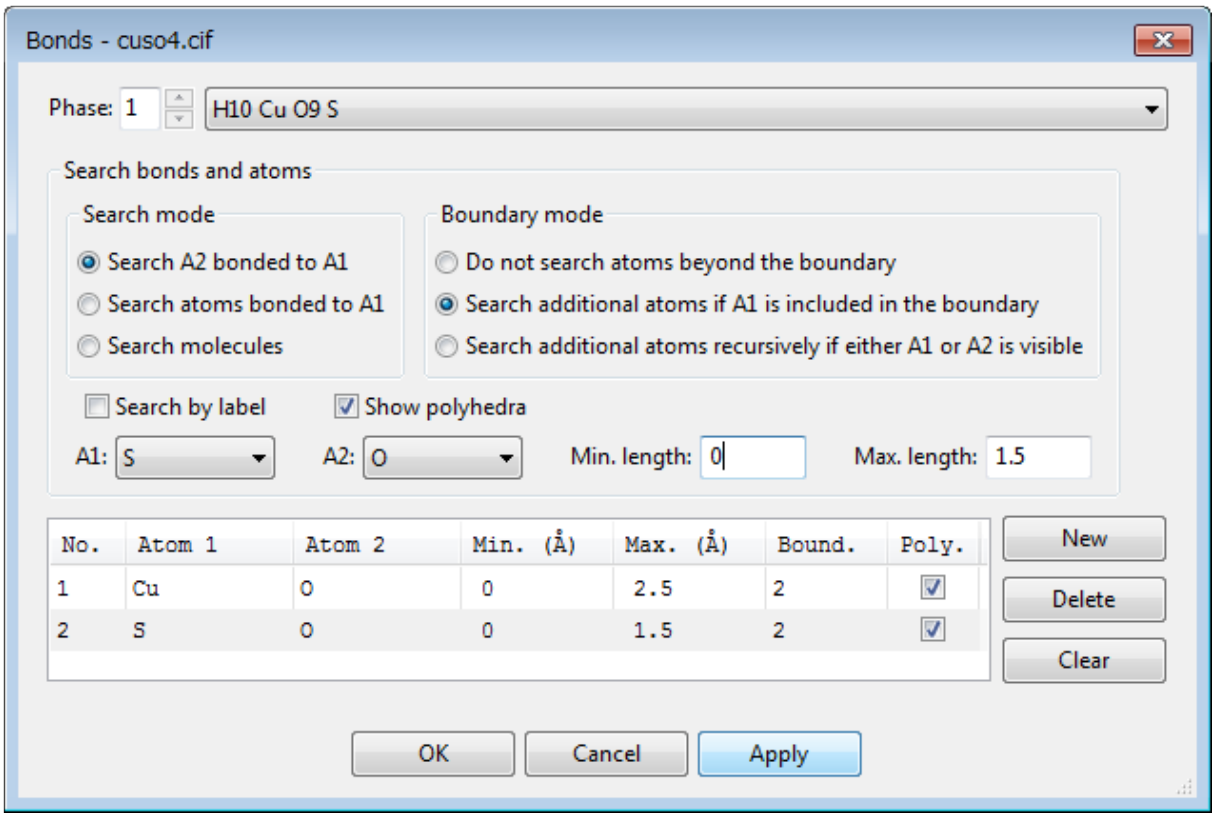
まず，【New】ボタンをクリックして，No.1 の行を作成します．まず最初に，銅ー酸素原子間の結合に線が描画されるように指定します．“Search bonds and atoms”の“Search mode”で **◎Search A2 bonded to A1** を選択し，**A1: Cu, A2: O** と，それぞれプルダウンメニューで元素記号を選択します．**Max. length:** の箇所には **2.5** を入力します（**2.5 Å** という意味）．



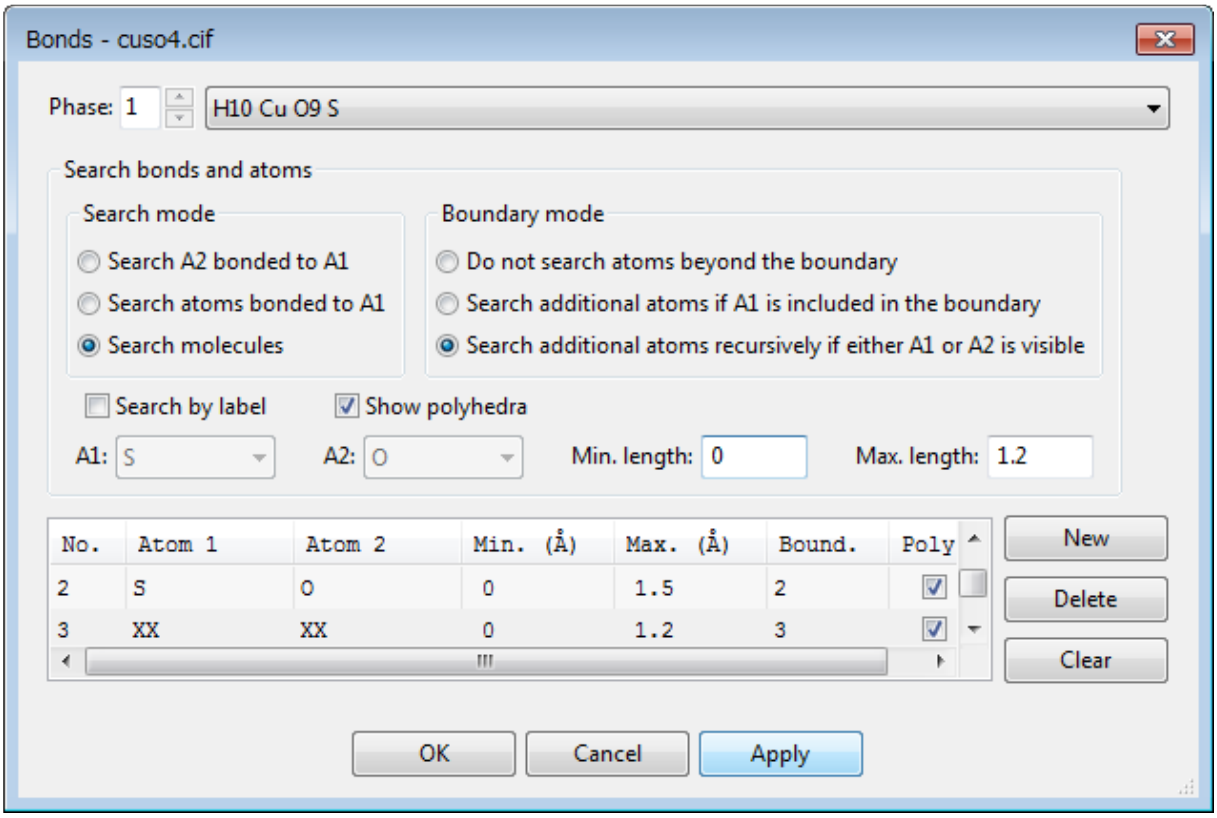
A1: Cu, A2: O, Max. length: 2.5 Å を指定したら，【Apply】ボタンを押します．グラフィックウィンドウで銅と酸素の間に結合の線が引かれていることを確認して下さい．



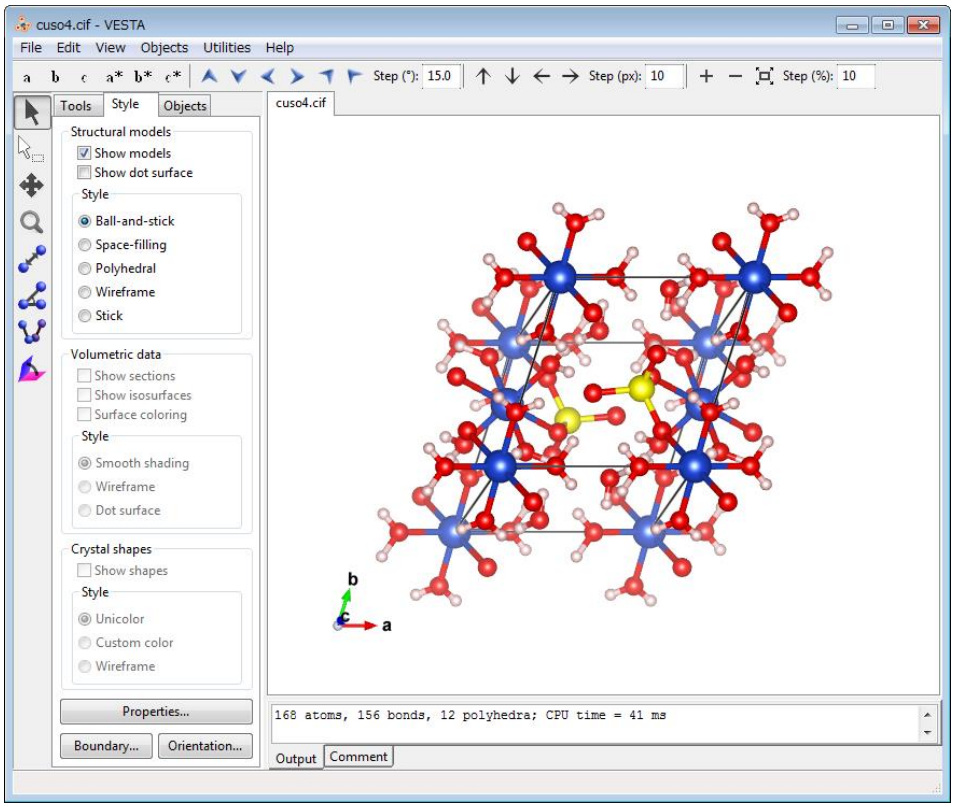
再び【New】ボタンをクリックし，表中に No. 2 の行を追加します．今度は硫黄－酸素原子間の結合に線が描画されるようにします．“Search mode”で **◎Search A2 bonded to A1** を選択し，**A1: S, A2: O, Max. length: 1.5 Å** を指定します．【Apply】ボタンを押します．



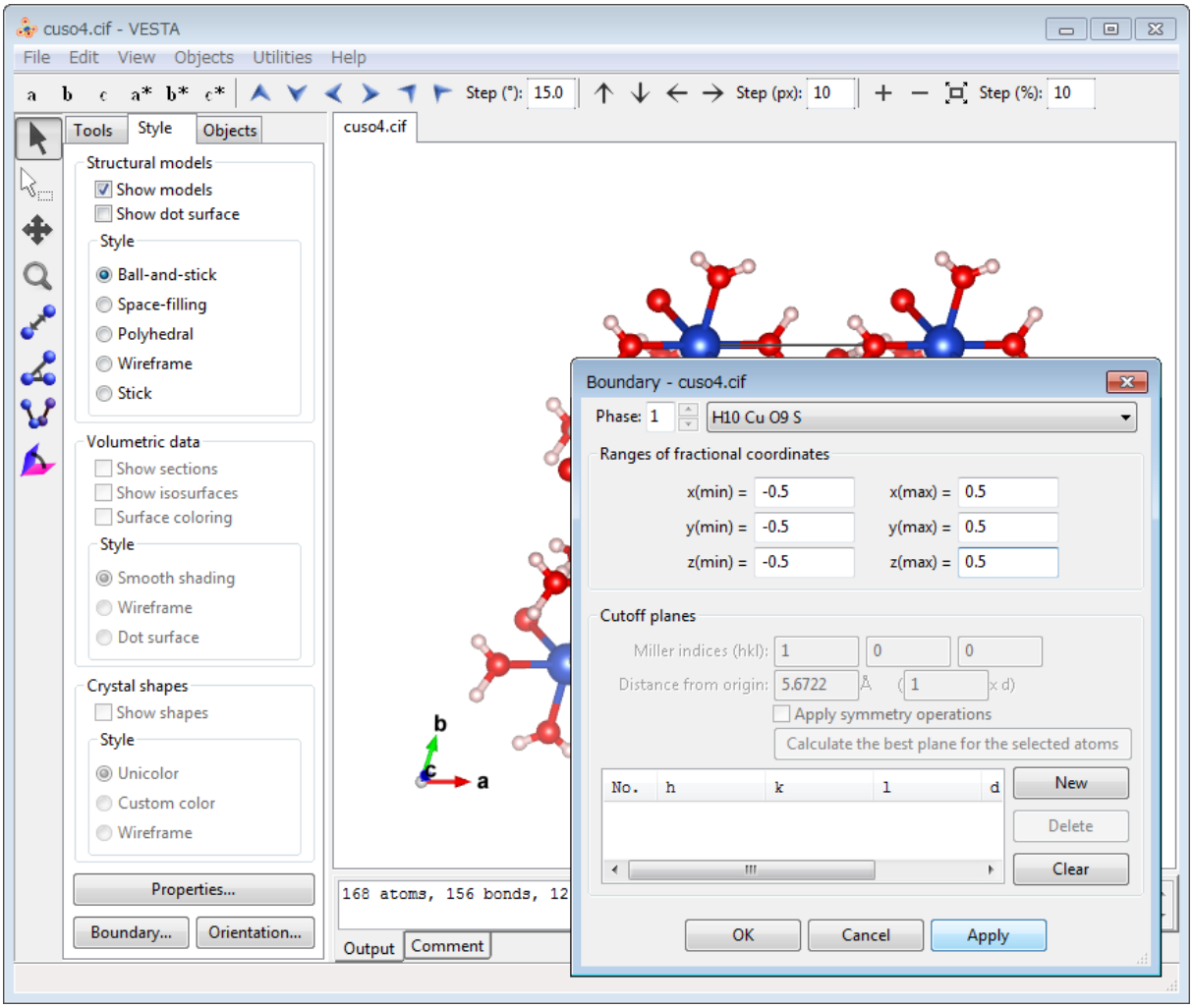
酸素－水素原子間の結合に関しては，次のようにします．1.2 Å 以下の原子間距離の結合はこのモデルでは酸素－水素間しかありませんので，“Search mode” で **◎Search molecules** を選択し，**Max. length: 1.2 Å** を指定すれば酸素－水素間の結合が描かれます（A1, A2 の指定は不要です）．【Apply】ボタンをクリックして下さい．

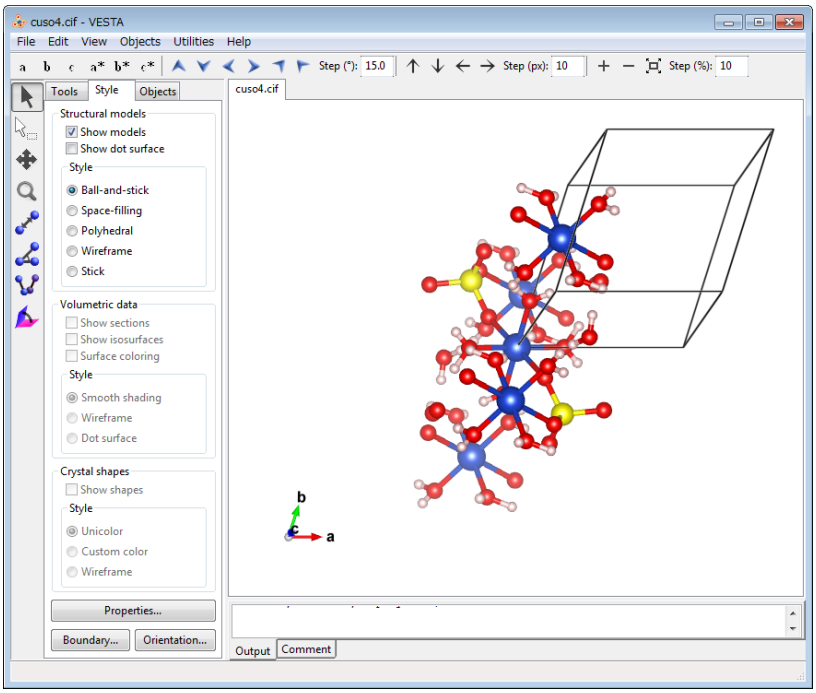


以上の操作で，以下のように必要な結合の線は全て描かれます．

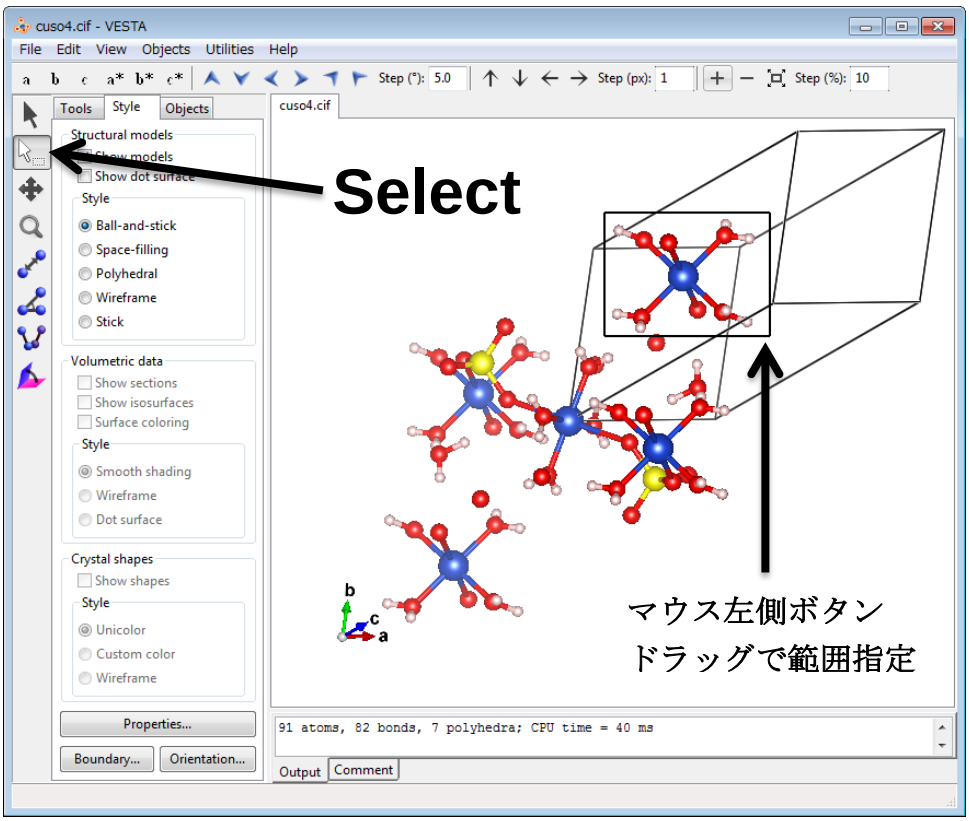


5．VESTA の左サイドパネルの【**Boundary...**】をクリックし，**Ranges of fractional coordinates** の範囲を x = 0.0〜1.0, y = 0.0〜1.0, z = 0.0〜1.0 から，x = −0.5〜0.5, y = −0.5〜0.5, z = −0.5〜0.5 に変更します．原点上の銅を中心金属とする錯イオンを計算対象とするためです．

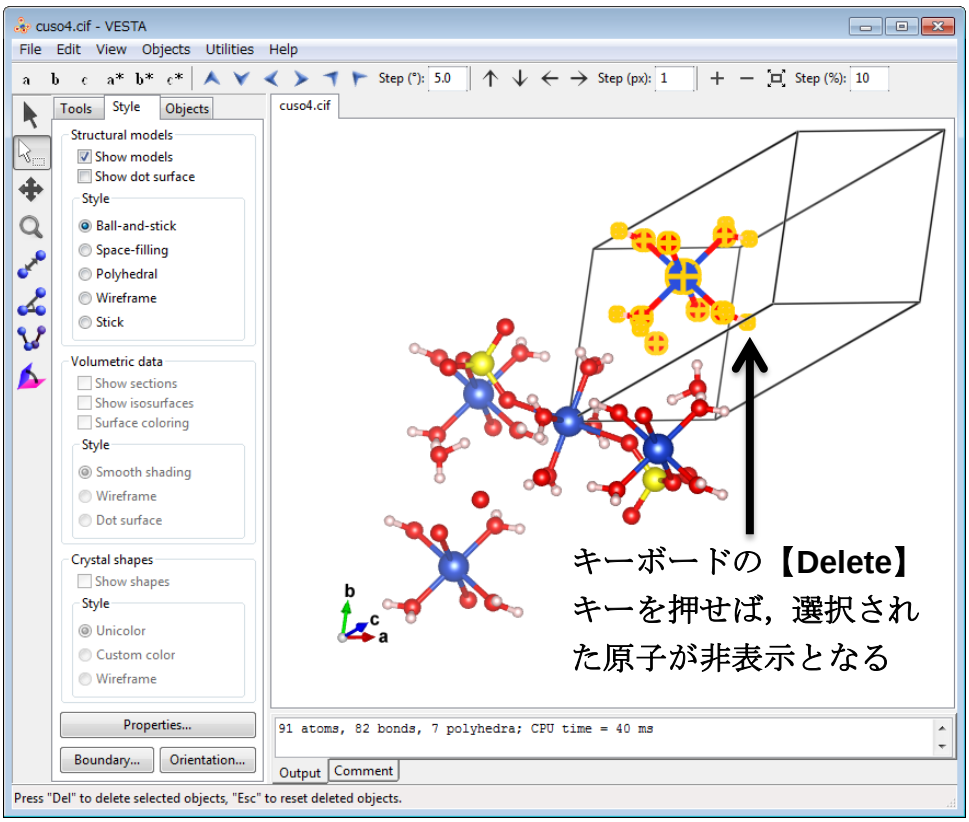




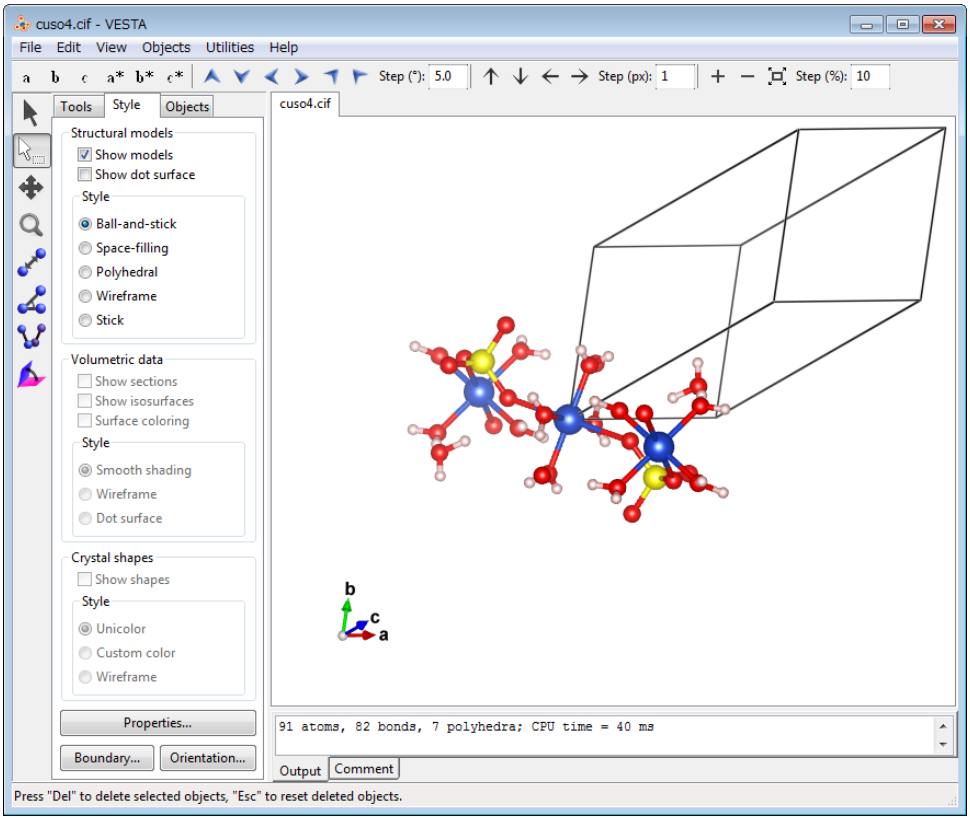
VESTA の一番左側の垂直のツールバーは，一番上から順に，黒い矢印が“Rotate (r)”，白い矢印が“Select (s)”，黒い十字型矢印が“Tlanslate (t)”，虫眼鏡が“Magnify (m)”というように設定されています．上から二番目の白い矢印“Select (s)”を選択し，グラフィックスエリアにて，マウスの左側ボタンでドラッグし，消したい原子団を範囲指定します．



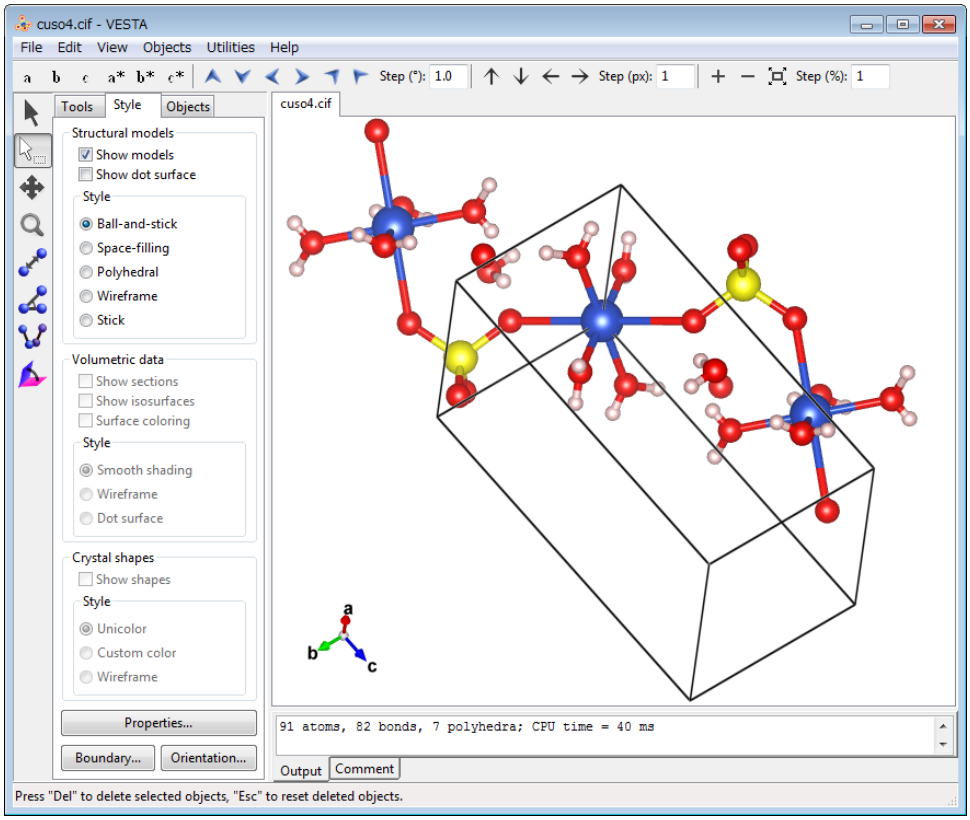
選択された原子団の原子はオレンジ色の線で囲まれます．消して問題がないことを確認後，キーボードの【Delete】キーを押せば，原子に非表示フラッグが立って非表示となります．



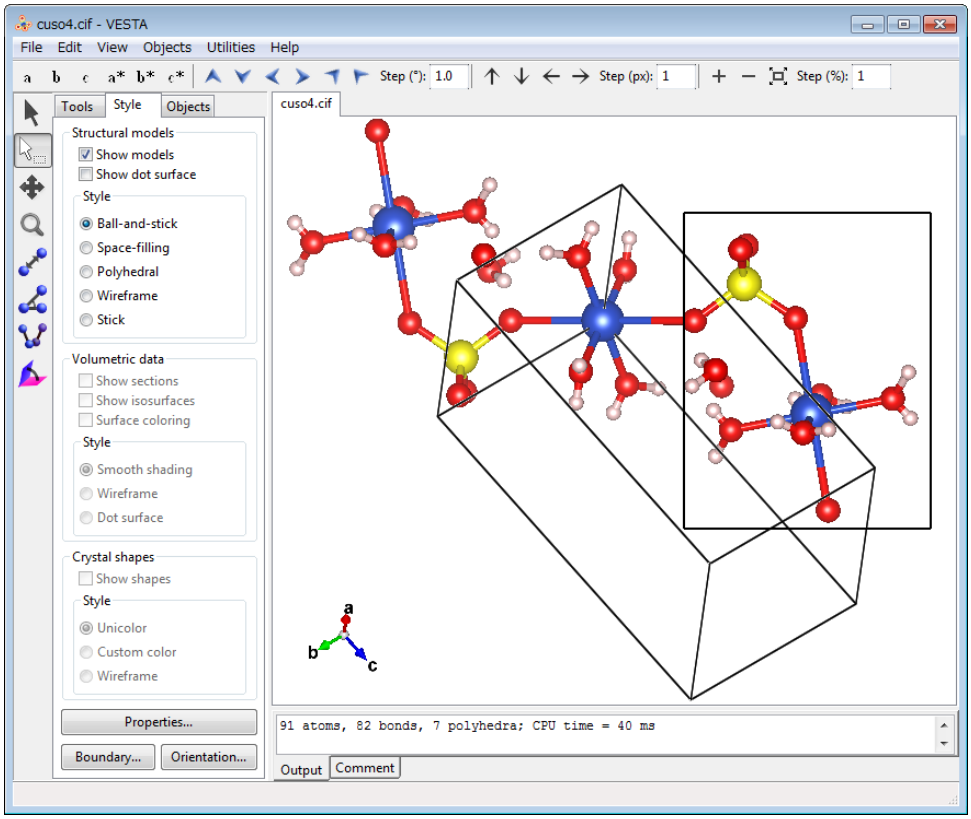
今回は硫酸銅五水和物 $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ の結晶構造のうち，結晶水や硫酸イオンを取り除いたテトラアクア銅(II)錯陽イオン$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$の 1 分子（錯イオン）を切り出して，その DV−$X\alpha$ 分子軌道計算を行います．そのために，分子軌道計算に含めない原子は，次々と非表示にしていきます．



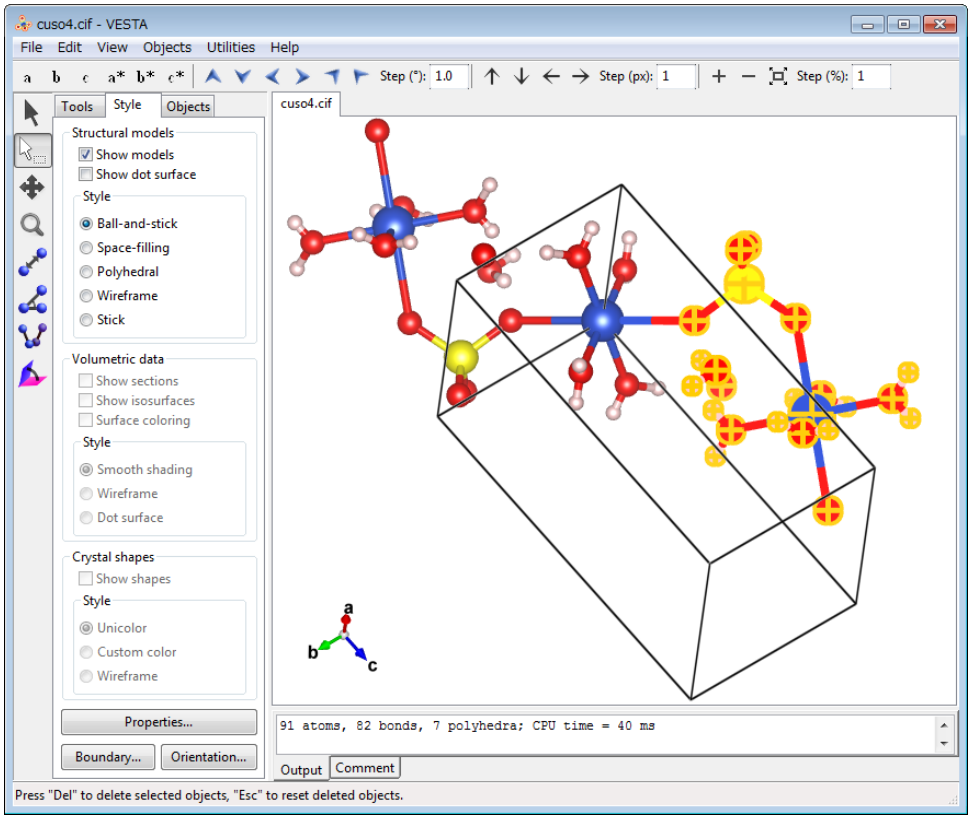
単位格子の原点上の銅イオン一つに着目し，その銅イオンおよびそれに配位する四つの水分子だけが残るよう，その他の原子を非表示にしていきます．

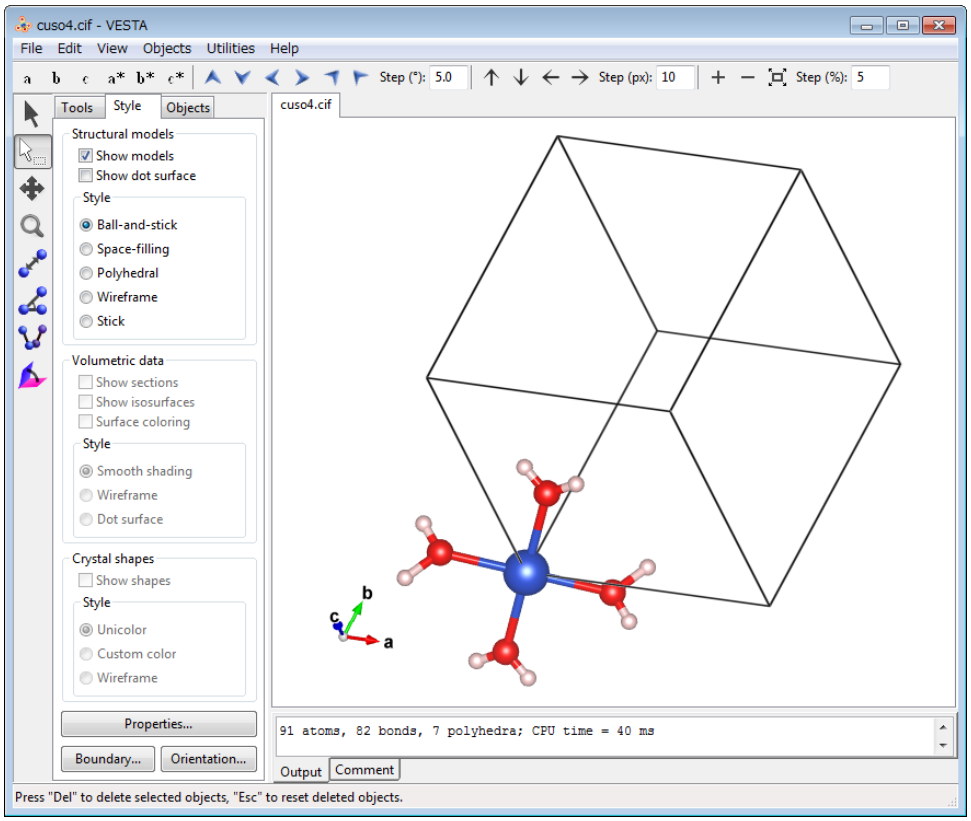


硫酸イオンは銅イオンに配位していると考えるのか，それとも配位しておらず対イオンであると考えるのかによって，錯体（錯イオン）部分の切り出し方が異なってきます．前述のように，今回の計算では硫酸イオンは配位していない（Cu は四配位）と考えて，$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$の電子状態を計算しますが，もし配位している（Cu は六配位）と考える場合は，$[Cu(H_2O)_4(SO_4)_2]^{2-}$を切り出して計算すれば良いことになります．水素結合を議論するなら結晶水も加えれば良いでしょう．



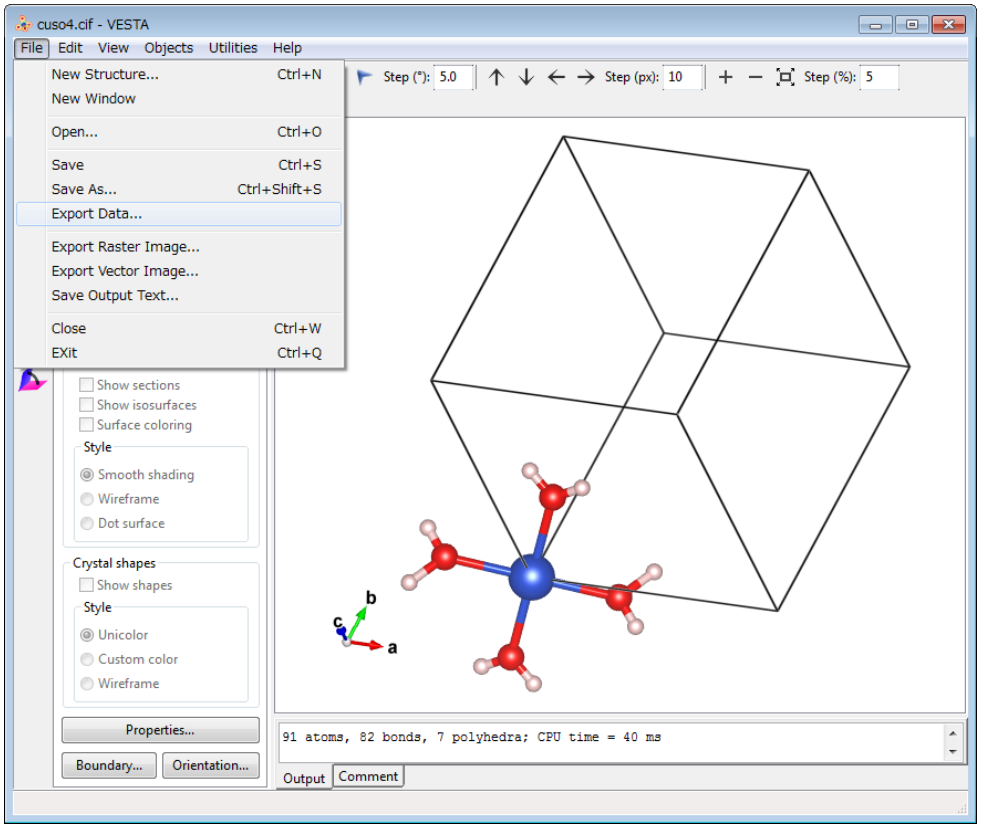
非表示にしたい原子団を選択し，キーボードの【Delete】キーを押して非表示にしていきます．

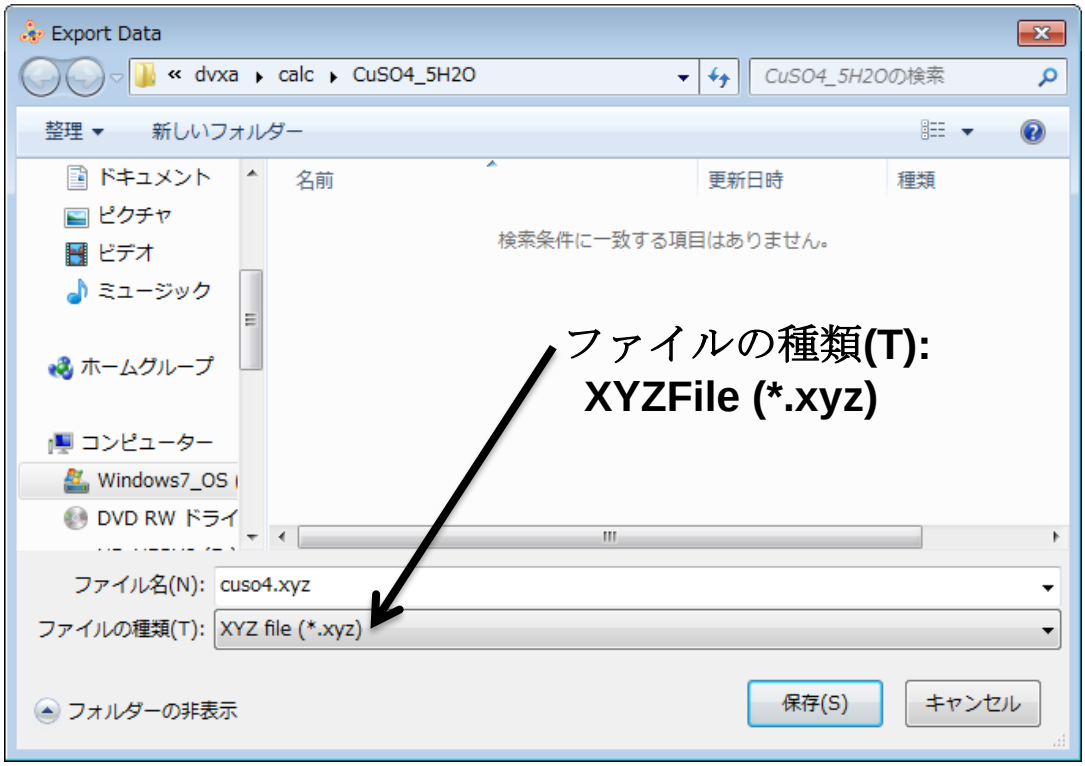




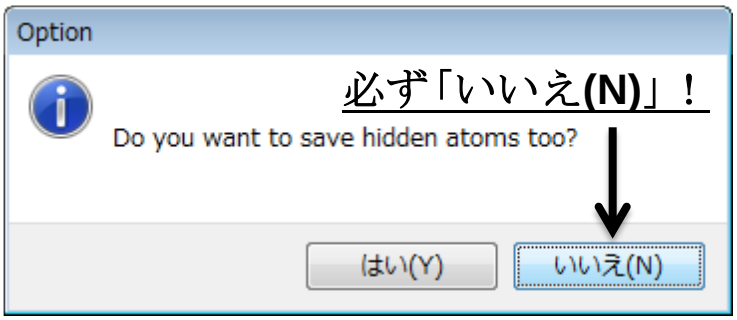
このように，対イオンや結晶溶媒など，分子軌道計算に含めない原子団を選択・削除していき，最終的に分子軌道計算を行う錯体（錯イオン）部分のみ残します．

６．VESTA のメニューバーの File – Export Data… を選択し，ファイルの種類（T）：XYZ files (*.xyz) として座標データをエクスポートします．詳しくは次の頁で説明しますが，保存時に VESTA が訊いてくる“Do you want to save hidden atoms too?”には必ず「いいえ」と答えます．

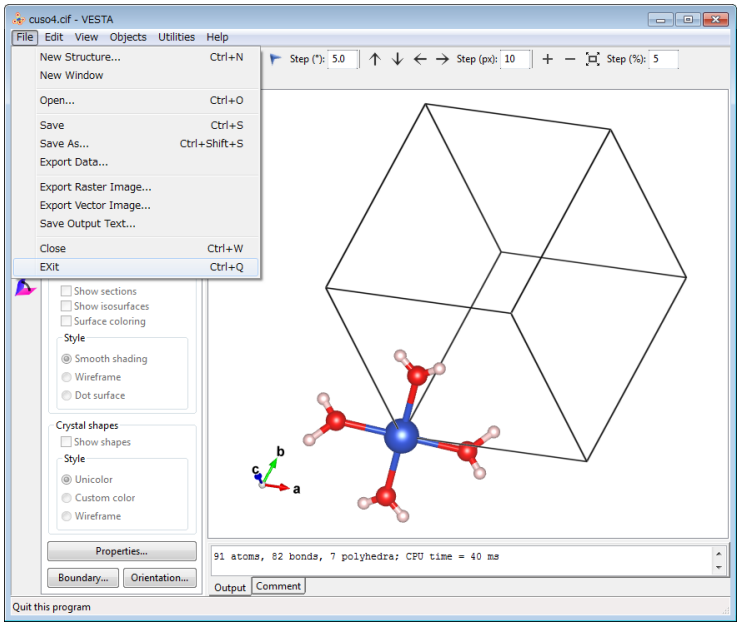




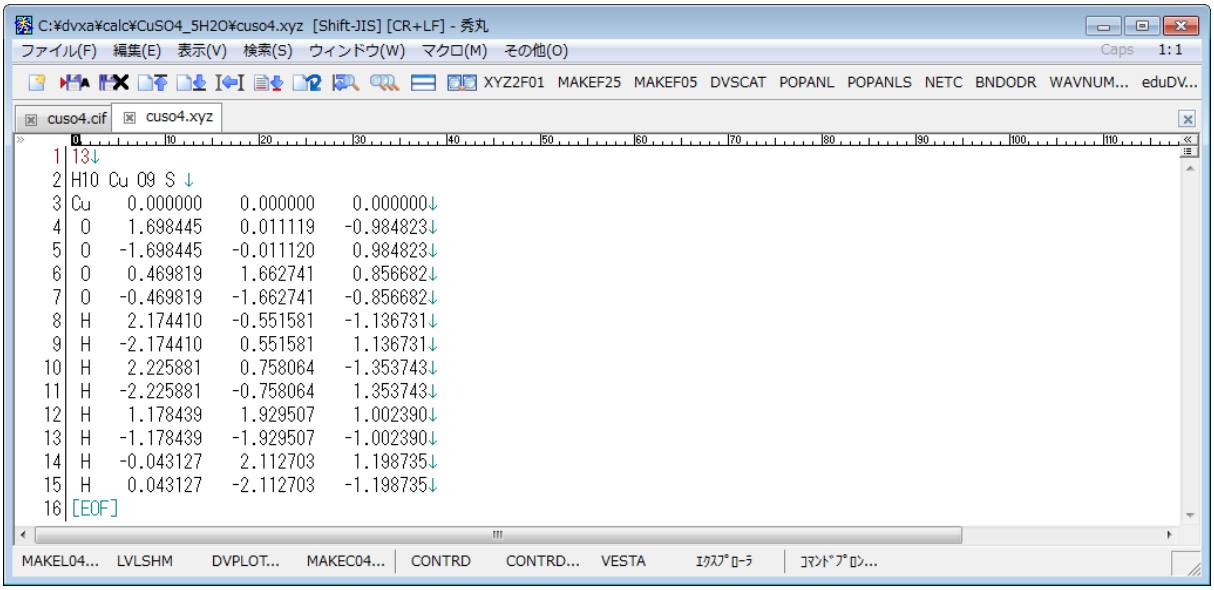
画面で非表示にしている原子団の座標を出力しないためには，必ず右のウィンドウで【いいえ(N)】を選択して下さい．ここで万が一【はい(Y)】を選択してしまうと，非表示していた原子団の座標も全て*.xyz に出力されてしまいます．



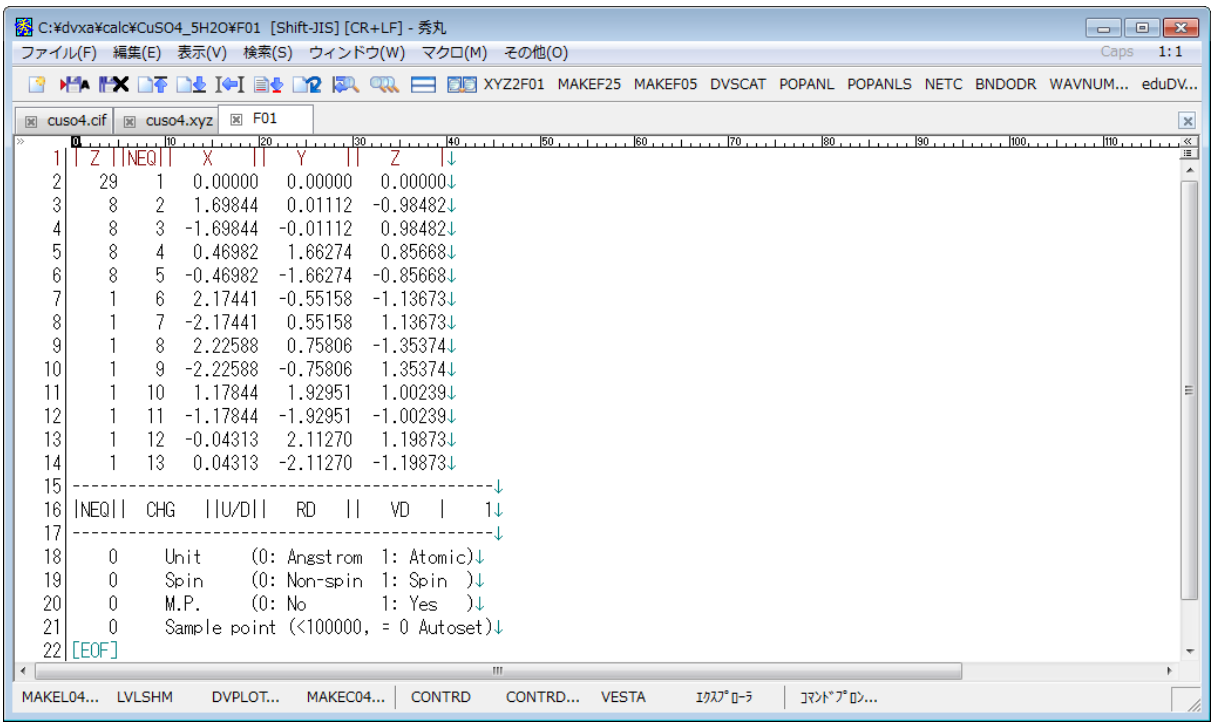
VESTA のメニューバーの File – Exit (Ctrl + Q) を選択して **VESTA** を終了します．



7．さきほど **VESTA** で保存した **C:¥DVXA¥CALC¥CuSO4_5H2O¥cuso4.xyz** を開きます．



8．【XYZ2F01】ボタンを押します（クリックします）．

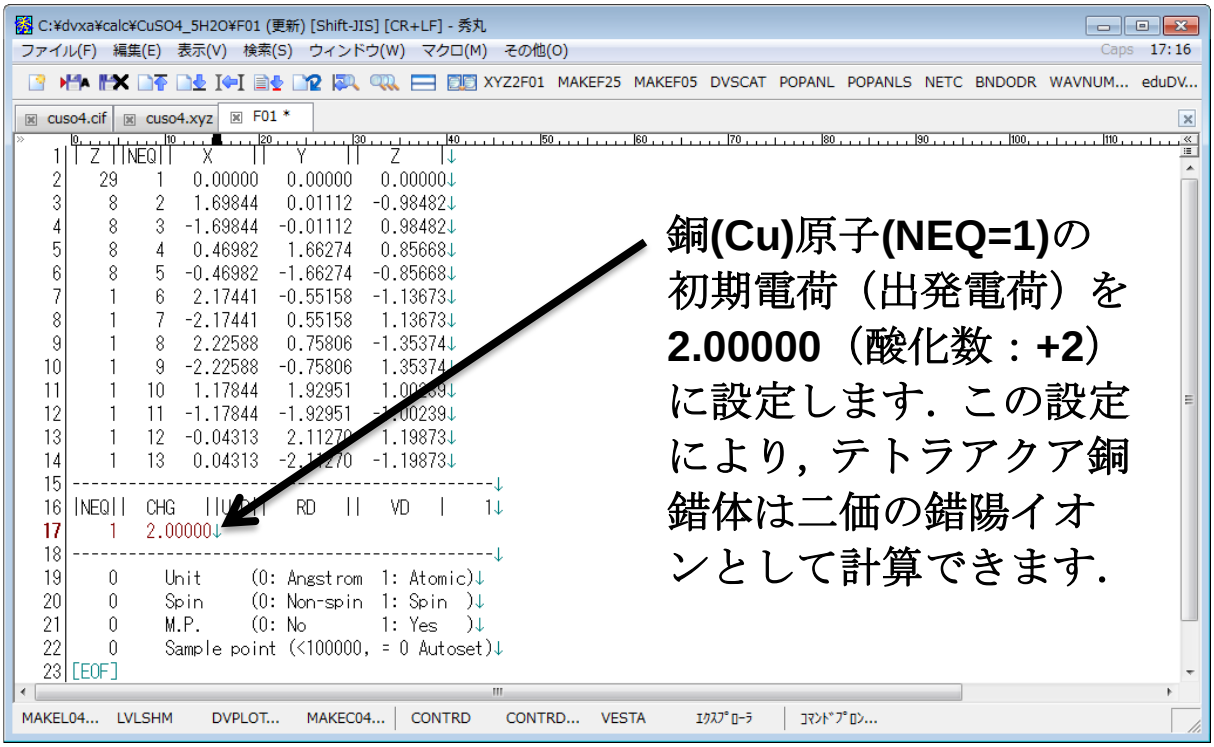


今回の計算対象は**$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$**という錯陽イオンです．上記の画面のまま計算を進めていくと**$[Cu(H_2O)_4]^{0}$**という電荷的中性錯体の計算となってしまいます．そこで **F01** を編集し，以下のように銅の電荷を+2 に設定して **F01** を上書き保存します．これなら**$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$**の計算を行うことなります．Cu(Z = 29)の **NEQ** は **1** ですので，**NEQ = 1** の原子の電荷を**+2** に設定します．

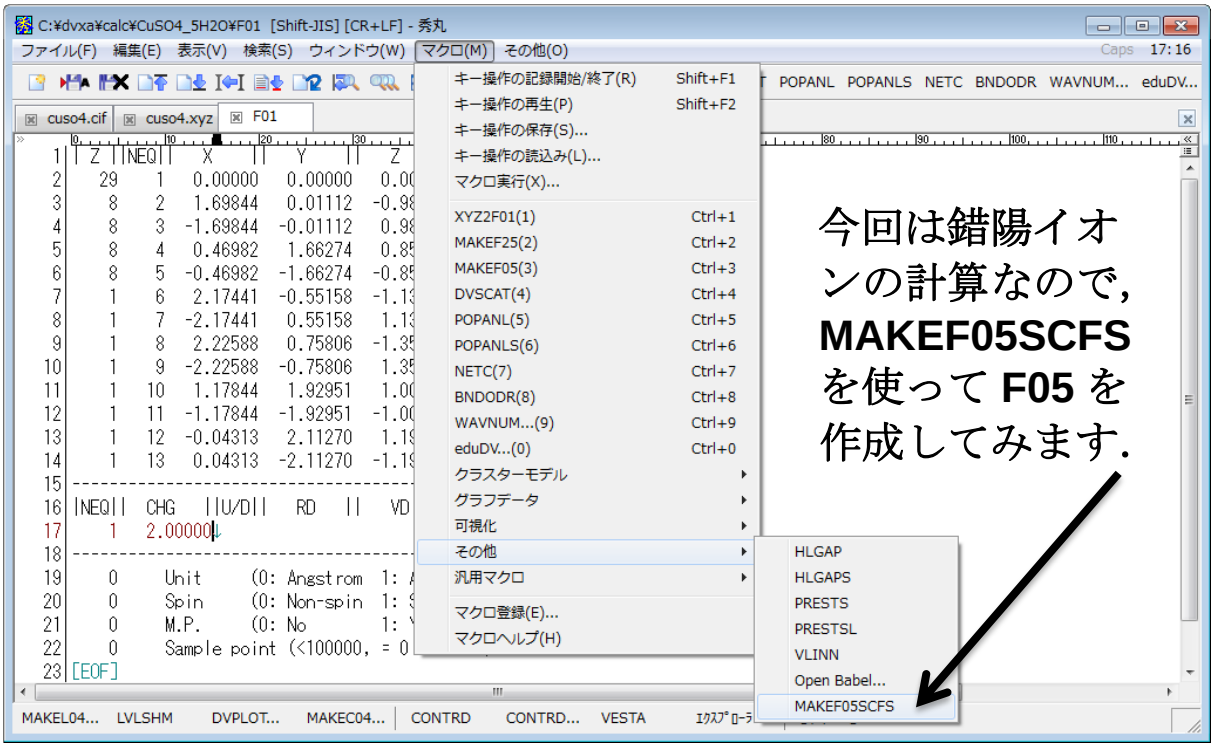
```
-------------------------------------------
|NEQ||  CHG   ||U/D||   RD   ||   VD   |   1
    1   2.00000
-------------------------------------------
```

Fortran の書式付で **F01** は読み込まれますので，カラムがずれないように注意して下さい．**NEQ** は整数で 5 文字，**CHG** は実数で 10 文字と入力範囲が決まっています．半角スペースを“␣”で表現すると，“␣␣␣␣1␣␣␣2.00000”と入力する必要があります．

F01 の編集作業が終了したら，ファイル(F)－上書き保存(S)することを忘れないで下さい．上書き保存が完了している場合は，F01 のタグ“F01*”のアスタリスクが消えて“F01”となります．

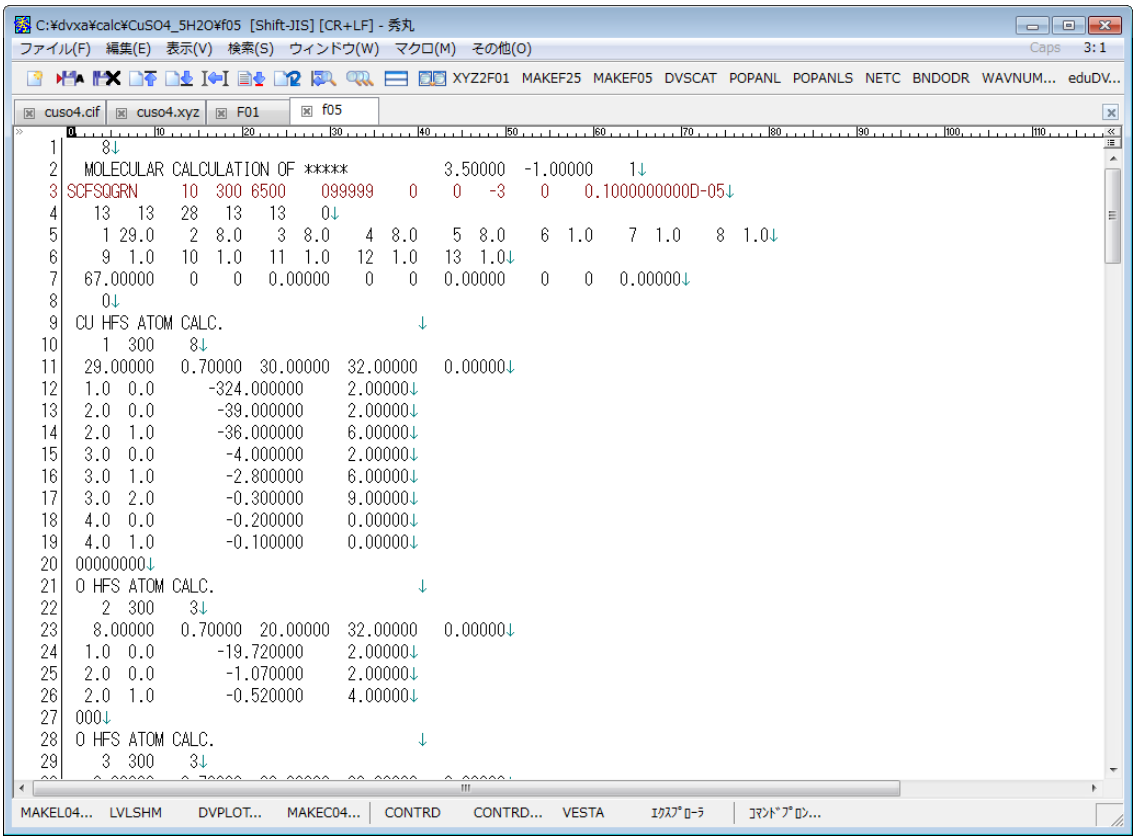


9．【MAKEF05SCFS】で F05 の 3 行目左端の変数 mscf = SCFS の F05 を作成します．
共有結合・配位結合を主たる結合とする有機化合物や錯体の計算では，F05 の 3 行目の左端の変数 mscf = SCFS で F05 を作成したほうが良好な計算結果が得られることが多いと思います（MAKEF05SCFS を使用）．イオン結合を主たる結合とするクラスターの場合はその必要はなく，mscf = SCCS で F05 を作成したほうが良いと思います（MAKEF05 を使用）．

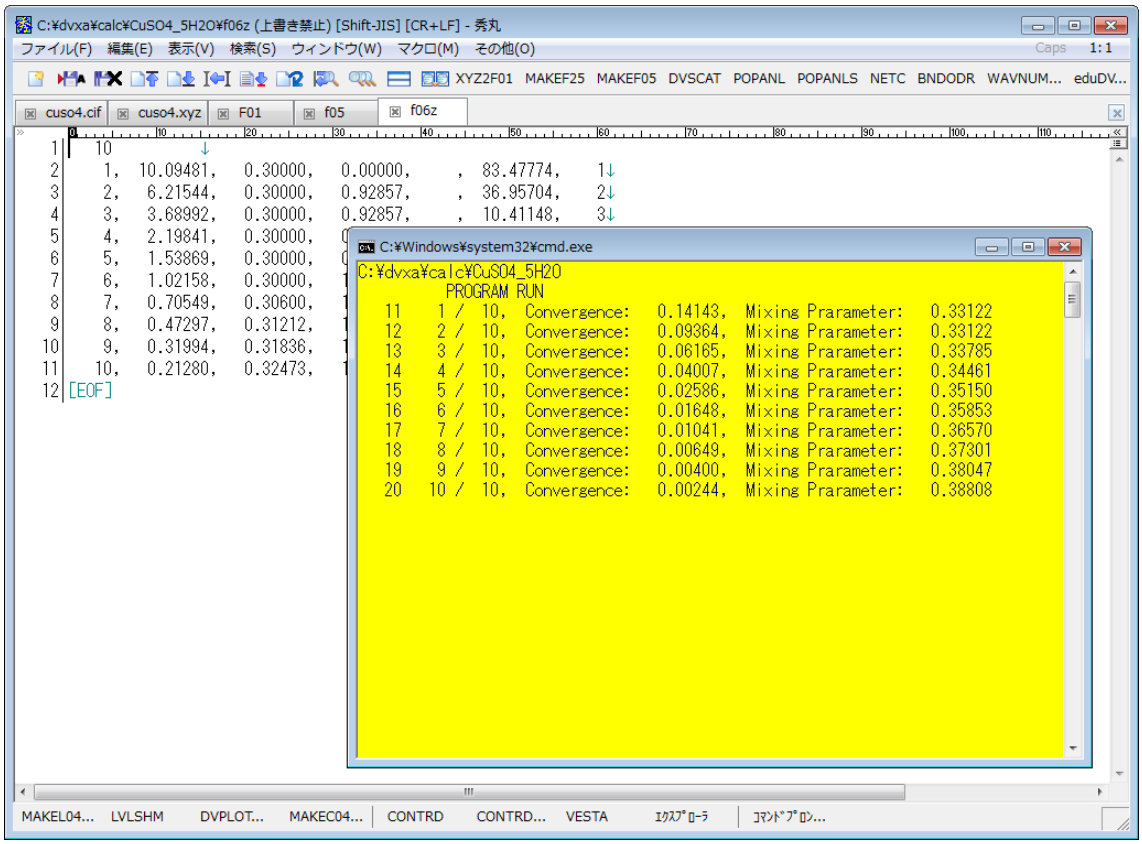


MAKEF05SCFS で F05 を作成した場合は SCFS 版 SCAT，MAKEF05 で F05 を作成した場合は SCCS 版 SCAT が起動されます．SCCS 版と SCFS 版の違いや利用の注意点については 14 頁および 146～149 頁を参照．「はじめての電子状態計算」では，SCCS 版のみが解説されています．

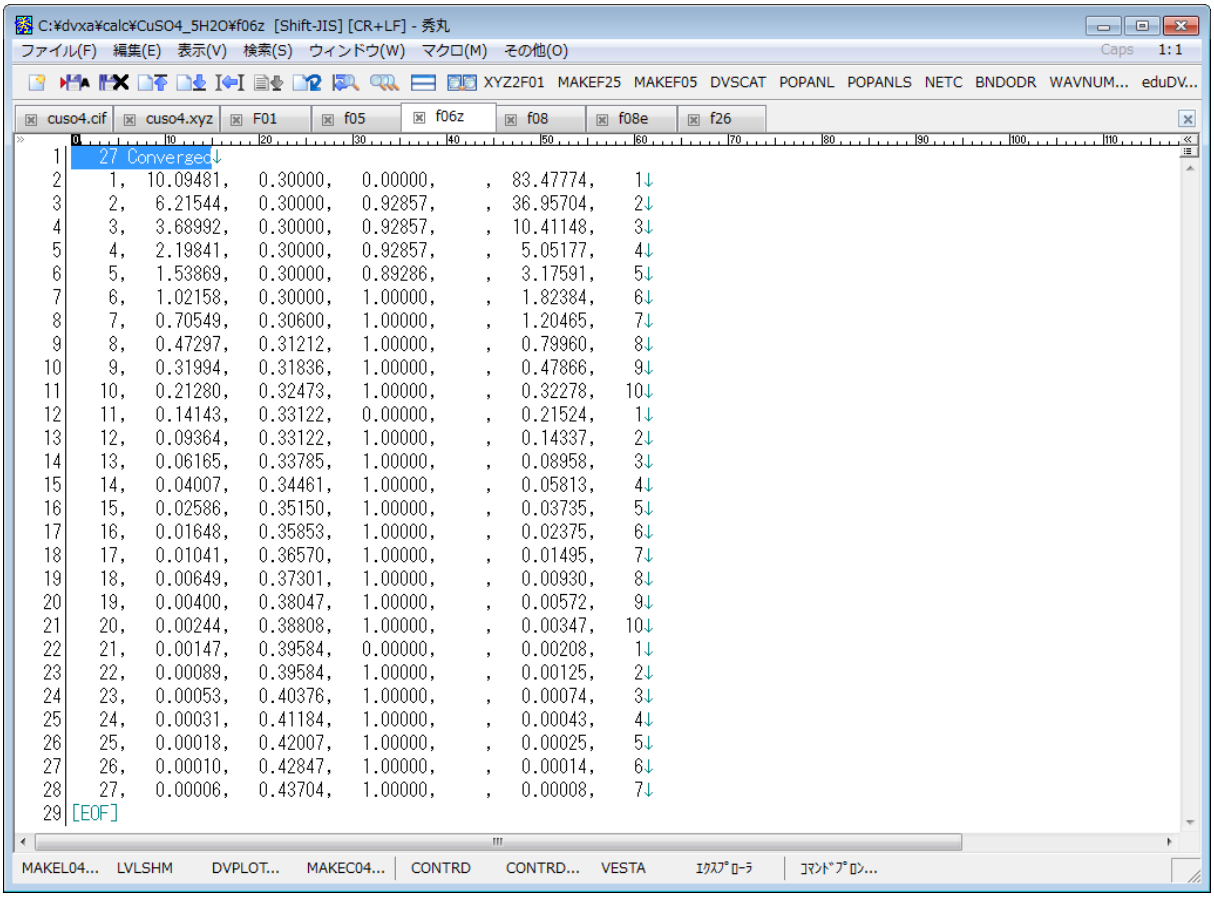
今回は **MAKEF05SCFS** で **F05** を作成したので，**F05** の 3 行目の左から 4 文字分(文字変数 4 文字)は“SCFS”となっています．その他，原子球半径 R0 の値に Slater の原子半径の値が指定されているなど，**MAKEF05** で **F05** を作成したときとは設定が違います（146～149 頁を参照）．



10. 【DVSCAT】ボタンを押して（クリックして），しばらく待ちます．



11. **$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$**の **SCAT** 計算（SCFS モード）は，27 サイクルで収束したようです．



しかし金属元素を含む錯体の計算では，一般にサンプル点数をデフォルトよりも増やしてさらに計算精度の向上を図ります．上記計算例でのデフォルトのサンプル点数は 6,500 点です．

Open Watcom Fortran Version 1.6 でビルドされた **SCAT** では，計算中の巨大な一時ファイル **F15** のファイルサイズが 2 GB = 2048 MB = 2,097,152 KB までという制限があります．**F15** のファイルサイズはサンプル点数に比例しますので，計算中の **F15** のファイルサイズを確認することにより，サンプル点数をどこまで増やすことができるかを容易に見積もることができます．

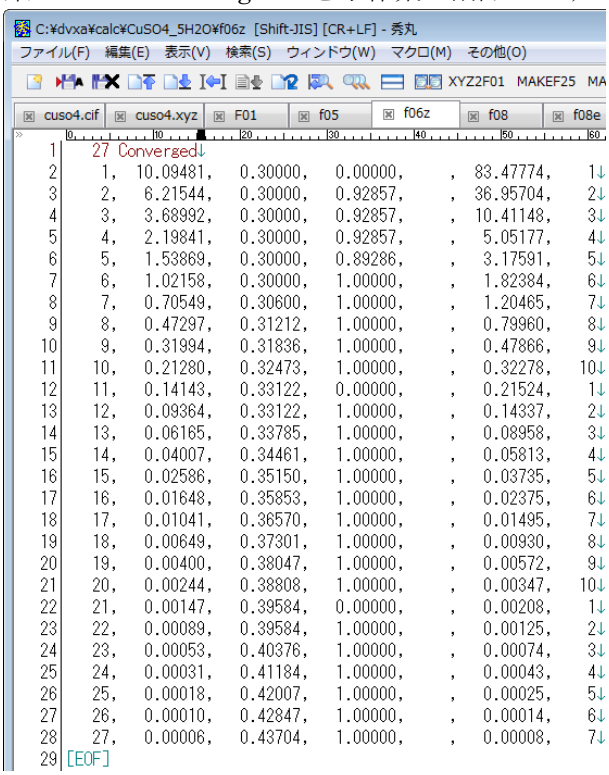
すなわち 2,097,152 ÷ SCAT 計算中の F15 のファイルサイズ（KB） × 現在のサンプル点数 ＝ Open Watcom Fortran Version 1.6 ビルド版 SCAT での最大サンプル点数ということになります．

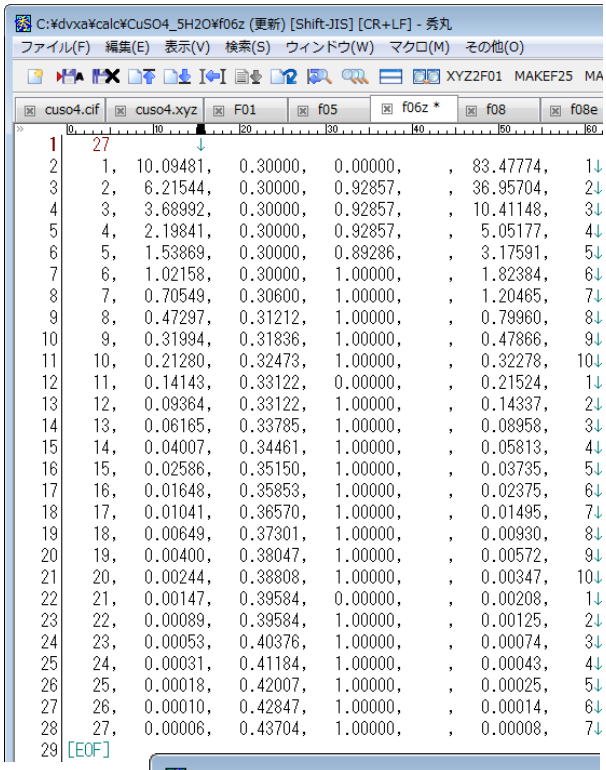
これは Open Watcom Fortran Version 1.6 が，Windows で扱える一つのファイルの最大サイズが 2 GB までという制約があるための制限であり，**SCAT** ソースコードの制限ではありません．

他の Fortran コンパイラでビルドした **SCAT** で計算を行うときはこの限りではありません．OS 上で取り扱えるファイルのサイズに制限のないコンパイラでは，物理的に確保できるファイルサイズ（ハードディスク容量など）限界までサンプル点数を増やすことができるはずです．

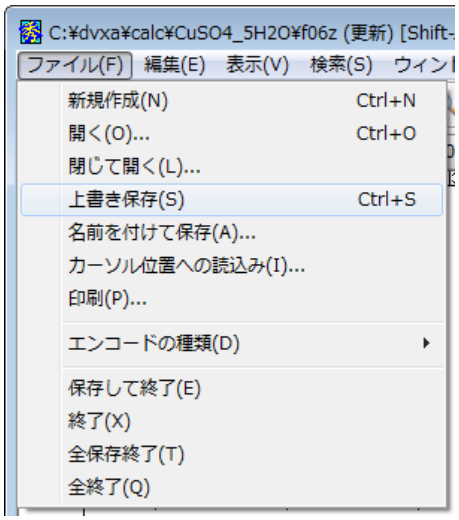
今回の**$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$**の計算では，380 万点までサンプル点数を増やすことができそうです．

まず，一旦収束した SCAT 計算を引き続きサンプル点数を増加させて続行するために，F06Z の収束マーク“Converged”を手作業で削除します（左図：削除前，右図：削除後）．



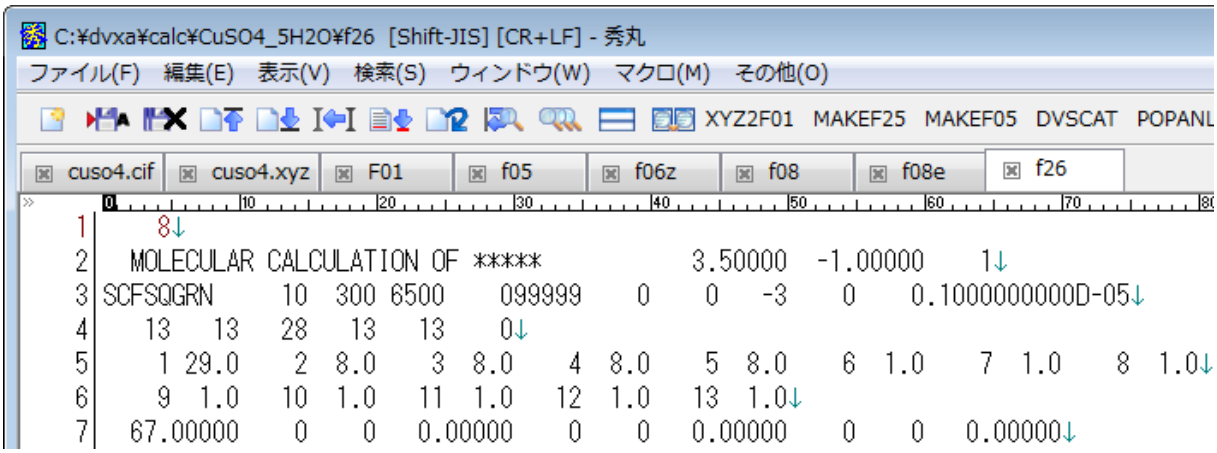


F06Z の“Converged”を削除した後は，ファイル(F)－上書き保存(S)で上書き保存します．上書き保存が完了していれば，F06Z のタグ “f06z *” のアスタリスクが消えて“f06z”となっているはずです．



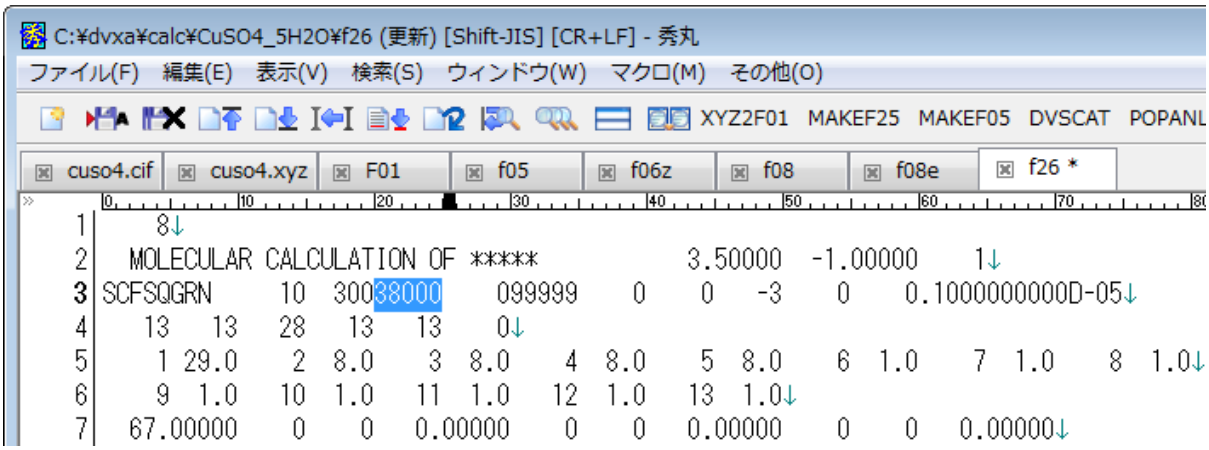
DV−Xα 法の SCAT プログラムの繰り返し計算では，F05 と F27（および F25）を読み込み，F26 と F17 を出力します．繰り返し計算を継続するときには，F26 と F17 をそれぞれ F05 と F27 にコピーし，計算を再開します．すなわちいったん収束して終了した SCAT 計算を，条件を変更して計算を再開するには，F05 ではなく F26 を編集する必要があります（F27，F17 は電子密度の情報なので編集不要）．

そこで，F26 のサンプル点数を手作業で編集・変更します．まず F26 タブをアクティブにします．

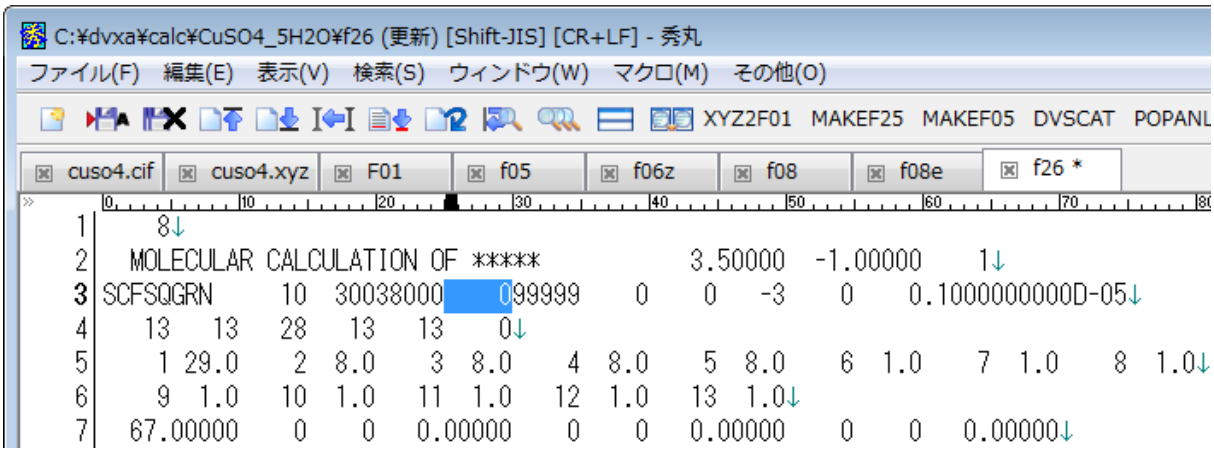


現在のサンプル点数は，6,500 点になっています．錯体の計算では，これでは少なすぎます．

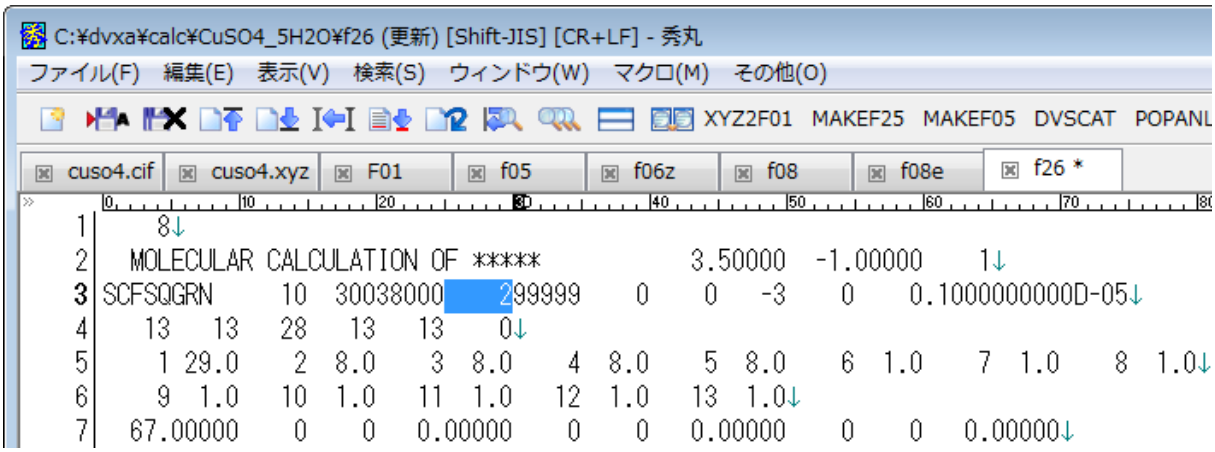
まずこの 6,500 点を，38,000 点に変更します．この箇所は Fortran の I5 フォーマット，すなわち整数で 5 文字で入力する必要があります．カラムがずれないように注意して下さい．半角スペースを“␣”で表現すると，“␣6500”を“38000”に修正すれば良いことになります．



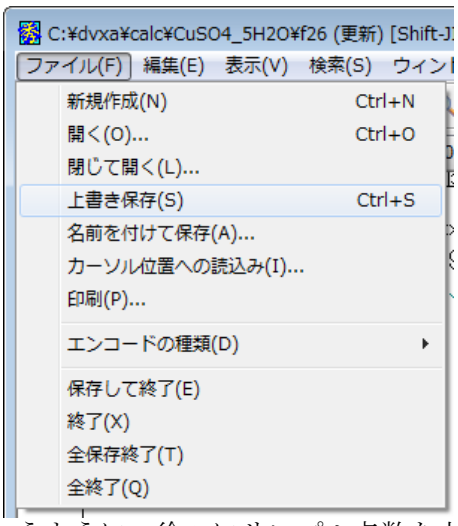
次に，右横の I5 フォーマット（整数 5 文字）の“0”を変更していきます．修正前（“␣␣␣␣0”の時）の“0”は，左の“38000”とセットで意味を成しており，38,000×10^n の n を表します．すなわち修正前の状態では，n = 0 ですから，この状態での **F26** のサンプル点数の設定は，38,000×10^0 = 38,000 点となっているわけです．



I5 フォーマット（整数 5 文字）の“0”を“2”に変更します．すなわち“␣␣␣␣0”を“␣␣␣␣2”に修正します．38,000×10ⁿ の n を“0”から“2”にしたわけですから，この状態での **F26** のサンプル点数の設定は，38,000×10² = 3,800,000 点（380 万点）になっています．

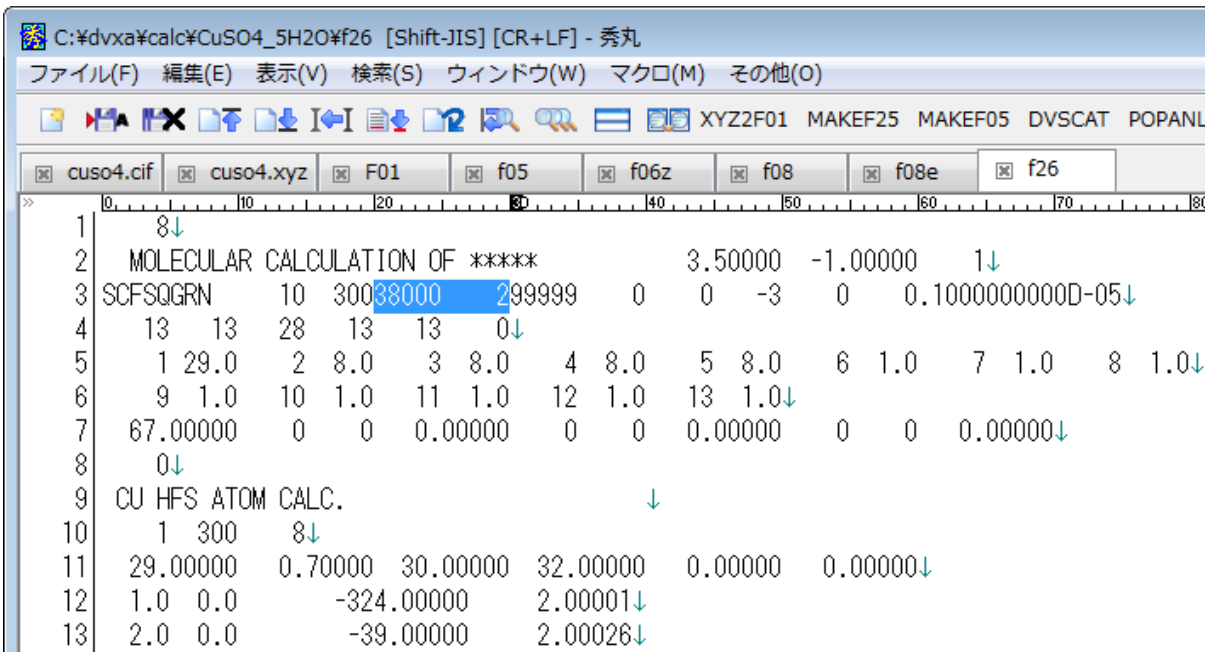


F26 のサンプル点数を編集・変更した後は，
ファイル(F)－上書き保存(S)で上書き保存します．



この状態で秀丸エディタの【DVSCAT】ボタンをクリックすれば，サンプル点数 380 万点での**[Cu(H₂O)₄]²⁺**の **SCAT** 計算（MSCF = SCFS）が始まります．
さすがにこの計算には相当な時間がかかるでしょう．

今回は，最初はデフォルトの 6,500 点で計算し，次にいきなり 380 万点での計算をするという手順を説明しましたが，実際には，6,500 点→20,000 点→50,000 点→100,000 点→1,000,000 点→2,000,000 点→3,800,000 点というように，徐々にサンプル点数を上げていった方が効率的です．目的によっては，ここまでサンプル点数を増やす必要はありません．



サンプル点数380万点での$[Cu(H_2O)_4]^{2+}$のSCFSモードでのSCAT計算収束後のFO8E（分子軌道のエネルギー準位表）は以下のようになりました.

*** M.O. EIGENVALUE

			(RY)	(HR)	(EV)	
1	1		-642.88706	-321.44353	-8745.53346	2.00000
2	2		-77.06056	-38.53028	-1048.29564	2.00000
3	3		-67.75028	-33.87514	-921.64295	2.00000
4	4		-67.75022	-33.87511	-921.64213	2.00000
5	5		-67.74933	-33.87466	-921.63002	2.00000
6	6		-37.27510	-18.63755	-507.07299	2.00000
7	7		-37.27487	-18.63744	-507.06986	2.00000
8	8		-37.23173	-18.61586	-506.48295	2.00000
9	9		-37.23049	-18.61525	-506.46612	2.00000
10	10		-8.77114	-4.38557	-119.31842	2.00000
11	11		-5.87650	-2.93825	-79.94111	2.00000
12	12		-5.87436	-2.93718	-79.91209	2.00000
13	13		-5.86319	-2.93160	-79.76012	2.00000
14	14		-2.61132	-1.30566	-35.52315	2.00000
15	15		-2.60967	-1.30483	-35.50071	2.00000
16	16		-2.49761	-1.24881	-33.97635	2.00000
17	17		-2.49633	-1.24817	-33.95891	2.00000
18	18		-1.73193	-0.86596	-23.56035	2.00000
19	19		-1.73036	-0.86518	-23.53904	2.00000
20	20		-1.53510	-0.76755	-20.88284	2.00000
21	21		-1.53396	-0.76698	-20.86721	2.00000
22	22		-1.43993	-0.71997	-19.58815	2.00000
23	23		-1.32688	-0.66344	-18.05029	2.00000
24	24		-1.32232	-0.66116	-17.98818	2.00000
25	25		-1.30247	-0.65124	-17.71824	2.00000
26	26		-1.09545	-0.54773	-14.90202	2.00000
27	27		-1.06772	-0.53386	-14.52472	2.00000
28	28		-1.03927	-0.51963	-14.13770	2.00000
29	29		-1.01359	-0.50679	-13.78838	2.00000
30	30		-1.01030	-0.50515	-13.74359	2.00000
31	31		-0.94177	-0.47089	-12.81140	2.00000
32	32		-0.93062	-0.46531	-12.65970	2.00000
33	33		-0.89884	-0.44942	-12.22741	2.00000
34	34	(HOMO)	-0.82017	-0.41009	-11.15723	1.00000
35	35		-0.29876	-0.14938	-4.06415	0.00000
36	36		-0.27628	-0.13814	-3.75837	0.00000
37	37		0.04198	0.02099	0.57109	0.00000
38	38		0.17923	0.08962	2.43818	0.00000
39	39		0.20420	0.10210	2.77782	0.00000
40	40		0.31979	0.15990	4.35033	0.00000
41	41		0.79017	0.39509	10.74915	0.00000
42	42		0.84438	0.42219	11.48651	0.00000
43	43		0.92512	0.46256	12.58487	0.00000
44	44		0.92658	0.46329	12.60481	0.00000
45	45		0.97851	0.48926	13.31125	0.00000
46	46		1.02278	0.51139	13.91339	0.00000

あとは，本冊子の37ページから62ページで説明されている手順と同様に各種ユーティリティプログラムを駆使して様々な実験結果と比較検討したり，物性の理解に役立つデータ解析を行っていきます．特にVESTAで出力する美しい画像（MOの形状，静電ポテンシャルマップなど）は電子構造（状態）の三次元的理解に役立つのはもとより，プレゼンテーション効果抜群です.

三次元可視化システム VENUS

DV−$X\alpha$ 分子軌道計算を行うと，電子状態に関するいろいろな情報を得ることができます．各分子軌道のエネルギー固有値，すなわちエネルギー準位は **F08E** に出力されていますし，さらに **MAKEL04** および **LVLSHM** を実行することによりエネルギー準位図が作成できます．また **POPANL**，**POPANLS**，**NETC**，**BNDODR** などの周辺プログラムを実行すればポピュレーション解析を行うこともできます．そして **MAKEC04**，**WAVNUM**，**CONTR**，**CMAP**，**CMAPD** などを駆使することにより，分子軌道の波動関数や電子密度の等高線図を作図することもできます.

CONTR，**CMAP** 等を実行して得られる波動関数等高線図は，分子軌道をある平面で切断したときの形状を等高線で示したものです．しかし，分子軌道などがどのような形状をしているかはある平面で切断した断面図よりも，三次元の形状を直接可視化した方が直感的に理解できます.

VENUS は，泉富士夫氏らによって開発された結晶構造と電子状態を三次元可視化するシステムです．**F01** を読み込むことにより **DV-$X\alpha$ 分子軌道計算**に用いた分子などを棒・球棒・空間充填・針金模型などで表示することはもとより，水野正隆氏によって開発されたファイル変換ツール **CONTRD** を用いることにより，分子軌道の波動関数，電子密度，静電ポテンシャルなどを等値曲面(isosurface)として三次元可視化することができます.

1　三次元可視化システム VENUS について

VENUS(**V**isualization of **E**lectron/**NU**clear densities and **S**tructures)システムは現在，５つの独立したプログラムから構成されています.

VICS: **VI**sualization of **C**rystal **S**tructures
VEND: **V**isualization of **E**lectron/**N**uclear **D**ensities
VESTA:　**V**isualization for **E**lectronic and **ST**ructural **A**nalysis
PRIMA: **PR**actice **I**terative **M**EM **A**nalyses
ALBA: **A**fter **L**e **B**ail **A**nalysis

DV−$X\alpha$ 分子軌道計算での出力を三次元可視化するのに用いるのはこのうち，かつては **VICS**(または **VICS−II**)および **VEND** でしたが，現在は **VESTA** です．**VESTA** は **VICS−II** に **VEND** の機能が加えられたプログラムで，泉富士夫氏と共に，門馬綱一氏によって開発されています.

VICS(または **VICS−II**，**VESTA**)は，**F01** に記述されている原子座標を読み込んで棒・球棒・空間充填・針金模型などで分子などを三次元可視化します.

VEND(または **VESTA**)は，**VICS**(または **VICS−II**，**VESTA**)で描いた分子などの棒球模型などに加えて，波動関数や電子密度や静電ポテンシャルなどを等値曲面(isosurface)として三次元可視化します．さらに静電ポテンシャルマップ(等電子密度表面を静電ポテンシャルの大小で彩色したもの)，HOMO(最高占有分子軌道)マップ(等電子密度表面を HOMO の大小で彩色したもの)，LUMO(最低非占有分子軌道)マップ(等電子密度表面を LUMO の大小で彩色したもの）なども作成でき，これは例えば分子の求核・求電子性領域を知ってその反応性を予測することに役立ちます.

2　ファイル変換ツール CONTRD について

VEND や VESTA で **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算**結果の波動関数，電子密度，静電ポテンシャルなどのデータを読み込むためには，水野正隆氏によって開発されたファイル変換ツール CONTRD が必要です．CONTRD を実行するには，入力ファイル CO4D（三次元可視化する領域（直方体のサイズ）や波動関数を指定するファイル）が必要です．CO4D はエディタ等で手作業でも作成できますが，計算モデルの大きさを自動判断して適当な大きさの領域（直方体のサイズ）を設定し，さらに HOMO と LUMO のデータを出力するように CO4D を全自動で作成してくれるユーティリティプログラム MAKECO4D も水野正隆氏によって開発されています．

加えて同氏が開発された CONTRD の拡張版 CONTRWD は，複雑な形状の分子軌道のうち指定した原子軌道部分だけを出力したり，指定した原子軌道(あるいはその二乗)を足したり引いたり，差電子密度，部分電子密度，有効スピン密度を出力するなど，自由自在に描きたい波動関数，電子密度データを出力できるプログラムです．CONTRWD を実行するには入力ファイル CO4WD を手作業で作成する必要があります．

CONTRDALL は，本冊子の後半で説明する教育用分子軌道計算システムの一部として坂根の依頼により水野正隆氏に作成していただいたプログラムで，比較的小さな分子(分子軌道数が 100 個未満)を対象とし，ユーザは CO4D を作成する必要もなく，すべての分子軌道の*.sca ファイルが全自動で作成されるユーティリティです．しかも FO8E に書かれている分子軌道の名称がそのまま*.sca のベースネームになりますので，講習会や授業等，限られた時間で比較的小さな分子（分子軌道数が 100 個未満）を対象に **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算**や**三次元可視化システム VENUS** を使用するときなど，**DV−$X\alpha$** と VENUS の橋渡し役としてとても重宝するプログラムです．もちろん分子軌道数が 100 個未満の分子が計算対象であれば，研究用途にもお使いいただけます．

3　プログラムの入手方法について

VENUS システムは使用許諾条件の許可範囲では **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算プログラム**と同様，研究や教育目的に限って無償で使用することができます．

VICS および VEND は泉富士夫氏のウェブサイト(**https://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#VICS_VEND**)に解説がありますが，現在プログラムの公開は終了しており，ダウンロードすることはできません．

VICS−II は門馬綱一氏のウェブサイトで公開されておりましたが，VICS−II の全機能は VESTA にそのまま引き継がれているため，VESTA 公開に伴い VICS−II の配布は停止されました．

VESTA は当初，平成 19 年 7 月 11(水)にβ版(Ver. 1.0β)が初めて一般向けにリリース，その後プログラム開発者の門馬綱一氏，泉富士夫氏，テストユーザにより様々な動作試験を終え，2008 年 3 月 27 日(木)，ついに初の安定版 Ver. 1.4 が一般向けにリリース，その後も開発が進行し，2022 年 8 月 11 日(木)に，最新版の VESTA Ver. 3.5.8 がリリースされています．門馬綱一氏のウェブサイト(**https://jp-minerals.org/vesta/jp/**)より最新版の VESTA をダウンロード入手して下さい．

水野正隆氏により開発されたファイル変換ツール CONTRD, CONTRDALL および MAKECO4D は本冊子 5 ページで紹介した「次世代 dvscat プログラム」dvxa_v205.zip に含まれております．

CONTRWD は **DV−Xα 研究協会会員**限定で公開されています（まだ開発中のプログラムであるため）．このプログラムは会員以外の方への配布が禁止されています．**DV−Xα 研究協会**の会員の方でこのプログラムの入手を希望される方は，**DV−Xα 研究協会**の公式ホームページ **https://www.dvxa.org/** をご参照の上，同ウェブページを管理している岡山理科大学の坂根弦太まで連絡をお取り下さい．**DV−Xα 研究協会会員**限定で公開されているプログラムとして，現在 CONTRWD 以外には，全電子エネルギーを求めるプログラムなどがあります．『新版 はじめての電子状態計算』ダウンロード・ページ (p. 5) では，GUI 版 dvscat プログラム(Windows)，Macintosh 用 dvscat プログラム，Linux 用 dvscat プログラム，相対論 **DV−Xα** 法プログラム(Windows)，非相対論 **DVME** 法プログラム(Windows)が入手できます．

4　ファイル変換ツール CONTRD の使い方（コマンドプロンプト上で使う場合）

CONTRD を実行するには入力ファイル CO4D が必要です．MAKECO4D を使って CO4D を作成する場合は，コマンドプロンプト（または MS−DOS プロンプト）で dvscat 計算を実行し，終了したそのままの状態で，

C:¥DVXA¥calc¥co> makec04d ↵

と入力しますと，

>Number of atoms to be analized (0:all atoms)

と訊いてきますので，通常は“**0**”を入力して下さい．

0 ↵

すると全自動で CO4D.IN が生成されます（HOMO と LUMO が出力される設定です）ので，

C:¥DVXA¥calc¥co> COPY C04D.IN C04D ↵

と入力して CO4D.IN を CO4D にコピーして下さい．これで入力ファイル CO4D の準備が整いましたので，CONTRD を実行します．

C:¥DVXA¥calc¥co> contrd ↵

そうしますと，

```
 1 / 51   Z=   -5.00000
 2 / 51   Z=   -4.80000
 3 / 51   Z=   -4.60000
   :
   :
   :
49 / 51   Z=    4.60000
50 / 51   Z=    4.80000
51 / 51   Z=    5.00000
```

というように CONTRD が実行され VEND や VESTA で読める以下のファイル群が出力されます．

CHG3D.sca	三次元の電子密度データ
POT3D.sca	三次元の静電ポテンシャルデータ
W*xxx*-3D.sca	三次元の *xxx* 番の波動関数データ
W*xxx*U-3D.sca	三次元の *xxx* 番の波動関数データ（up スピン）※スピン計算時
W*xxx*D-3D.sca	三次元の *xxx* 番の波動関数データ（down スピン）※スピン計算時

MAKECO4D を使わずに手作業で CO4D をエディタ等（メモ帳など）で作成しても構いません．エディタを起動し，半角の数字で以下のような内容を入力して下さい．

1 行目（3I5）　**x, y, z 方向のピクセル数**

2 行目（3F10.5）　**x, y, z 方向の長さ（単位: 原子単位 bohr）**

3 行目（3F10.5）　**中心座標（単位：原子単位 bohr）**

4 行目（16I5）　**ファイルとして出力する波動関数の数と波動関数の番号**

5 行目（X5,16I5）　**波動関数のスピンの向き（1: up, 2: down）※スピン版の時のみ**

※ bohr は長さの原子単位のことで，1 bohr = a_0 = 5.2917721092(17)×10^{-11} m = 0.52917721092(17)Åです．a_0 は基礎物理定数の 1 つで，ボーア半径(Bohr radius)とも呼ばれます．“3I5”, “3F10.5”などの意味については，Fortran 77 の文法書などを参照して下さい（整数型の書式，実数型の書式など）．

1 行目から 3 行目で，三次元データを出力する領域を直方体で指定します．**F01** に座標が記録されているすべての原子がこの直方体内に入っていなければなりません．**VENUS** はこの直方体があたかも単位胞であるかのようにみなします．直方体の外側に位置する原子が存在すると，**VENUS** は並進操作によって直方体の内側に不必要な「等価」原子を発生させてしまいます．

まず，終了した dvscat 計算ファイル群の中の **F08E** をエディタ等で開いて，**VENUS** で描きたい分子軌道（波動関数）を決めて下さい．さらにプログラム **WAVNUM** を利用するなどして，その分子軌道（波動関数）の番号を調べてメモしておいて下さい．分子軌道（波動関数）の番号や **WAVNUM** の使い方については，「はじめての電子状態計算」の第 7 章-5「波動関数・電子密度などの等高線の作図をする」を参照して下さい．

例えば，135, 136, 137, 138 番目の分子軌道を描く場合は，**CO4D** は以下のようにします（ノンスピン版の場合）．

```
----+----1----+----2----+----3
  101  101  101
  20.00000  20.00000  20.00000
   0.00000   0.00000   0.00000
   4  135  136  137  138
----+----1----+----2----+----3
```

もし分子が巨大で $20a_0$×$20a_0$×$20a_0$ に入りきらない場合は，例えば，

```
----+----1----+----2----+----3
  101  101  101
  30.00000  30.00000  30.00000
   0.00000   0.00000   0.00000
   4  135  136  137  138
----+----1----+----2----+----3
```

というように描画範囲を拡張して下さい．ここで指定する直方体（３辺が同じ長さの場合は立方体となります）の描画範囲は，前述のように DV−$X\alpha$ で計算したモデルの全原子が完全に（余裕を持って）入り込んでいる必要があります．**F01** に書かれている全原子の（X 座標の値，Y 座標の値，Z 座標の値）のそれぞれ最大値（プラス側の最大値），最小値（マイナス側の最大値）をメモし，通常 **F01** の座標数値はÅ単位かと思いますので，その場合はすべてのメモした値を 0.529177 で割って，原子単位に変換して下さい．**CO4D** の２行目で原子単位の数値で指定する大きさの直方体は，その中に完全に（少しの余裕を持って），**F01** のすべての原子の座標が入り込んでいる必要があります．例えば **CO4D** の３行目（原点位置）が 0.0, 0.0, 0.0，２行目（直方体サイズ）が 30.0, 25.0, 20.0 であった場合は，メモした原子単位での X 座標，Y 座標，Z 座標の最大

値，最小値が，

X 座標:(+15.0a_0 ～ -15.0a_0)

Y 座標:(+12.5a_0 ～ -12.5a_0)

Z 座標:(+10.0a_0 ～ -10.0a_0)

の範囲に余裕を持って入り込んでいることをご確認下さい．これは以下のように考えても構いません．すなわち原子単位の数値をÅ単位に直し（原子単位の数値に 0.529177 を掛けて），

X 座標:(+7.94 Å ～ -7.94 Å)

Y 座標:(+6.61 Å ～ -6.61 Å)

Z 座標:(+5.29 Å ～ -5.29 Å)

の範囲に **F01** の全原子の全座標（Å単位）が余裕を持って入り込んでいることを確認すれば良いことになります．万が一この直方体から原子がはみ出していると **VENUS** で **F01** を読み込んだときに思いもかけないようなおかしな図になってしまいます（**VENUS** では単位格子から原子がはみ出した場合，結晶学的な並進の操作が自動的に行われるため）．**VENUS** は **F01** を読み込むときに，**F01** が置いてあるディレクトリに存在する **CO4D** もあわせて読み込みます．**CO4D** で直方体の大きさを指定するときは **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算**した全原子が完全に（少しの余裕を持って）入り込むようにご注意下さい．

CO4D の 1 行目は，どれだけ細かいメッシュで計算するかというメッシュの数です．38 ページの例では 50×50×50 ですが，もっと細かく計算したい場合は，最大 250×250×250，すなわち

```
----+----1----+----2----+----3
  251  251  251
  20.00000  20.00000  20.00000
   0.00000   0.00000   0.00000
   4  135  136  137  138
----+----1----+----2----+----3
```

といった設定が，ほぼ最高に細かく計算させる入力になります．ただしこの場合，**CONTRD** の計算には想像を絶するほど長時間を要するうえ（パソコンの機種によって違いますが，数時間～十数時間かかるかもしれません），生成されるファイルのサイズも何百ＭＢという巨大なものになりますので，通常は 51 51 51 ぐらいか，あるいは 101 101 101 ぐらいが適当かと思います（**MAKECO4D** で自動作成される **CO4D.IN** は 51 51 51 です）．特に **VESTA** は少ないメッシュ数でも美しい等値表面を描くことができますので通常は 51 51 51 ～ 101 101 101 程度で十分です．

唯一，**VEND** で静電ポテンシャルマップ（等電子密度表面を静電ポテンシャルの大小で彩色した図）を描くときのみ，251 251 251 程度のメッシュで **CHG3D.sca**, **POT3D.sca** を作成しておく必要があります．なお，**VEND** であっても波動関数を描くときは，スムージング機能を使えば等値表面は平滑化されますので，通常は 51 51 51 ～ 101 101 101 程度で十分です．

VESTA では，波動関数はもちろんのこと，静電ポテンシャルマップであっても少ないメッシュ数でも十分に美しい絵を描くことができます．

それでも，さらに特別に滑らかで美しい絵を **VESTA** で描こうというときは，151 151 151 ～251 251 251 程度にすると良いでしょう（ただし **CONTRD** の計算時間は長時間を要し，また生成するファイルサイズも巨大になります．さらに **VESTA** での描画もパソコンスペックによっては重たくなります）．**VESTA** での図の品質の程度の調節は，**VESTA** の内部機能の設定，使い方如何で相当に調節可能です．例えば本冊子の 110 ページ～111 ページをご参照下さい．

5　三次元可視化システム VENUS の使い方

5-1. VICS および VEND

現在は VICS および VEND の公開は終了していますが，プログラムをお持ちの方のための参考までに情報を残しておきます. VENUS.zip に同梱されている VICS_VEND_manual.pdf (VICS and VEND for Three-Dimensional Visualization of Crystal Structures and Electron/Nuclear Densities) および VICS_VEND_readme.pdf（Windows 用 VICS と VEND の手引き）に VICS および VEND のマニュアルがありますのでご参照下さい．プログラムを含まないドキュメントだけの Documents.zip も存在していました（VENUS.zip に同梱されているドキュメントと同じ内容です）．
なお，VICS の次世代版である VICS−II をお使いの場合は，VICS−II の方が操作性や計算速度をはじめ様々な点で進化しておりますので，改めて VICS をお使いになる必要はないかと存じます.

DV−$X\alpha$ 計算結果の様々なデータを VICS および VEND を使って三次元可視化する方法につきましては，岡山理科大学の坂根弦太のウェブページ

【電子密度，静電ポテンシャル，波動関数の三次元可視化】
https://www.dvxa.org/hme/dvxa_tutorial_07.html
【等電子密度表面上の静電ポテンシャルの三次元可視化】
https://www.dvxa.org/hme/dvxa_tutorial_08.html

をご参照下さい.

実際に VICS および VEND で三次元可視化したさまざまな画像につきましては，

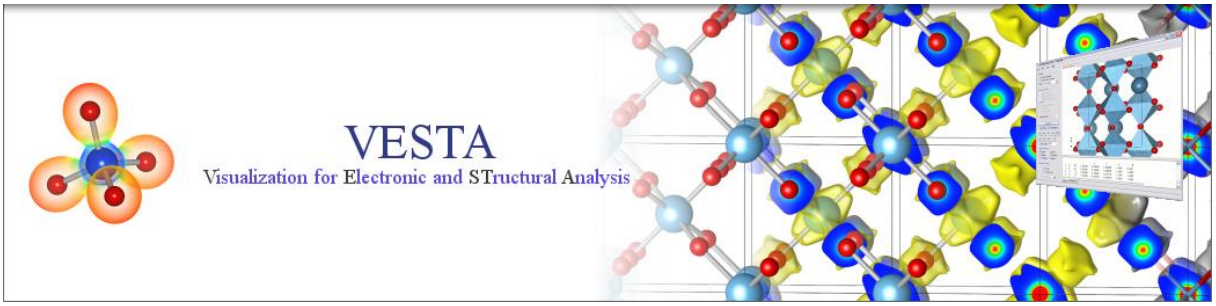
【硫黄架橋不完全キュバン型モリブデン三核アクア錯体】
https://www.dvxa.org/hme/venus/c01/c01.html
【硫黄架橋混合金属サンドイッチキュバン型カドミウムモリブデン七核 nta 錯体】
https://www.dvxa.org/hme/venus/c02/c02.html
【硫黄架橋混合金属キュバン型鉄モリブデン四核アクア錯体】
https://www.dvxa.org/hme/venus/c05/c05.html
【酸素架橋不完全キュバン型モリブデン三核アクア錯体】
https://www.dvxa.org/hme/venus/c08/c08.html

をご参照下さい.

5-2. VICS−II

VICS−II は VICS の次世代版として主に門馬綱一氏により開発されましたが，その後開発・公開された VESTA に VICS−II の全機能はそのまま引き継がれていることから，VICS−II の公開は停止されました．門馬綱一氏のウェブサイト(http://jp-minerals.org/jp/)の VESTA ページ(http://jp-minerals.org/vesta/jp/)の“4. VESTA 開発の背景”をご参照下さい.

前述の通り, VESTA は, VICS−II を含んだ統合的なシステムです. VESTA をお使いの場合は, VESTA の方が操作性や計算速度をはじめ様々な点で進化しておりますので, 改めて VICS−II や VEND をお使いになる必要はありません.



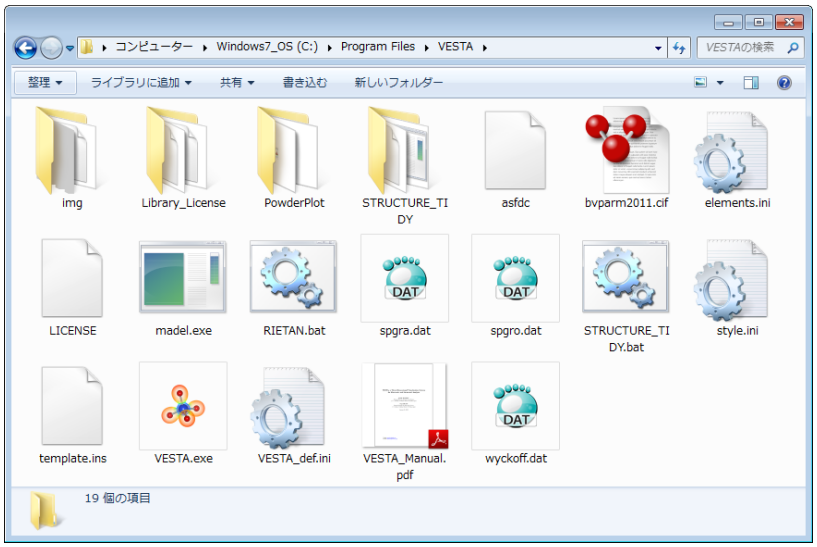
5-3. VESTA

VESTA は 2007 年 7 月 11 日にβ版としてリリースされました．その後プログラム作者の門馬綱一氏や泉富士夫氏をはじめテストユーザにより動作テストを終え，2008 年 3 月 27 日に Ver. 1.4 がリリース，2011 年 1 月 24 日に **Ver. 2.x** シリーズの最終安定版 **Ver. 2.1.6** がリリースされています．そして現在の最新版は **Ver. 3** シリーズの **Ver. 3.5.8** です（2022 年 8 月 11 日にリリース）．最新版のマニュアル**(VESTA_Manual.pdf)** は 2019 年 1 月 27 日に公開されています．

門馬綱一氏のウェブサイト：**https://jp-minerals.org/jp/**
VESTA ウェブサイト：**https://jp-minerals.org/vesta/jp/**

・**VESTA** は今後も機能，スピード，安定性，スケーラビリティ，ドキュメンテーションなどの開発が進められていく予定です．ご利用の皆様から，何か問題点が発生した場合，あるいは何かお気づきの点がございました場合など，**VESTA** のプログラム開発にフィードバックするため，下記連絡先のいずれかに是非連絡をお願いいたします．

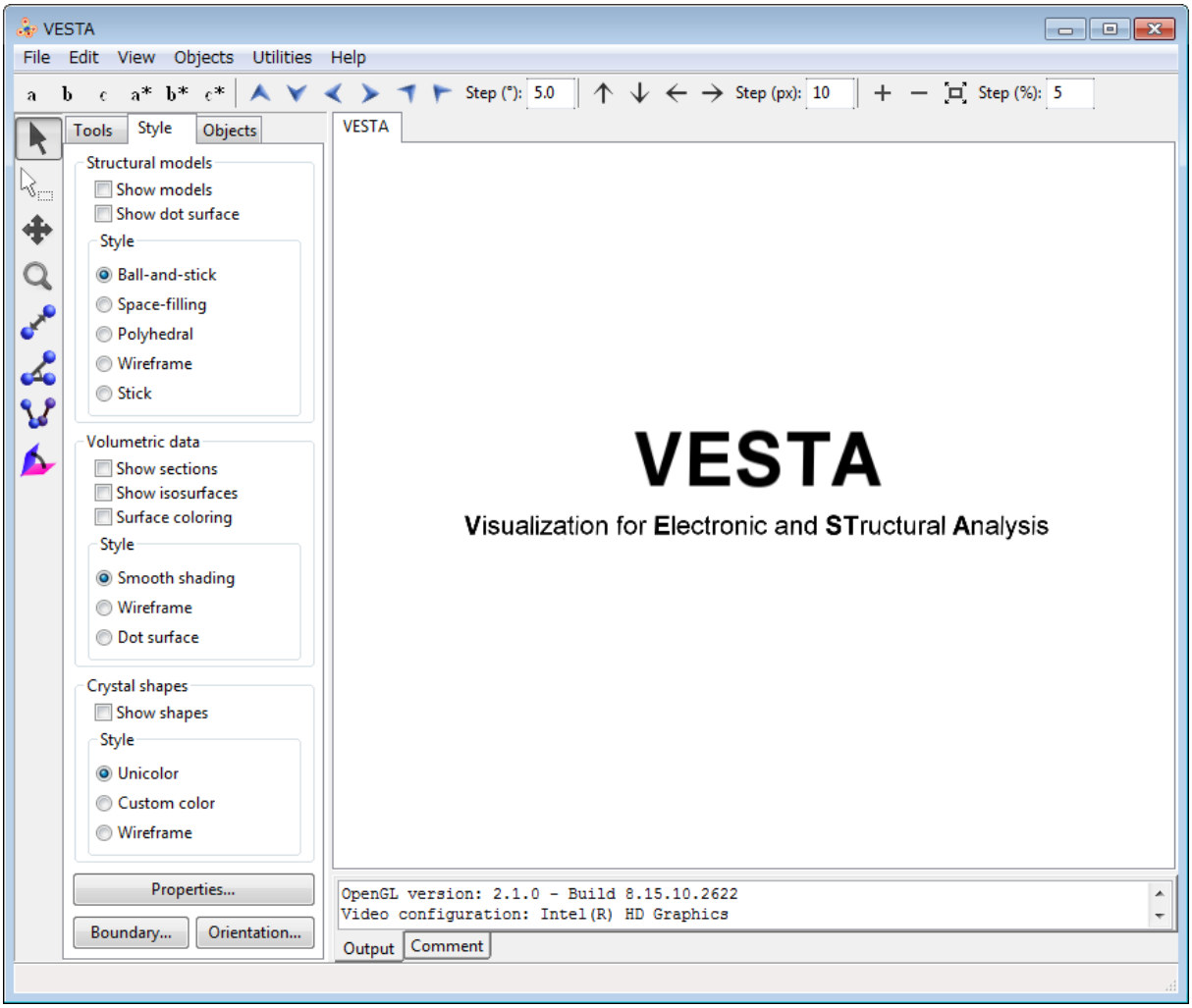
門馬 綱一 氏　　**https://jp-minerals.org/jp/about.html**
坂根 弦太　　**gsakane@ous.ac.jp**



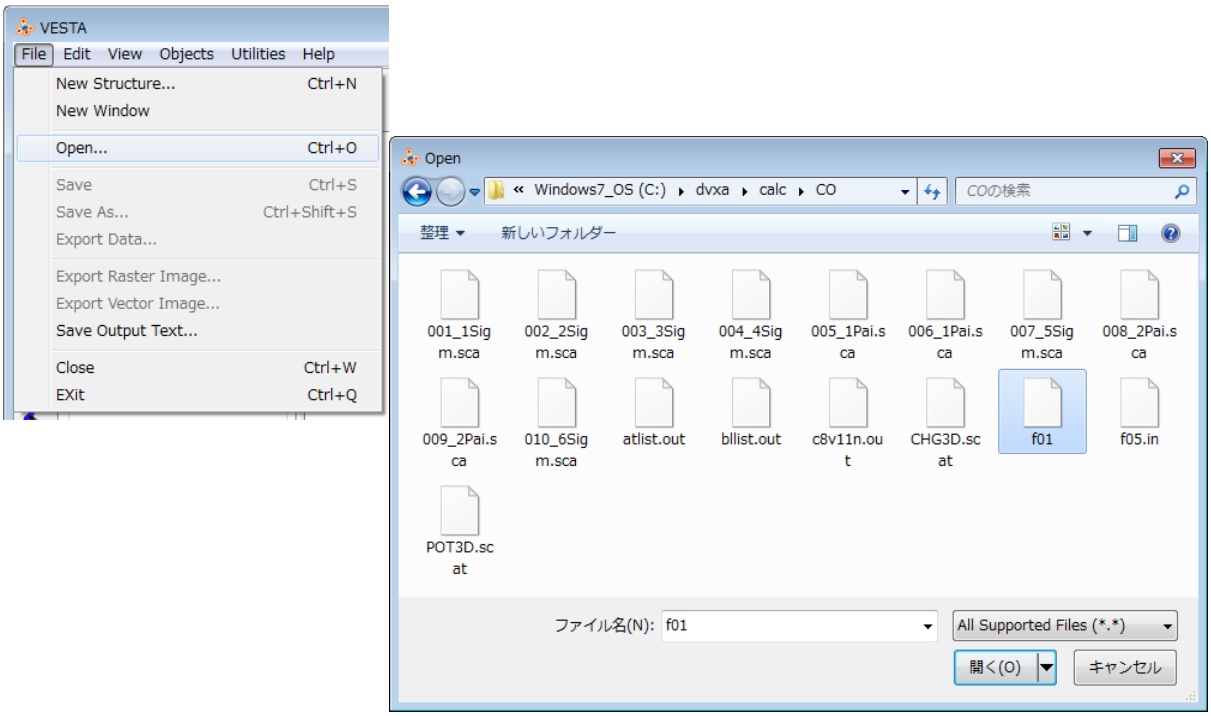
VESTA は **VICS-II** と同様，適当な場所に解凍するだけで使用できます．パスの設定などのインストール作業は一切必要ありません．ただし**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**から **VESTA** を起動するためには，**C:¥Program Files¥VESTA** にインストールしてある必要があります．

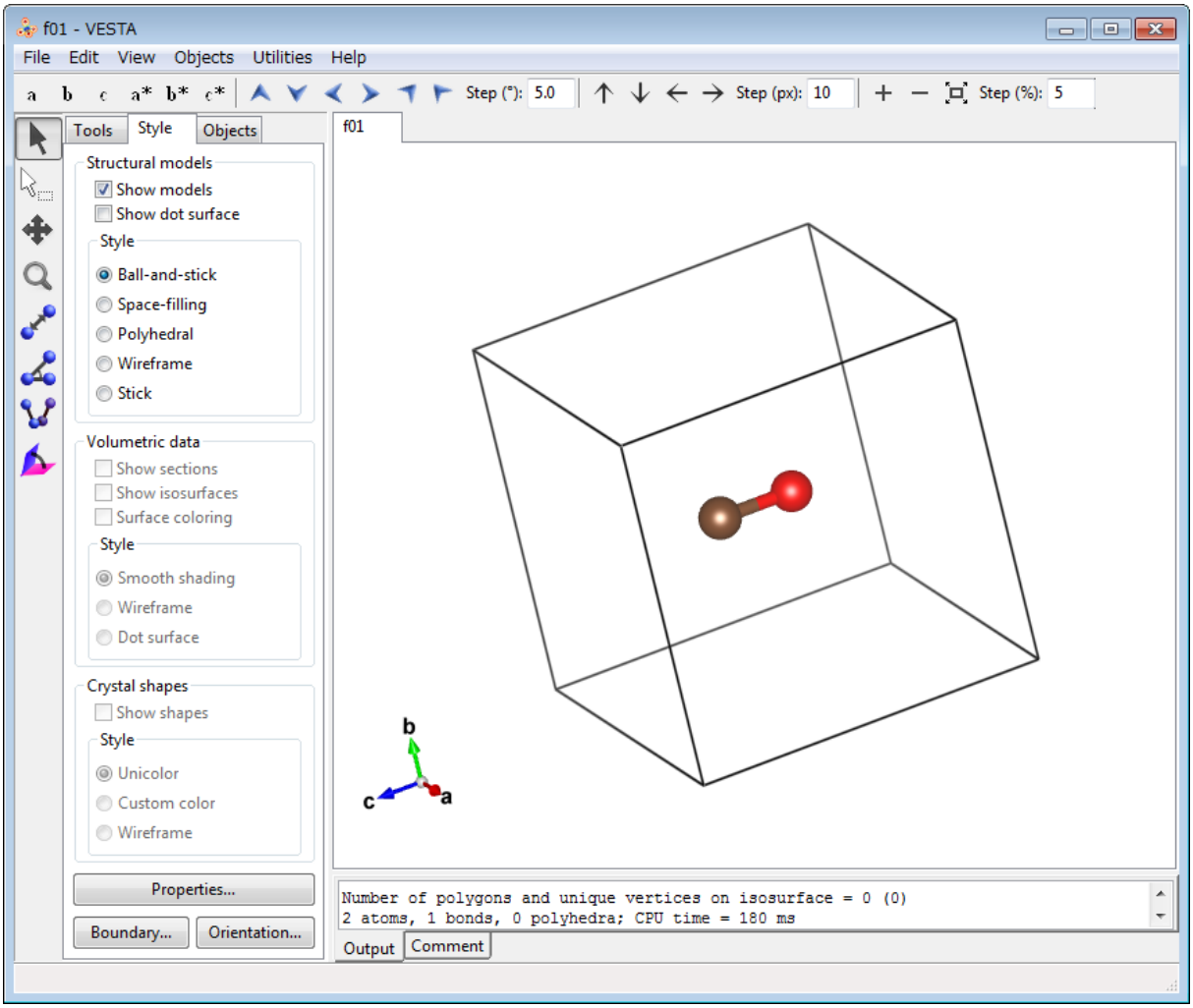
VESTA の Help メニュー→ Manual を選択してマニュアルを開けるようにするには，マニュアルを門馬綱一氏のウェブサイトよりダウンロードし，**VESTA** の実行ファイルと同じフォルダ内に保存して下さい．ファイル名は**"VESTA_Manual.pdf"**のままとして下さい．

VESTA.exe をダブルクリックすれば，**VESTA** を起動することができます．

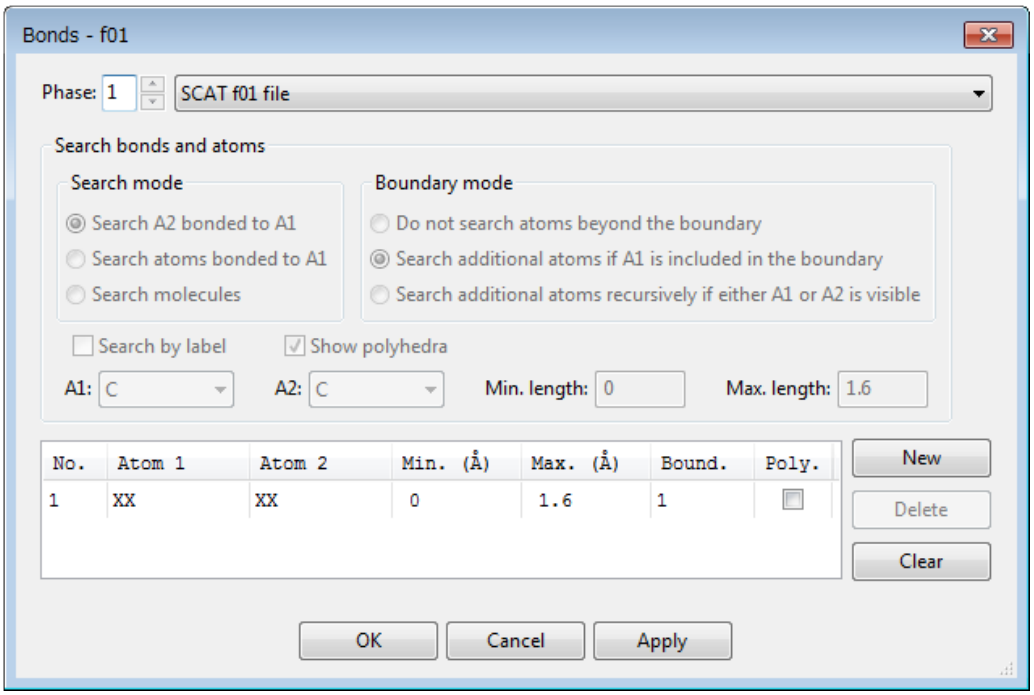


File - Open…(Ctrl + O) で **F01** を開きます． （例えば，C:¥dvxa¥calc¥CO¥F01）





もし，思うように原子と原子の間の結合の線が引かれていない場合，Edit − Bonds…で Bonds − F01 ウィンドウを開きます（思うように引かれている場合は以下の操作は不要です）．



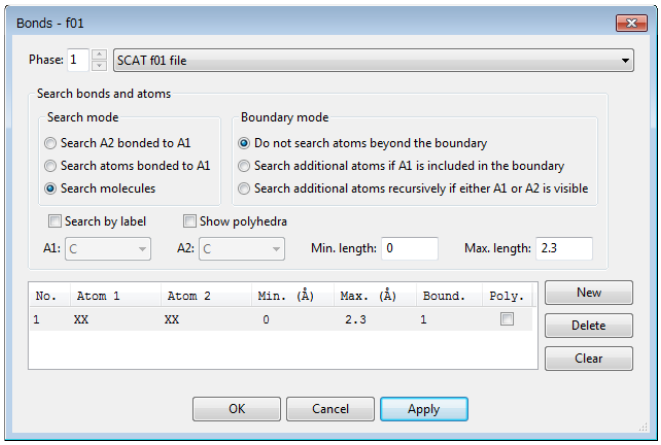
一酸化炭素の場合，C−O = 1.1282 Å なので，前頁の設定ですでに結合の線は描かれています．しかしもし他の分子で，例えば原子間距離が 2.25 Å であった場合，すでに入力されている

No.	Atom 1	Atom 2	Min. (Å)	Max. (Å)	Bound.	Poly.
1	XX	XX	0	1.6	1	☐

の行をクリックして，以下

No.	Atom 1	Atom 2	Min. (Å)	Max. (Å)	Bound.	Poly.
1	XX	XX	0	1.6	1	☐

のようにアクティブにし（Search mode は“Search molecules”になります），Max. length:の値を 1.6 から，例えば“2.3”に変更し，“Apply”ボタンをクリックすれば，原子間を結ぶ結合の線が描かれます．最後は“OK”ボタンをクリックします．

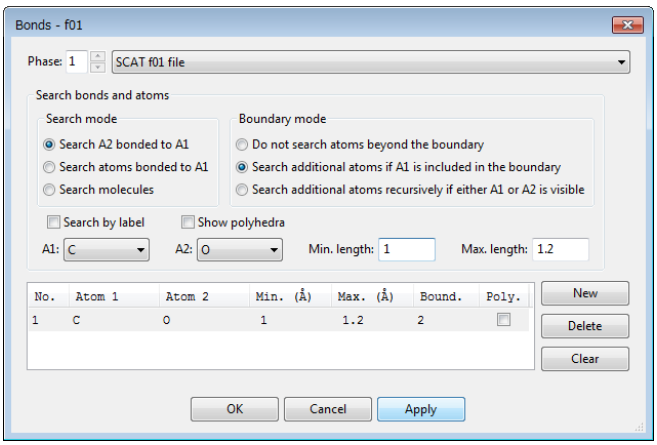


上記の設定の場合，描画している分子等における原子と原子の距離の組み合わせのうち，2.3 Å 以下の組をすべて探し出して結合の線を結んでくれます．

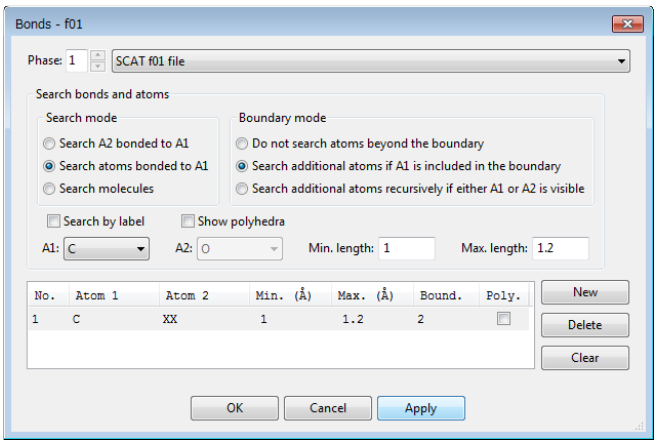
Search mode はこの方法以外に，2 種類あります．

“Search A2 bonded to A1”は，A1 の原子種（元素）から A2 の原子種（元素）の距離の組み合わせのうち，“Min. length”Å ～“Max. length”Å の組を結合の線で結んでくれます．

例えば右図の場合，炭素(C)から酸素(O)の距離の組み合わせのうち，1.000 Å～1.200 Å の範囲の距離の組を結合の線で結んでくれます．



“Search atoms bonded to A1”は，A1 の原子種（元素）から他の原子の距離の組み合わせのうち，“Min. length”Å～“Max. length”Å の組を結合の線で結んでくれます．



VESTA は **F01** を読み込むとき，仮の単位格子を設定します．結晶系は triclinic，空間群は P1 (#1) と仮定し，格子定数 a, b, c は，**CONTRD** の一般入力ファイル **CO4D** の **2 行目**（3F10.5）に書かれている **x, y, z 方向の長さ（単位: 原子単位 bohr）**から読み込んで設定されます（単位は Å に変換されます）．**F01** の座標は直交座標系ですので，α = β = γ = 90 ° です．

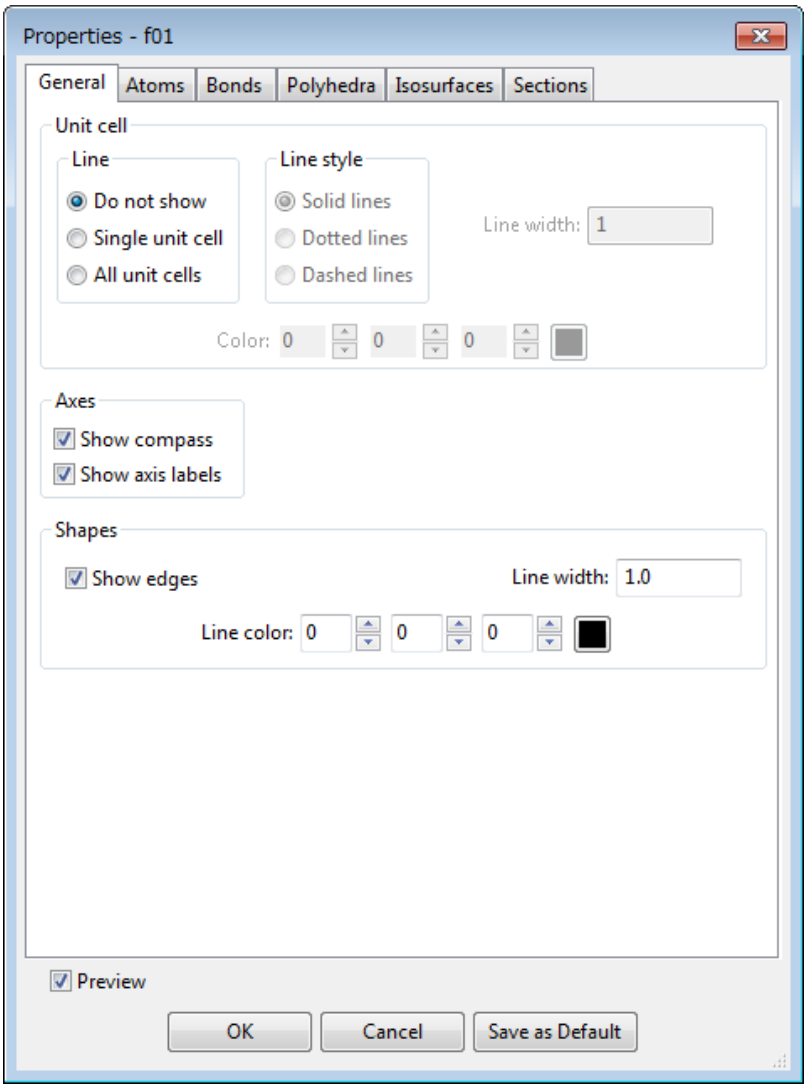
VESTA で **F01** を読み込んだとき，画面には原子と共に，この<u>仮の単位格子</u>が実線で表示されています．この<u>仮の単位格子</u>は，あくまで **CONTRD** を実行する際，電子密度，静電ポテンシャル，波動関数などの三次元データを出力する直方体領域を示すものであり，図としてこの単位格子を描く必要性はあまりないかと思いますので，“Properties”ボタンを押して“General”タブをアクティブにし，“Unit cell”の“Line”の箇所の

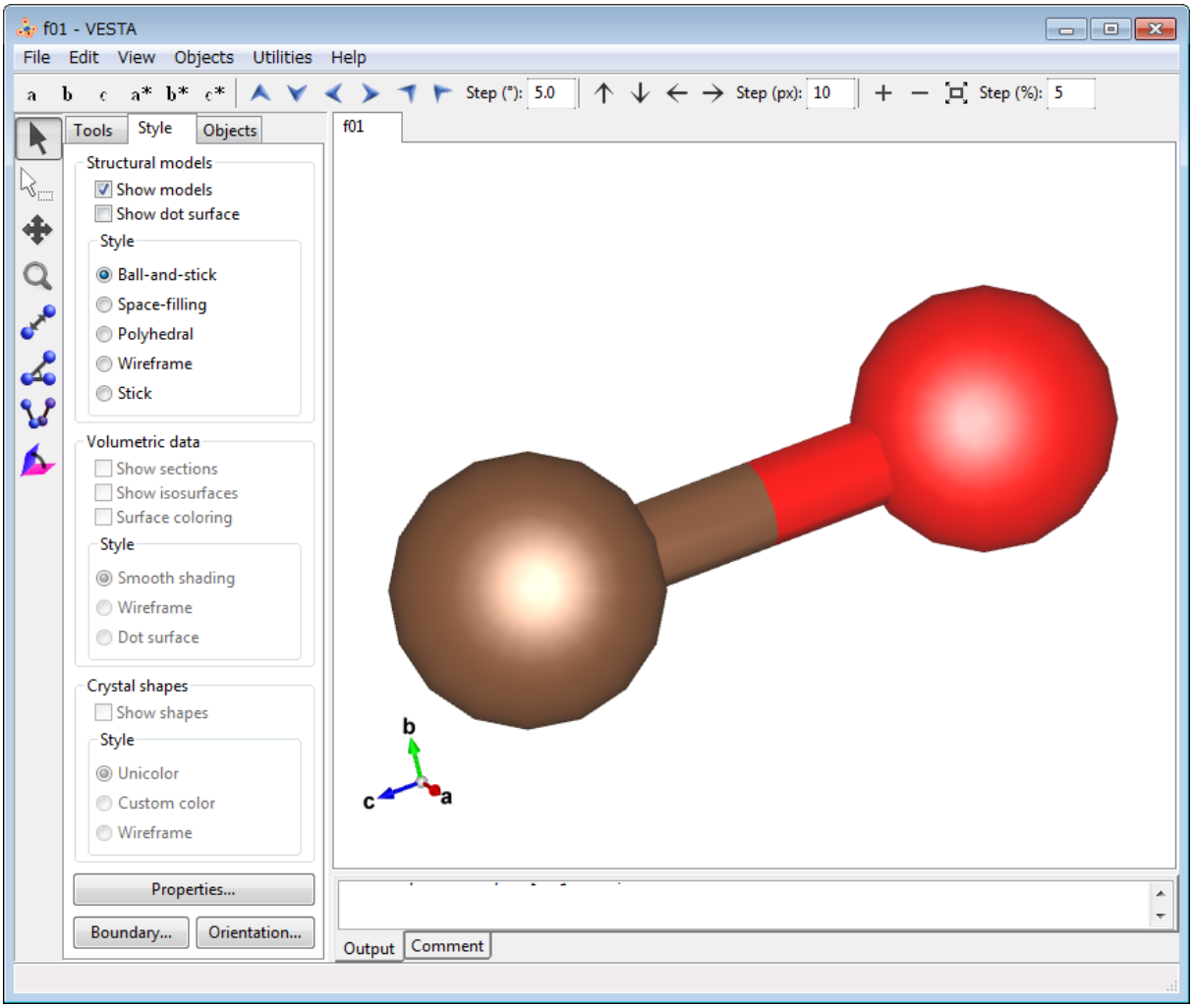
〇Do not show
◎Single unit cell
〇All unit cells

を，

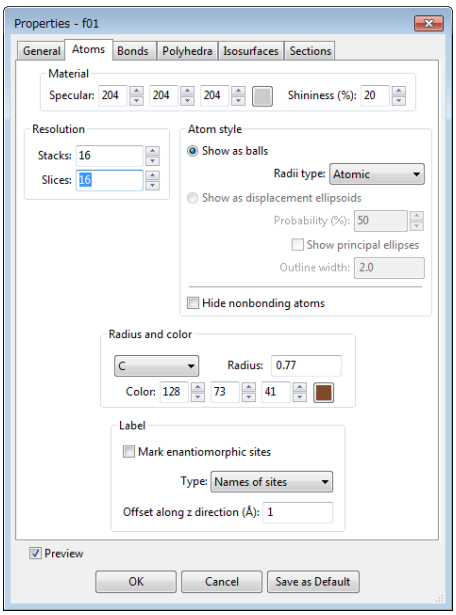
◎Do not show
〇Single unit cell
〇All unit cells

に変更して，表示されないようにしておくと良いでしょう．

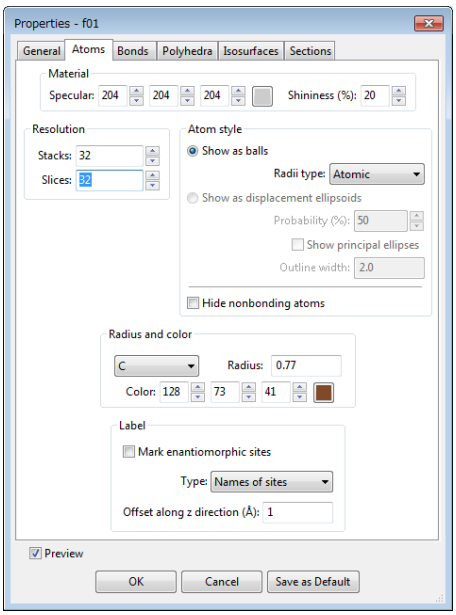


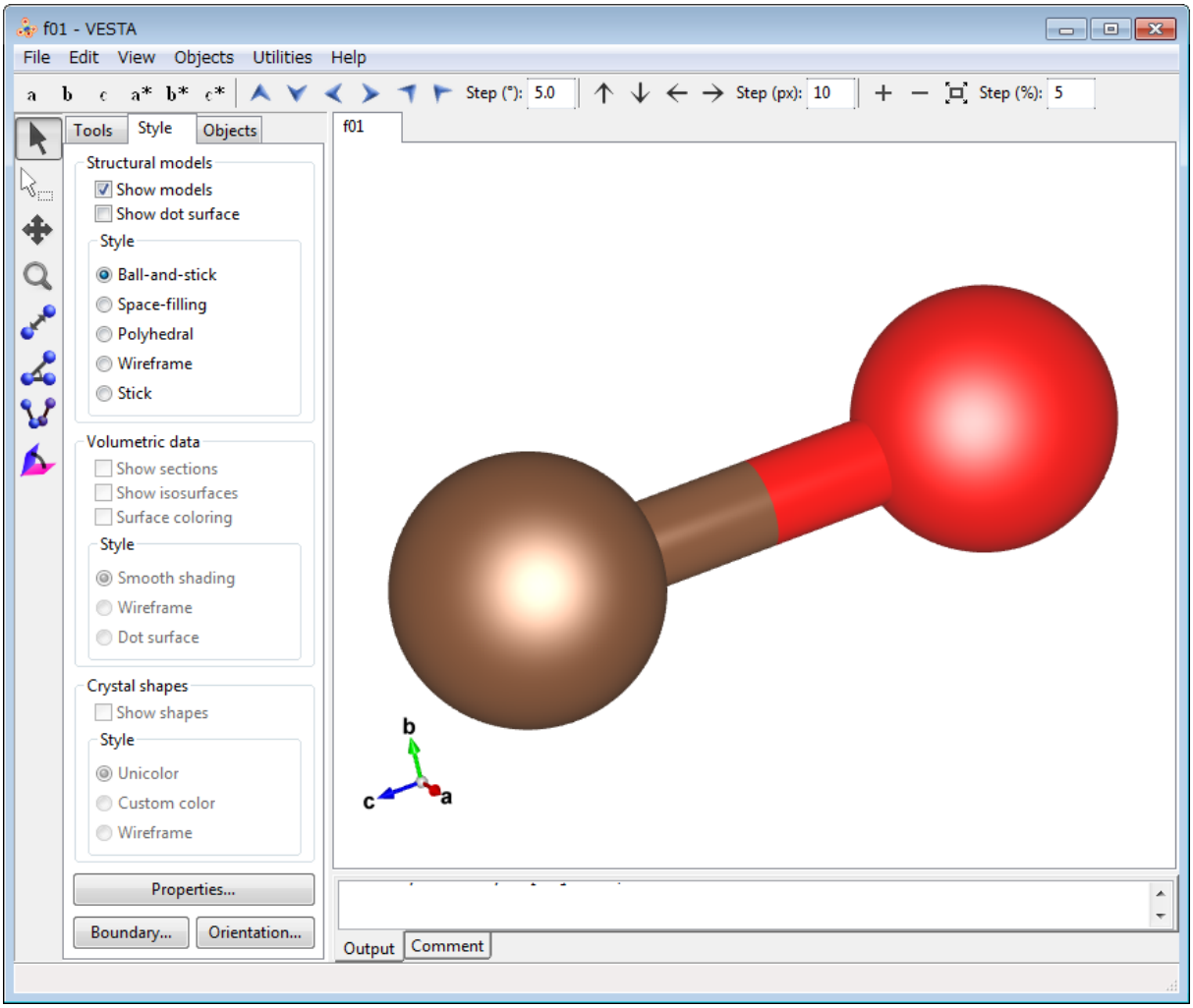


もし，原子または結合の棒の輪郭がギザギザになっていることが気になる場合は，容易に滑らかにすることができます．“**Properties**”ボタンの“**Atoms**”タブまたは“**Bonds**”タブを開き，“**Resolution**”の **Stacks:** と **Slices:** の値を増やしてやれば原子または結合の棒の輪郭が滑らかになっていきます．ここでは例えば，“**Atoms**”タブウィンドウで，**Stacks:** 32 と **Slices:** 32 にしてやります（値を増やせば増やすほど図は美しくなりますが，動作は重たくなります）．



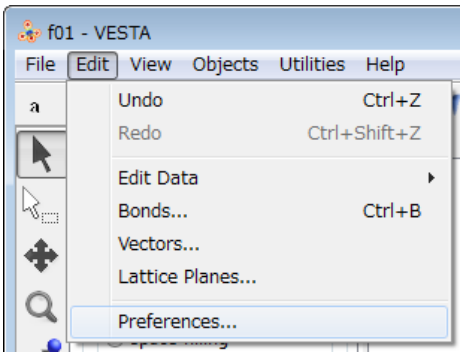
→

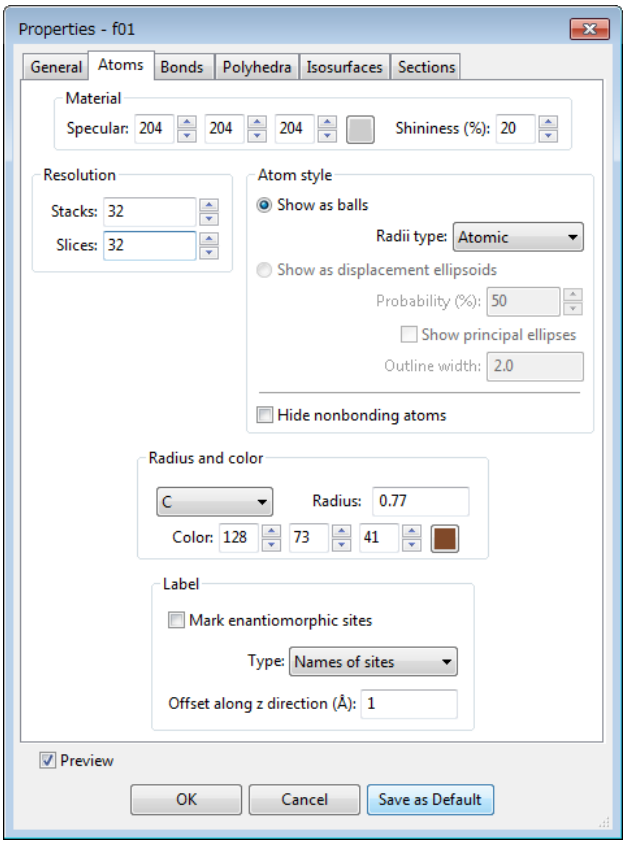


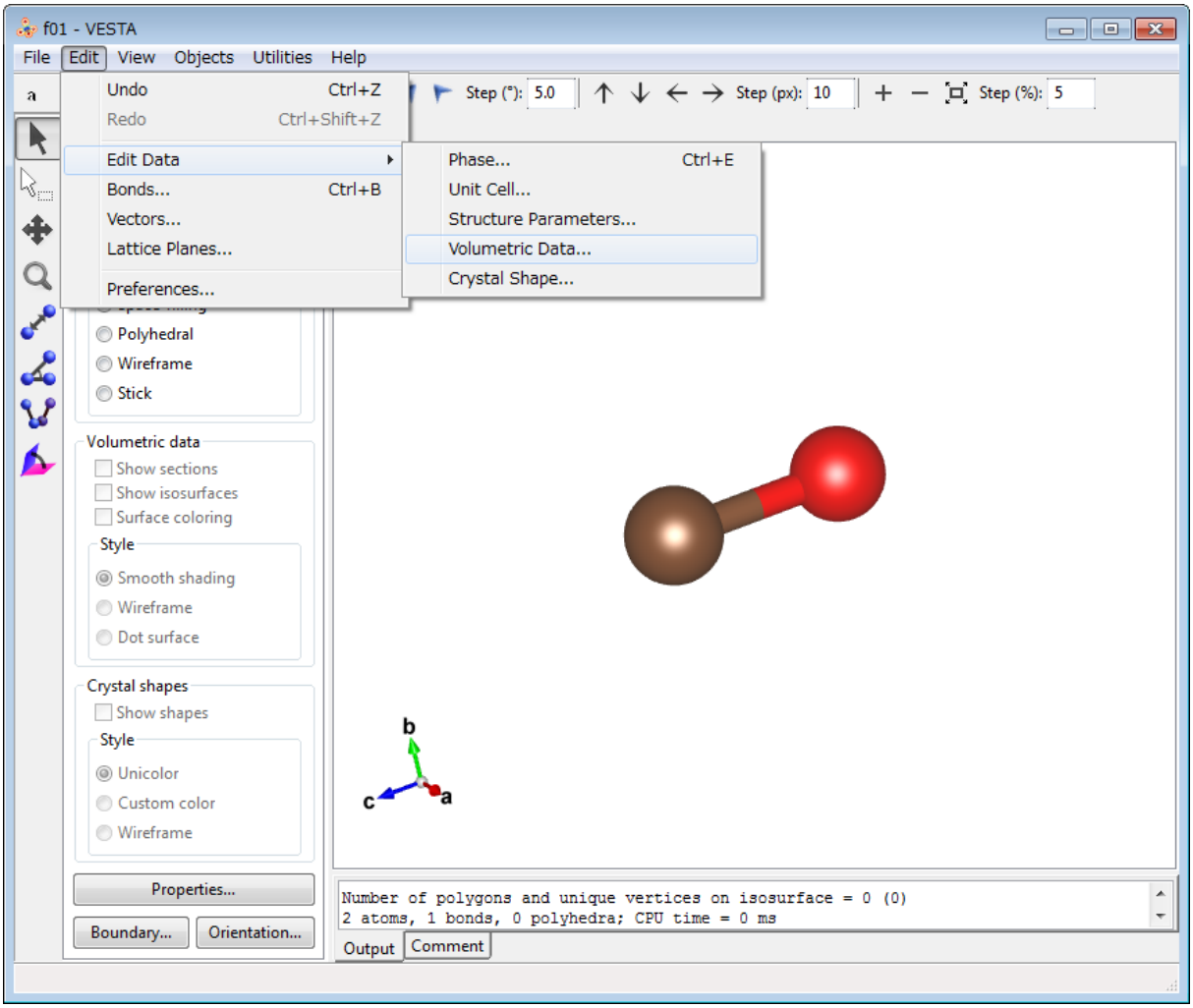


“**Properties**” ウィンドウの各種設定値は，右下の【Save as Default】ボタンをクリックすれば保存され，次回の **VESTA** 操作からはその設定値がデフォルトとして使用されることになります．

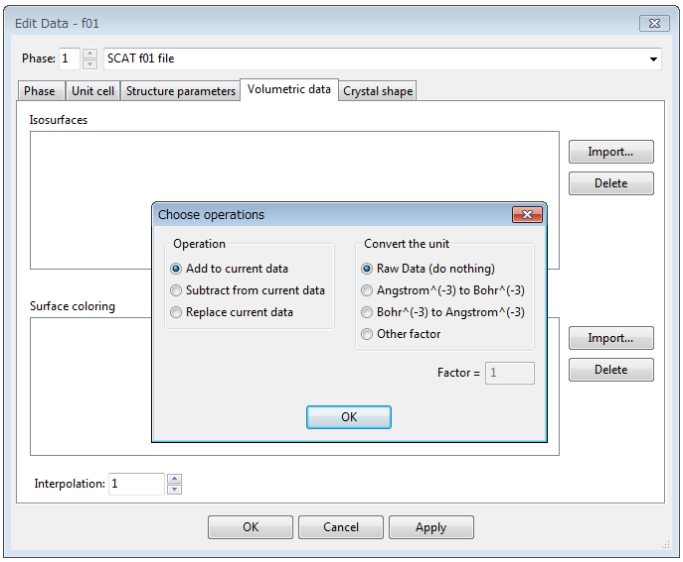
また，Edit の Preferences…でもその他いろいろな設定が可能です．



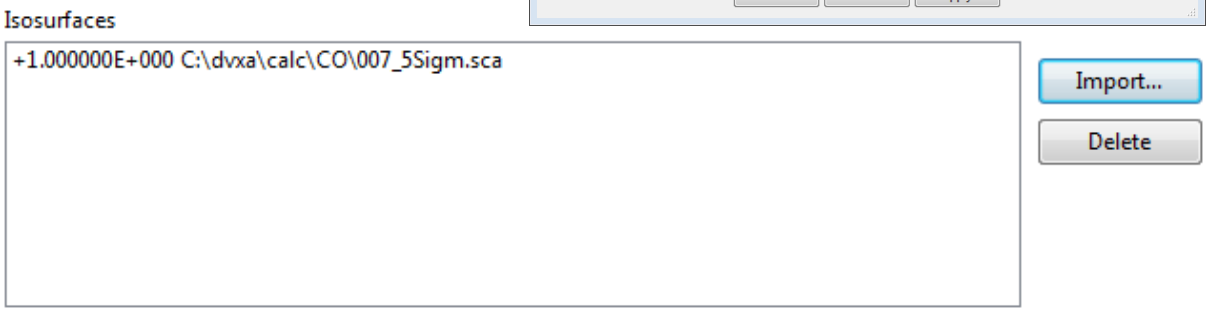




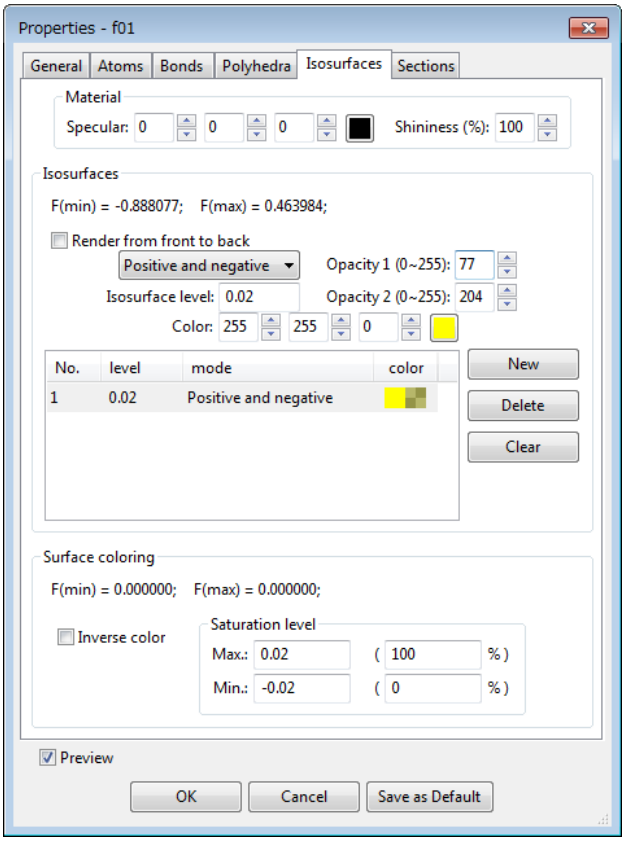
Edit – Edit Data – Volumetric Data… の Edit Data ウィンドウで，上半分の Isosurfaces の右側の Import…ボタンで***. sca** を読み込みます．Choose Operations ウィンドウの Operation は“Add to current data”を選んで**[OK]**ボタンをクリックします．

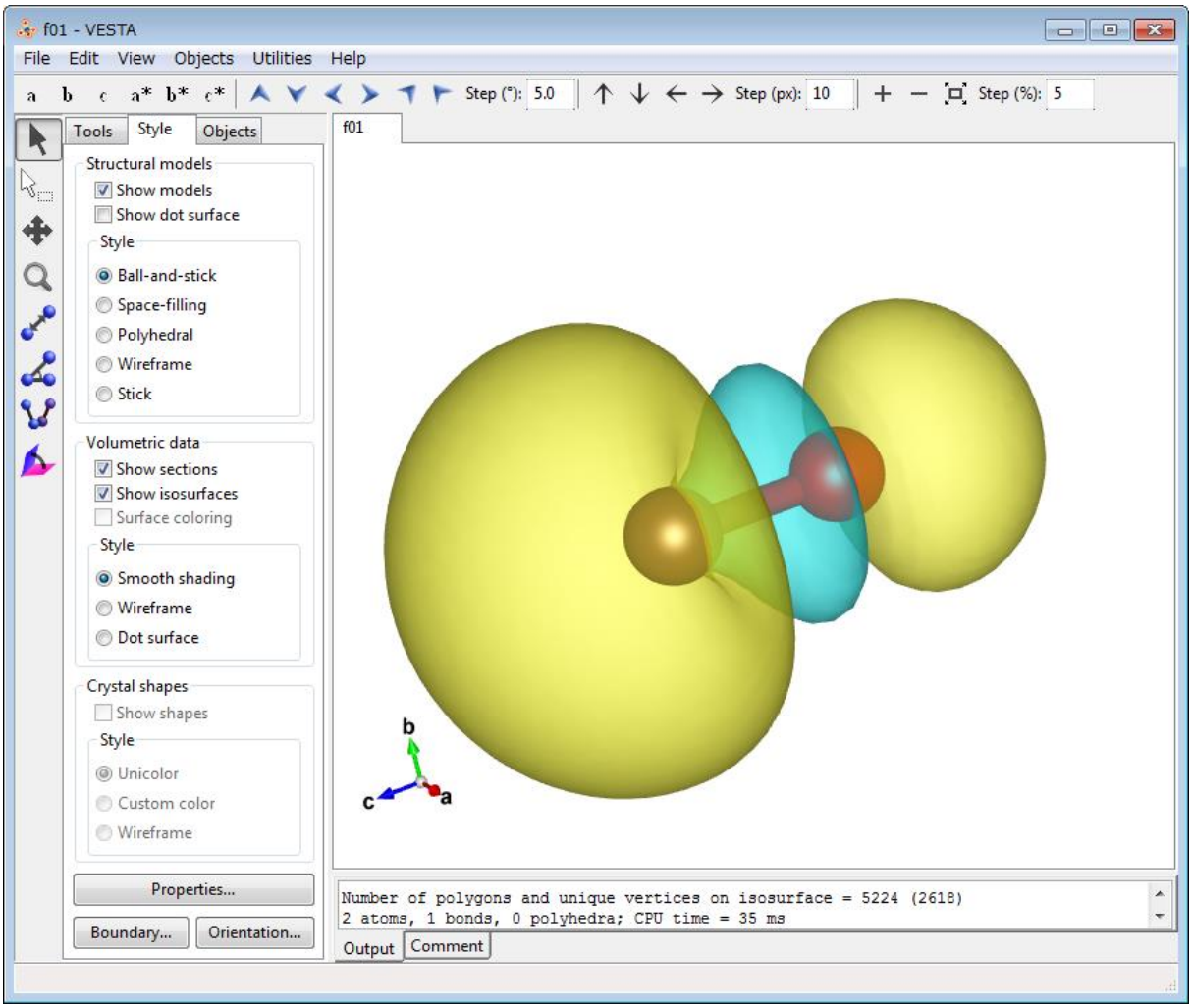


下の画面のようになったら，**[OK]**ボタンを押します．



Properties ボタンを押して Properties ウィンドウを開き，Isosurfaces タブをクリックします．Isosurface level: を，例えば 0.02 に変更してみます．さらに例えば Opacity 1 (0～255):を 127 から 77 に，Opacity 2 (0～255): を 255 から 204 に変更してみます（値は任意ですのでいろいろお試し下さい）．Opacity 1 と Opacity 2 の説明は 44 ページを参照．Isosurface level の値は，大きくすれば波動関数は小さく表示されます．逆に Isosurface level の値を小さくしていけば，波動関数は大きく表示されます．Isosurface level の値をいろいろ変更してみることにより，適当な大きさで波動関数の等値表面が描画されるよう調節して下さい．





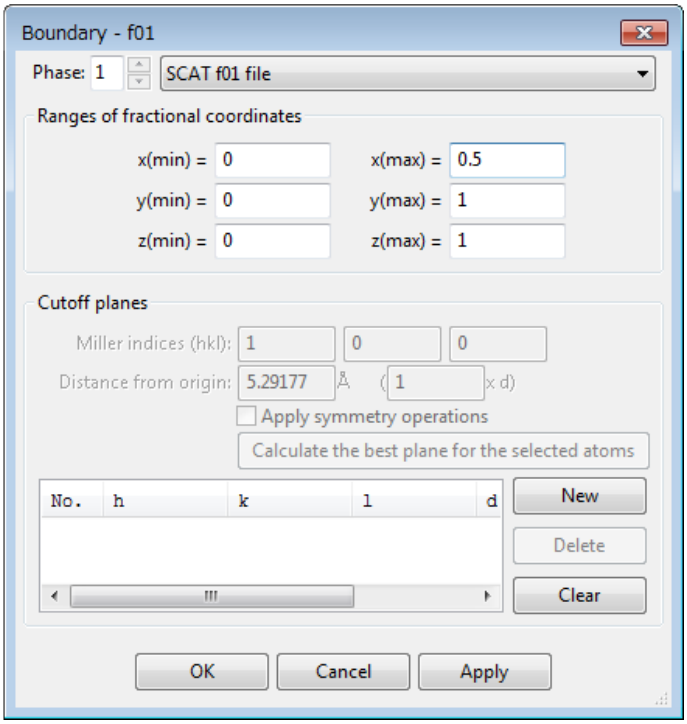
Boundary ボタンを押して Boundary ウィンドウを開き，“Ranges of Fractional coordinates”の箇所の

x(min) = 0　　x(max) = 1.0
y(min) = 0　　y(max) = 1.0
z(min) = 0　　z(max) = 1.0

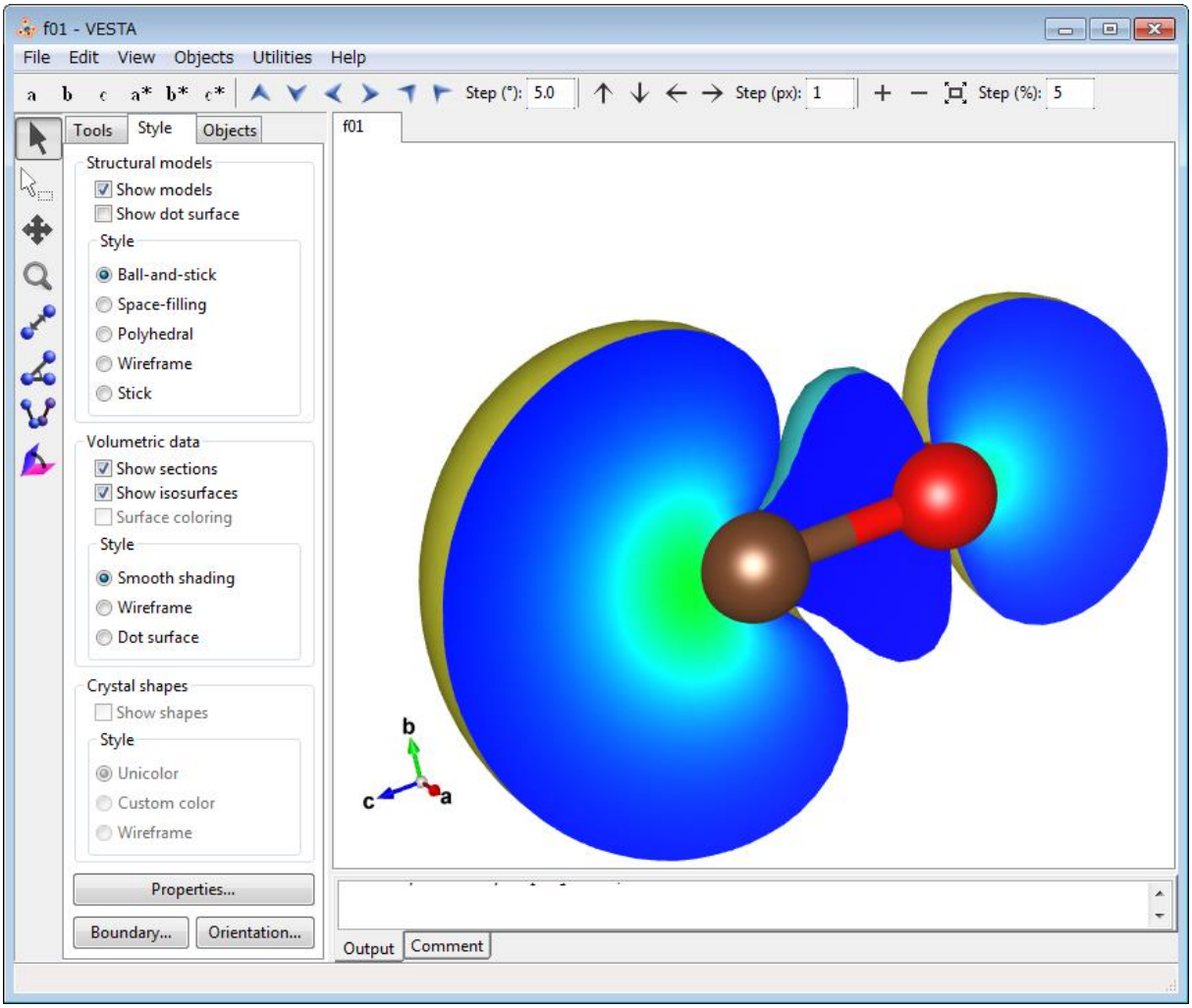
となっている箇所を，例えば

x(min) = 0　　x(max) = <u>0.5</u>
y(min) = 0　　y(max) = 1.0
z(min) = 0　　z(max) = 1.0

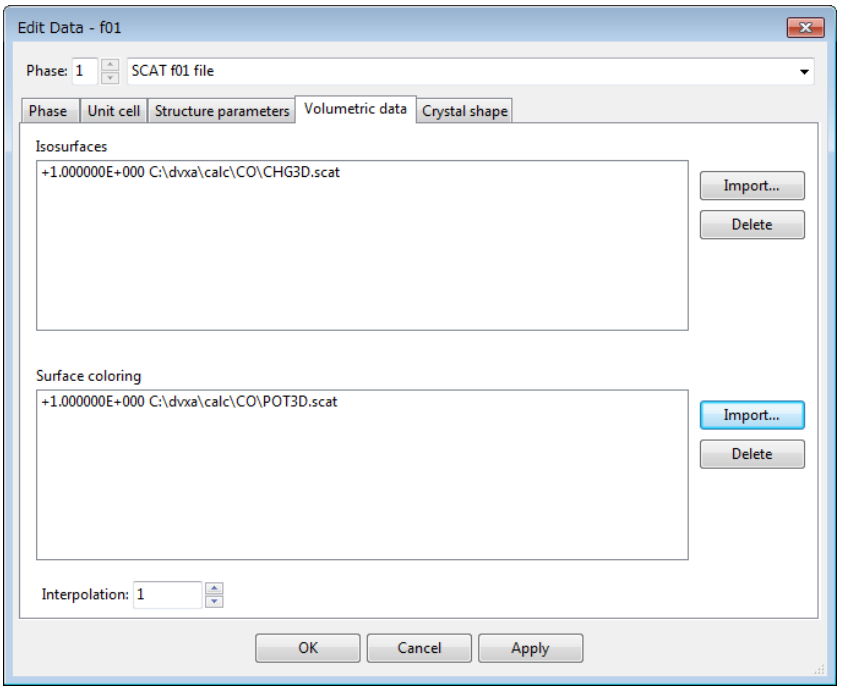
として[Apply]ボタンを押すと，この場合は Y-Z 面で波動関数を切断してその断面を眺めることができます．どんな面で切断するかは任意ですので，いろいろとお試し下さい．



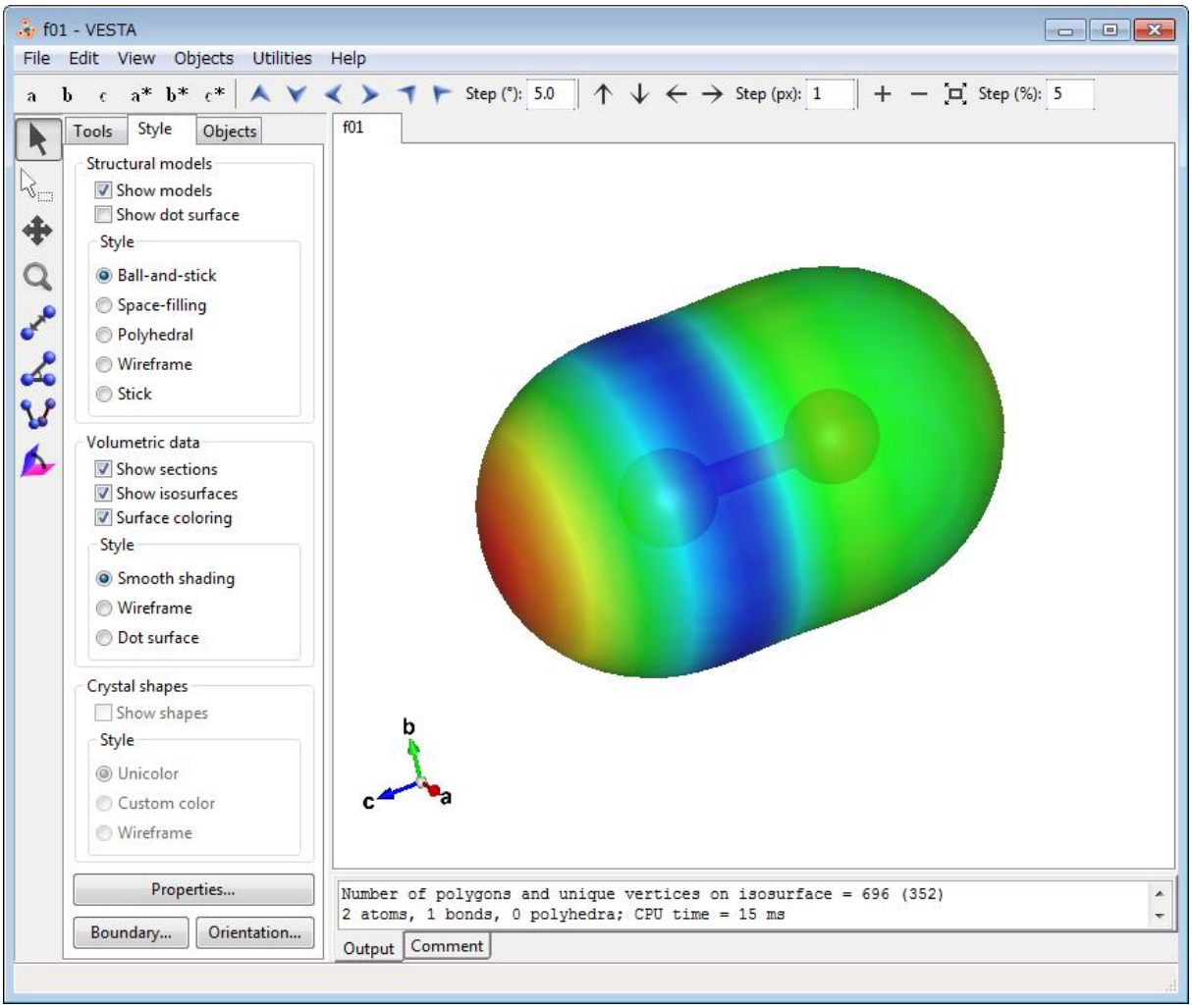
切断面を観察した後は，x = 0 ～ 1.0，y = 0 ～ 1.0，z = 0 ～ 1.0 に値を戻して[Apply]ボタンをクリックし，波動関数の等値表面図を元の状態に戻しておいて下さい．



引き続き，Edit – Edit Data – Volumetric Data…で開く画面の上半分の Isosurfaces の箇所，まずは現在読み込まれている波動関数ファイルを選択して，Delete ボタンをクリックします．そして今度は改めて，Import…で **CHG3D.scat** を読み込みます（Operation は“Add to current data”）．さらに，下半分の Surface Coloring の箇所の Import…で **POT3D.scat** を読み込みます（Operation は“Add to current data”）．下の画面のようになったら[Apply]ボタンをクリックします．この操作で静電ポテンシャルマップが描けます．

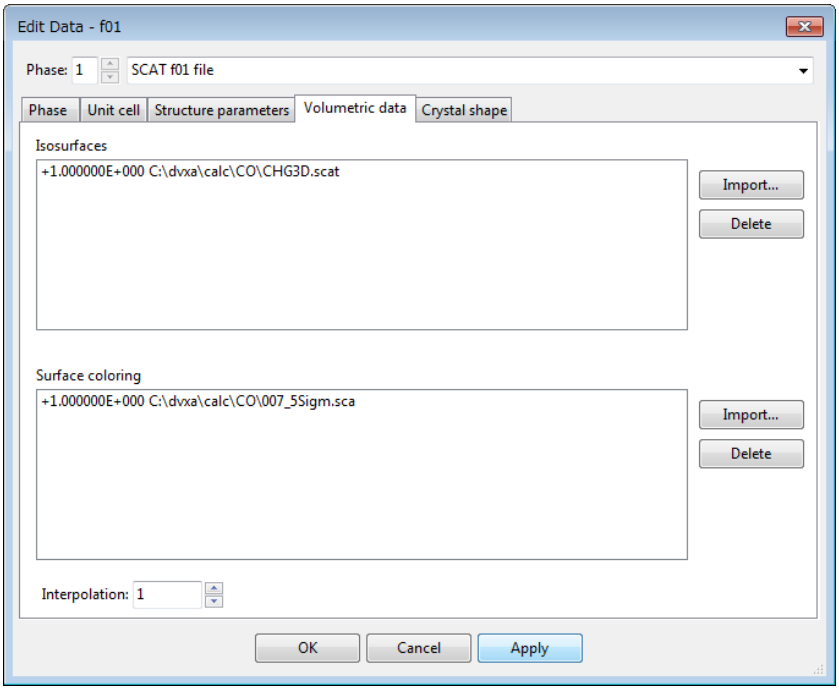


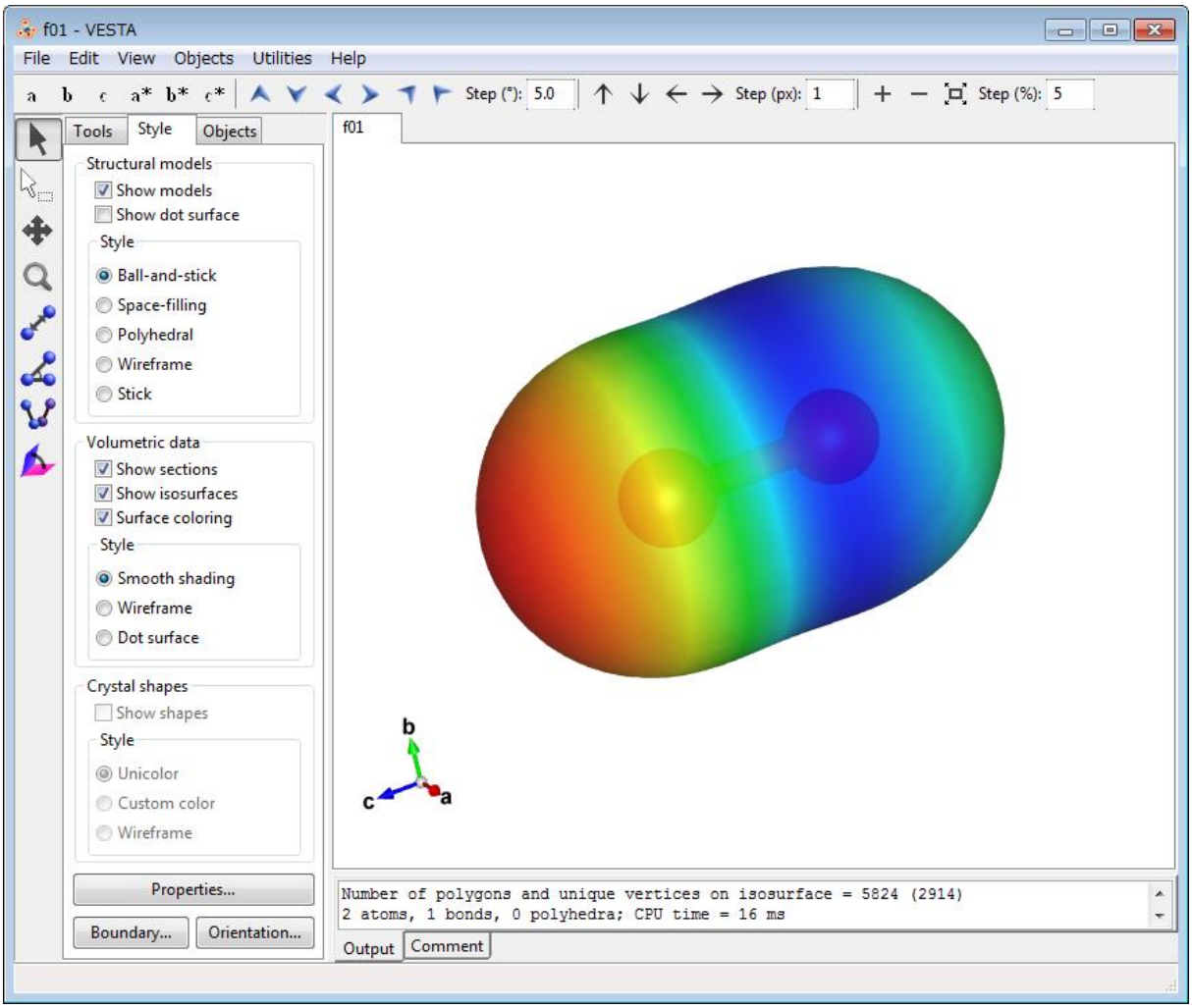
Properties…の Isosurfaces では，Isosurface level: 0.02, Opacity 1 (0～255): 204 Opacity 2 (0～255): 255 とすると良いでしょう（いろいろお試し下さい）．



引き続き，Edit – Edit Data – Volumetric Data…で開く画面の上半分の Isosurfaces の箇所，まずは現在読み込まれている **POT3D.scat** を選択して Delete ボタンをクリックします．そして今度は改めて，Import…で HOMO の**∗.sca** を読み込みます（Operation は“Add to current data”）．下の画面のようになったら[Apply]ボタンを押します．これで HOMO マップが描けます（電子密度の等値表面における HOMO の波動関数の値の大小によって，電子密度の等値表面を彩色（値が大きければ赤色，小さければ青色，その中間が緑色）した図）．

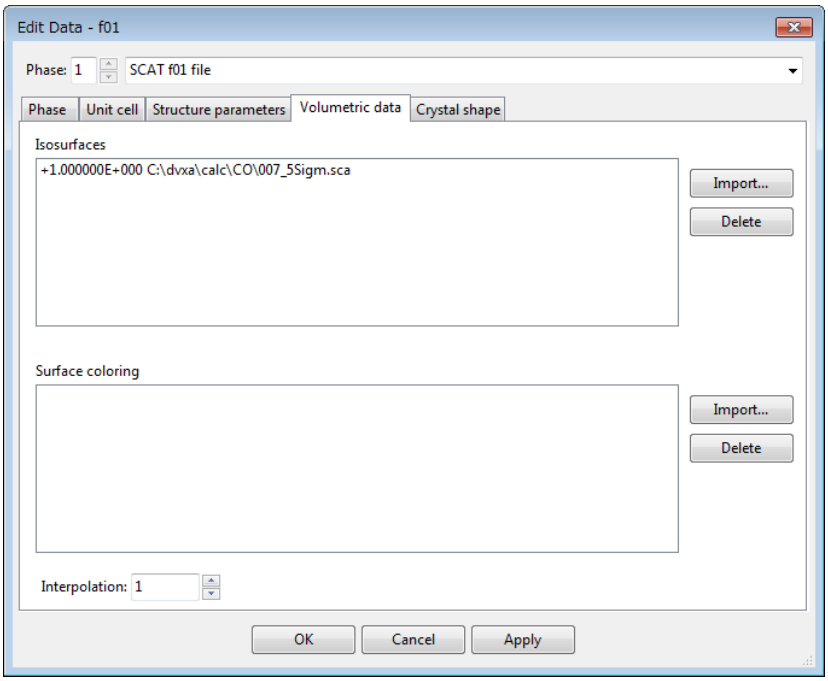
LUMO マップ等も同様の手順で描くことができます．





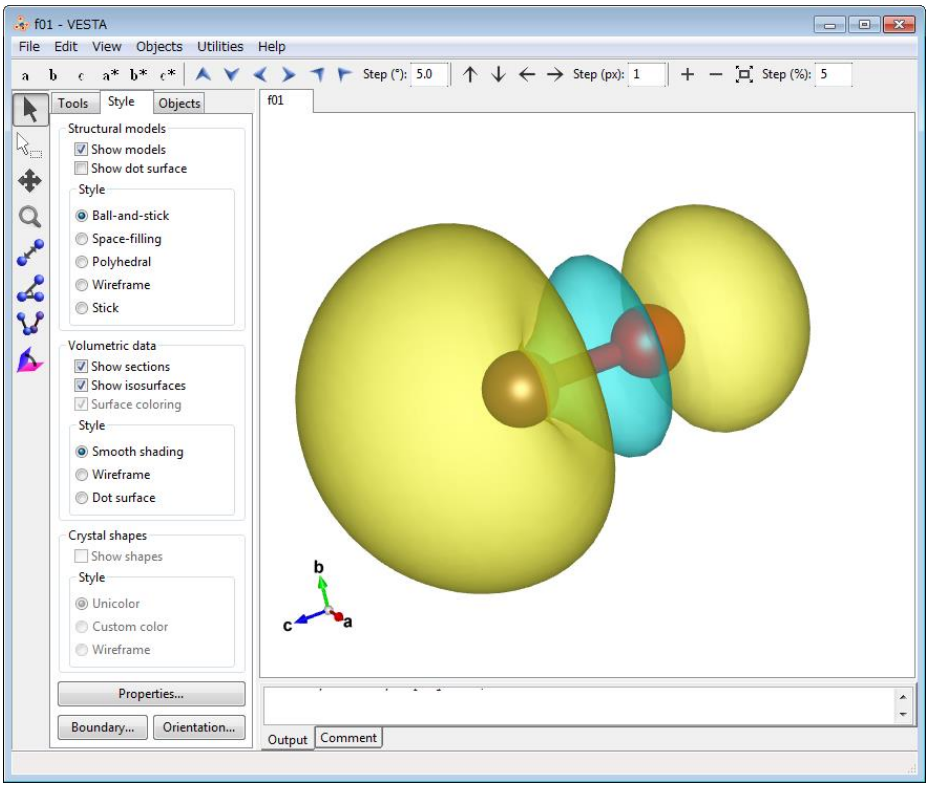
VESTA では，**eduDV** の **ATOMN** や **IONN** で描いた原子軌道関数や，様々なモデルで計算した分子軌道の等値表面を描くことによって，その形状や位相を三次元可視化して確認することができますが，さらにそれら（原子軌道や分子軌道）を二乗することによって，電子の発見される確率の大小（いわゆる電子密度）を計算してその等値表面を描くこともできます．もちろん二乗することによって位相に関する情報は失われますが（プラスの数字も，マイナスの数字も，二乗すればプラスの数字になりますので），教育現場で『電子とは何か』を説明する際には，こうした原子軌道や分子軌道を二乗した“電子が発見される確率の大小”の三次元可視化は，生徒さん・学生さんに正しい原子軌道・分子軌道・電子に関するイメージを伝えるために有用だと思います．

なお電子の詰まっている分子軌道について，二乗したものを全て足しあわせた情報（いわゆる，モデル（原子・分子など）全体の電子密度）が **CHG3D.scat** にすでに出力されていることは，前述の通りです．

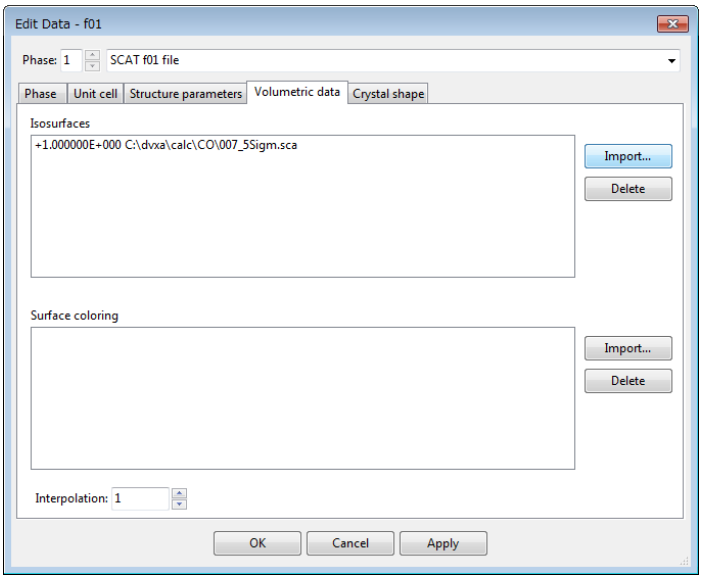


ここでは本冊子 112 ページから 114 ページで描いた一酸化炭素分子の HOMO (5σ軌道)について，分子軌道の波動関数を二乗して，HOMO (5σ軌道)の電子の発見される確率の大小を等値表面で描いて三次元可視化してみることにいたします．

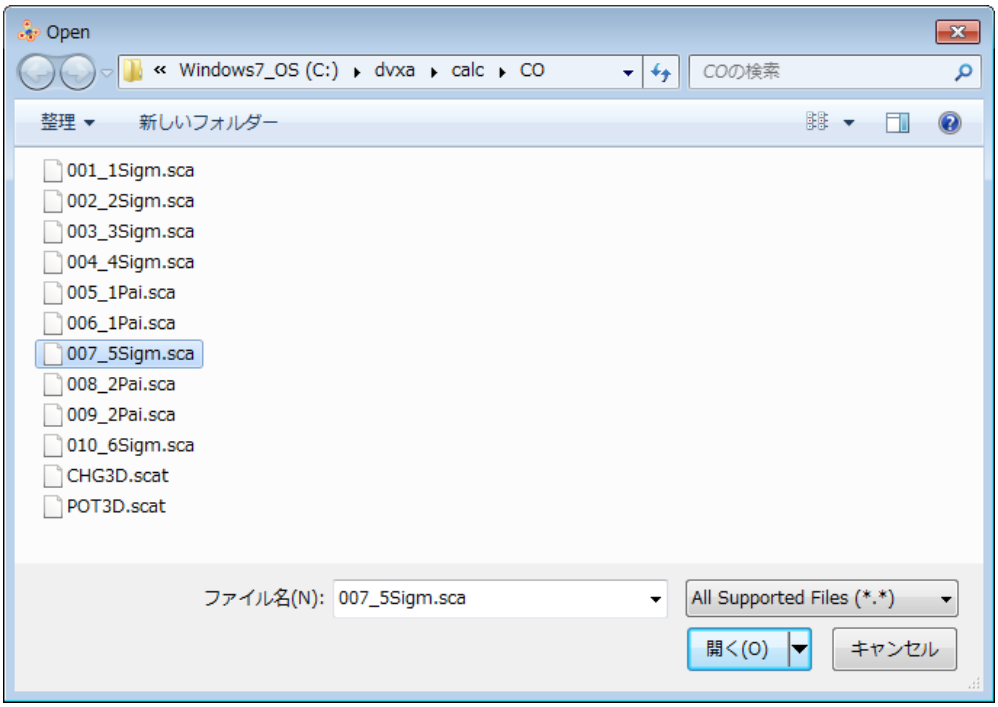
Isosurface level: $0.02a_0^{-3/2}$
Opacity 1(0-255): 77
Opacity 2(0-255): 204



ここで再び Edit – Edit Data – Volumetric Data…を開き，再度上半分の Isosurfaces の箇所の右側の Import…ボタンをクリックします.



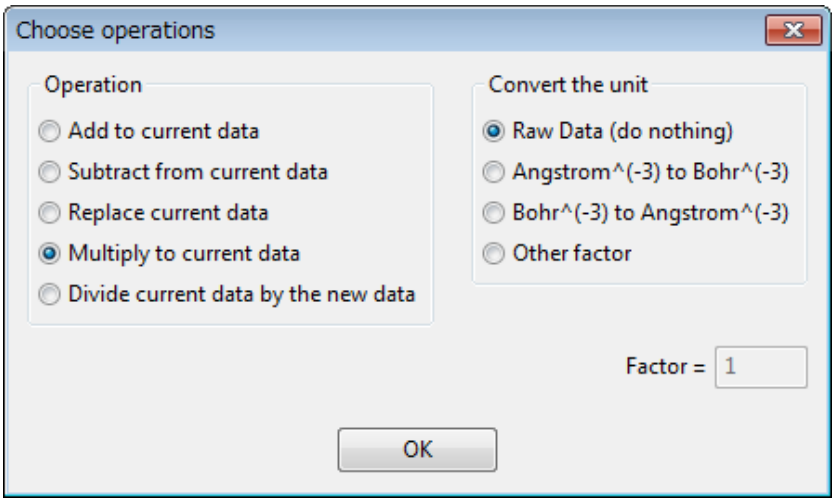
HOMO(5σ軌道)を二乗するので，再び同じ 007_5Sigm.sca を追加で読み込みます.



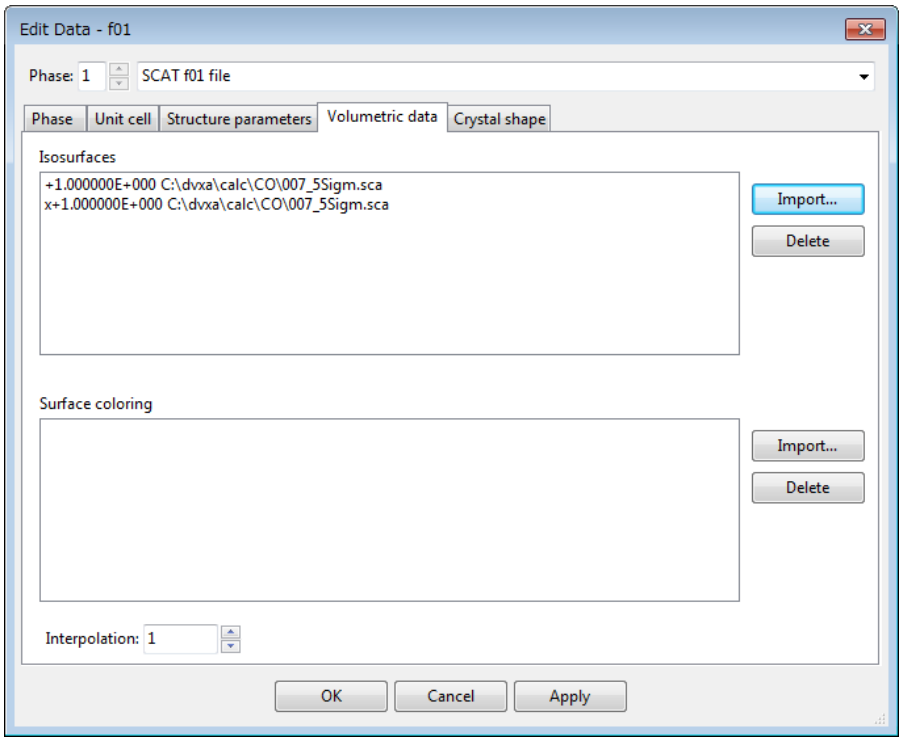
【Choose operations】

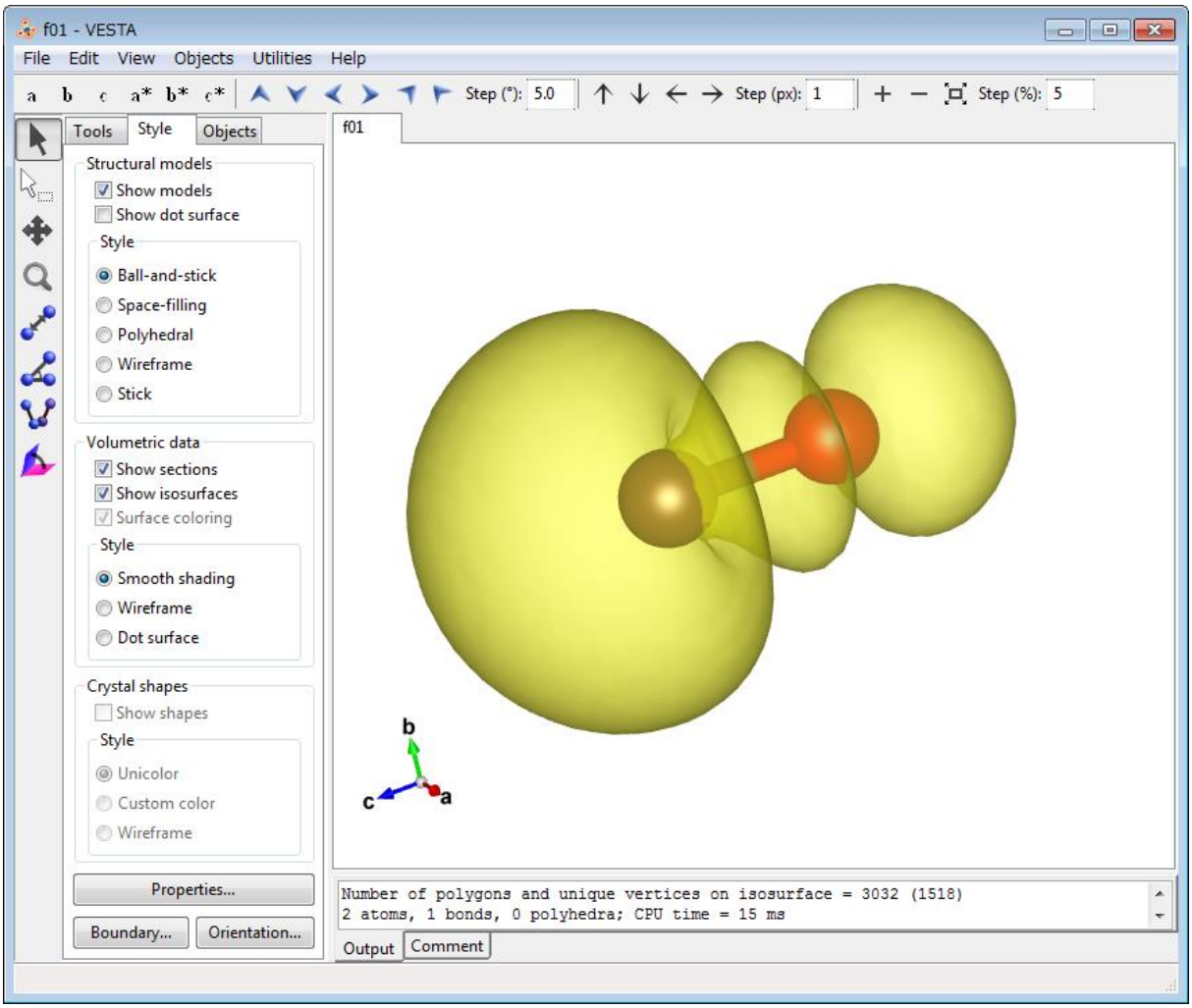
ウィンドウが開きますので，Operation 欄で◎Multiply to current data を選択します.

そうすると，元のファイルに対して，追加で読み込んだファイルが掛け合わされます（つまり二乗になります）.



波動関数の値を二乗することによって値自身はかなり大きくなりますので，【Properties...】ボタンの【Isosurfaces】タグの Isosurface level の値は，かなり小さめに変更する必要があります．今回の例では，Isosurface level の値は 0.02 から 0.001 に変更しました．





図．一酸化炭素(CO)分子の HOMO(5σ軌道)の電子の発見される確率の大小の等値表面図
(Isosurface level: $0.001a_0^{-3}$, Opacity 1 (0~255): 77, Opacity 2 (0~255): 204)

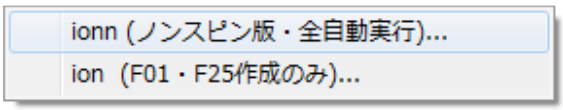
原子軌道や分子軌道を二乗することによって，電子の発見される確率の大小（いわゆる電子密度）を計算してその等値表面を描く機能は，主に教育現場で生徒さん・学生さんの“電子”に対する正しいイメージ構築に重宝する機能かと思います．**eduDV** の **ATOMN** や **IONN** で単原子・単原子イオンの電子状態を計算した後は，**VESTA** で原子軌道関数を等値表面図で三次元可視化すると共に，**VESTA** のこの波動関数を二乗して可視化する機能によって，より実像に使い“電子”のイメージを生徒さん・学生さんに与えていただくと良いでしょう．

【例：**Co**$^{3+}$の 3d 軌道，4s 軌道，4p 軌道】

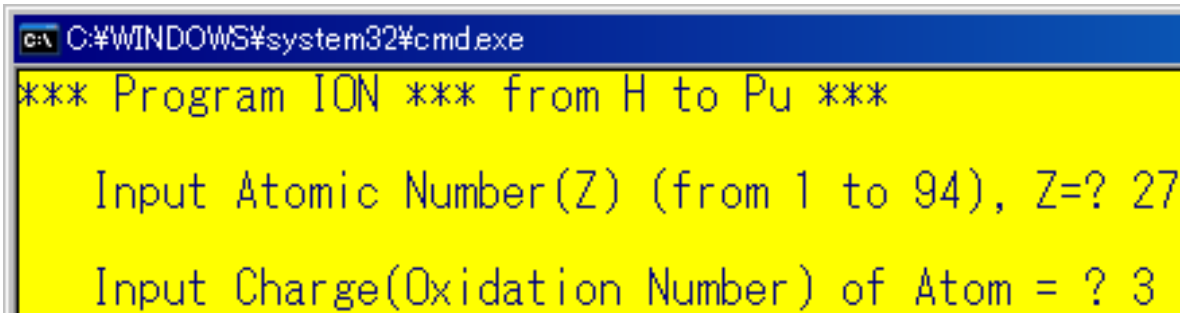
1．秀丸エディタを起動します．

2．【**eduDV...**】ボタンを押し，
一番下の行の **22. 対称なし**
【単原子イオン】原子軌道関数を
見るときなどに便利です...
を選択します．

3．**ionn(ノンスピン版・全自動**
実行)...を選択します．



4．原子番号と電荷（形式的酸化数）
の入力を求められますので，**Co** の原子番号 **27** と **Co**$^{3+}$の電荷（形式的酸化数）**3** を入力します．



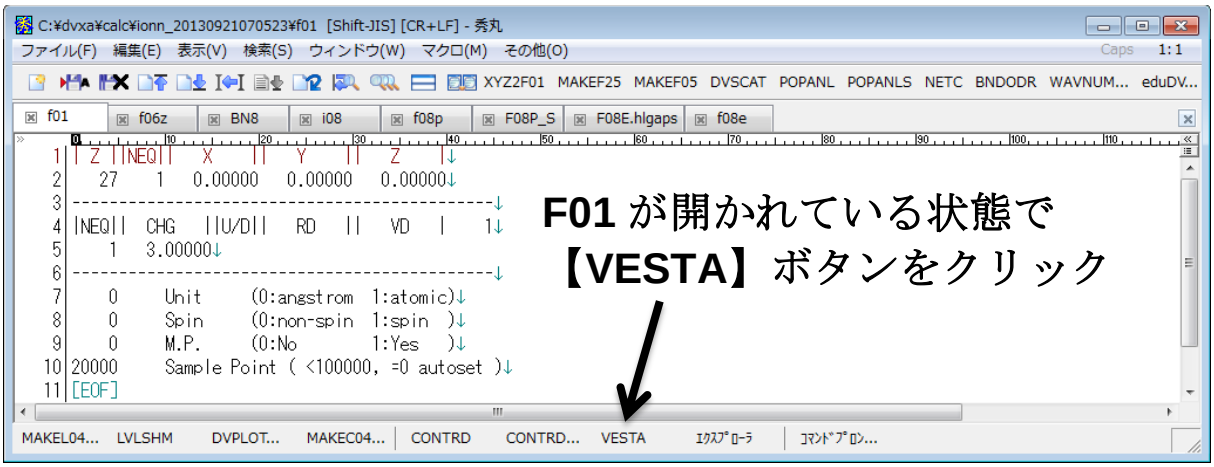
あとは全自動で，三価のコバルトイオンの単原子イオンの **DV−*Xα* 分子軌道計算**が行われ，様々なユーティリティプログラムの実行をはじめ，三価のコバルトイオンの主だった原子軌道関数については，**VESTA** ですぐに読み込むことのできる***. sca** ファイルが **CONTRD** で生成されます．

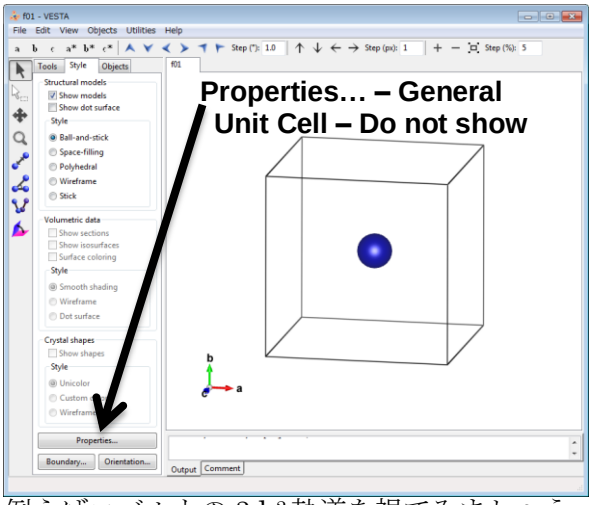
```
C:¥WINDOWS¥system32¥cmd.exe
   Input Atomic Number(Z) (from 1 to 94), Z=? 27

   Input Charge(Oxidation Number) of Atom = ? 3
***********
**((ION))**
***********
** Co(cobalt) ** atomic number = 27 **
** The value of the atomic charge is   3.00000
** selected atomic orbitals = 3d, 4s, 4p
        1 個のファイルをコピーしました。
C:¥DVXA¥CALC¥ionn_20080112153955
          PROGRAM RUN
    1     1 /  10,  Convergence:   0.00000,  Mixing Prarameter:   0.30000
*****************************************************
** (( Congratulations! )) SCAT has been converged! ***
***   1 cycles of SCAT were performed in the total.***
*****************************************************
        1 個のファイルをコピーしました。
        1 個のファイルをコピーしました。
```

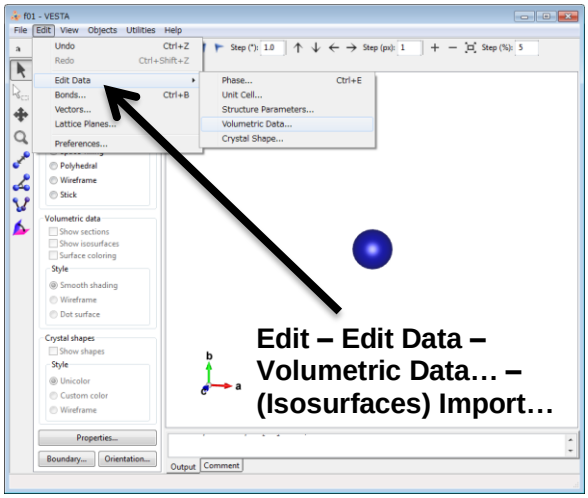
5．計算結果のエネルギー準位表(**F08E**)は左表のようになりました．この軌道名につきましては，本冊子の 142 ページから 144 ページに説明のあるように，右表のように読み換えて下さい．

	*** M.O. EIGENVALUE	(RY)	(HR)	(EV)	電子数		*** M.O. EIGENVALUE	(RY)	(HR)	(EV)	電子数
1	1+0s	-554.68681	-277.34341	-7545.69872	2.0	1	1s	-554.68681	-277.34341	-7545.69872	2.0
2	2+0s	-67.68963	-33.84482	-920.81792	2.0	2	2s	-67.68963	-33.84482	-920.81792	2.0
3	1+1p2	-59.24589	-29.62295	-805.95327	2.0	3	2p(2)	-59.24589	-29.62295	-805.95327	2.0
4	1+1p3	-59.24587	-29.62293	-805.95295	2.0	4	2p(3)	-59.24587	-29.62293	-805.95295	2.0
5	1+1p1	-59.24586	-29.62293	-805.95281	2.0	5	2p(1)	-59.24586	-29.62293	-805.95281	2.0
6	3+0s	-10.04470	-5.02235	-136.64335	2.0	6	3s	-10.04470	-5.02235	-136.64335	2.0
7	2+1p1	-7.50137	-3.75069	-102.04518	2.0	7	3p(1)	-7.50137	-3.75069	-102.04518	2.0
8	2+1p3	-7.50137	-3.75068	-102.04507	2.0	8	3p(3)	-7.50137	-3.75068	-102.04507	2.0
9	2+1p2	-7.50134	-3.75067	-102.04476	2.0	9	3p(2)	-7.50134	-3.75067	-102.04476	2.0
10	1+2d3	-3.27881	-1.63940	-44.60335	2.0	10	3d(3)	-3.27881	-1.63940	-44.60335	2.0
11	1+2d5	-3.27874	-1.63937	-44.60249	2.0	11	3d(5)	-3.27874	-1.63937	-44.60249	2.0
12	1+2d1	-3.27874	-1.63937	-44.60245	2.0	12	3d(1)	-3.27874	-1.63937	-44.60245	2.0
13	1+2d2	-3.27872	-1.63936	-44.60216	0.0	13	3d(2)	-3.27872	-1.63936	-44.60216	0.0
14	1+2d4	-3.27872	-1.63936	-44.60211	0.0	14	3d(4)	-3.27872	-1.63936	-44.60211	0.0
15	4+0s	-2.24691	-1.12346	-30.56591	0.0	15	4s	-2.24691	-1.12346	-30.56591	0.0
16	3+1p2	-1.66672	-0.83336	-22.67333	0.0	16	4p(2)	-1.66672	-0.83336	-22.67333	0.0
17	3+1p1	-1.66579	-0.83290	-22.66065	0.0	17	4p(1)	-1.66579	-0.83290	-22.66065	0.0
18	3+1p3	-1.66566	-0.83283	-22.65883	0.0	18	4p(3)	-1.66566	-0.83283	-22.65883	0.0

6．**Co**$^{3+}$の 3d 軌道，4s 軌道，4p 軌道を **VESTA** で見ていきます．



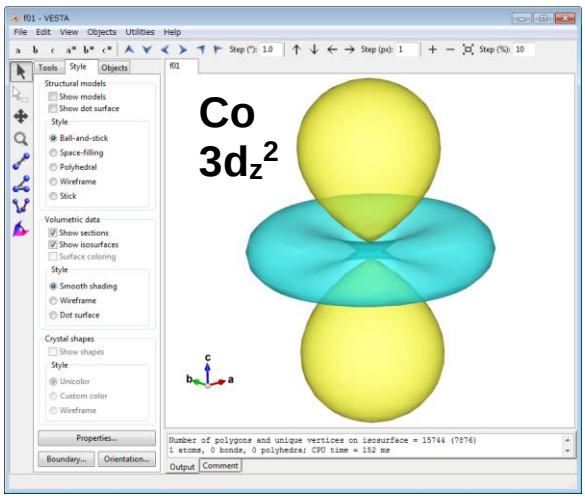




例えばコバルトの $3d_{z^2}$ 軌道を視てみましょう．ファイル名は Co3d—20.scat です．
原子球は邪魔になりますので，Structural model の ☐Show model のチェックをはずします．

Isosurfaces

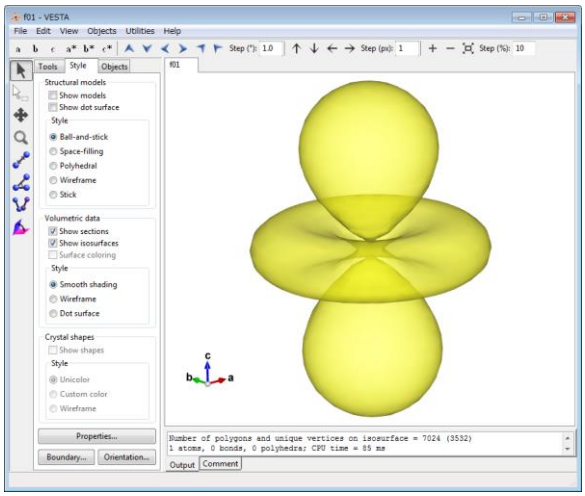
```
+1.000000E+000 C:\dvxa\calc\ionn_20130921070523\Co3d--20.scat
```



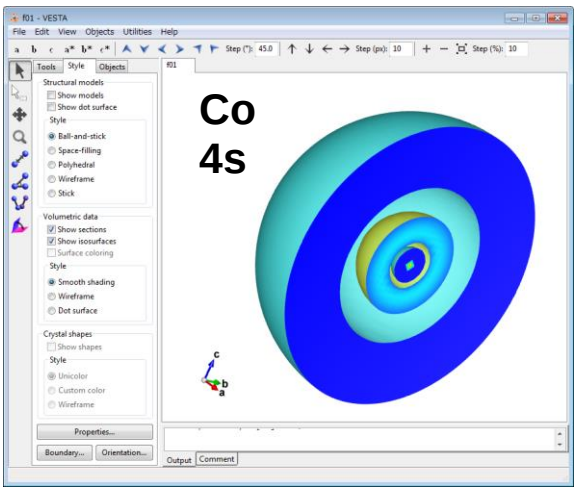
Isosurface level: $0.3a_0^{-3/2}$,
Opacity 1(0~255): 77, Opacity 2(0~255): 204

Isosurfaces

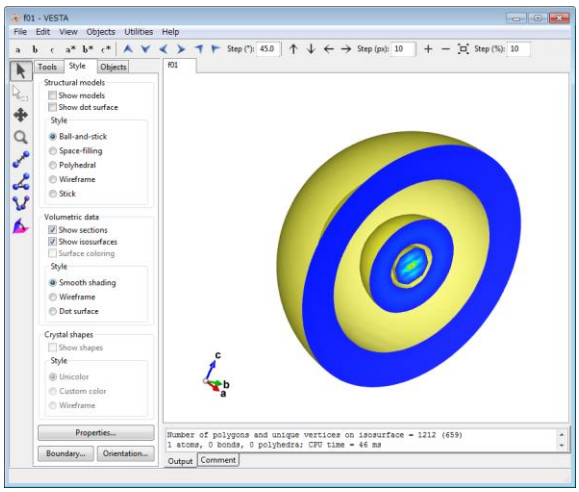
```
+1.000000E+000 C:\dvxa\calc\ionn_20130921070523\Co3d--20.scat
x+1.000000E+000 C:\dvxa\calc\ionn_20130921070523\Co3d--20.scat
```



Isosurface level: $0.1a_0^{-3}$,
Opacity 1(0~255): 77, Opacity 2(0~255): 204

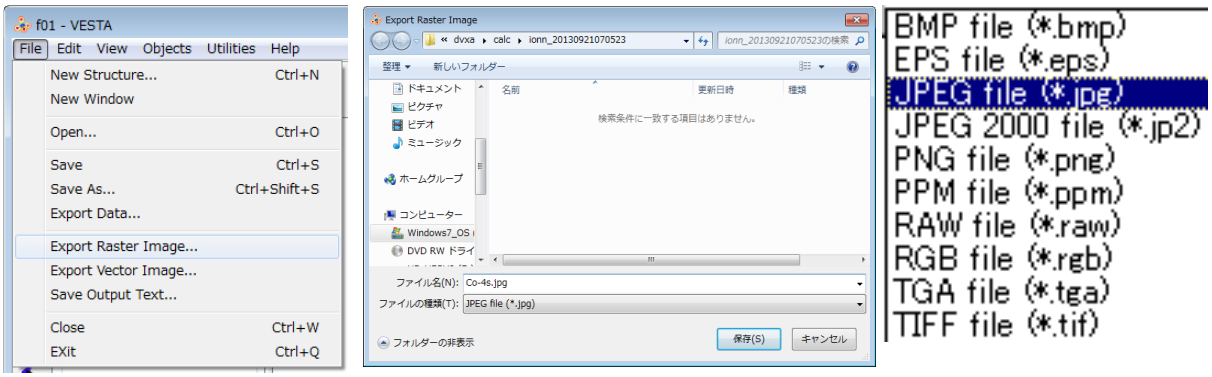


Isosurface level: $0.1a_0^{-3/2}$,
Opacity 1(0~255): 77, Opacity 2(0~255): 204

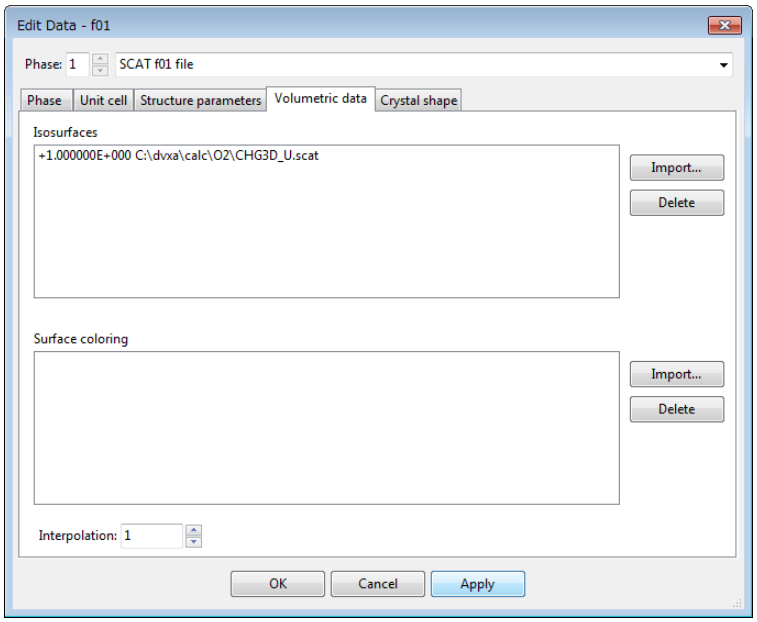


Isosurface level: $0.015a_0^{-3}$,
Opacity 1(0~255): 77, Opacity 2(0~255): 204

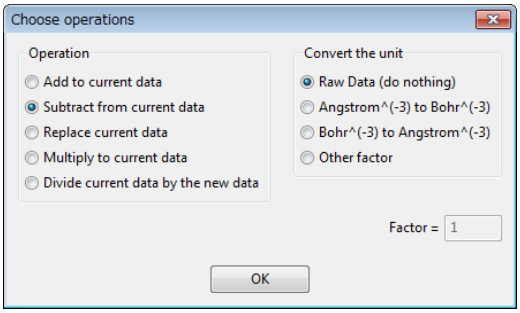
VESTA で描いた画像は File − Export Raster Image...より，いろいろな書式で保存できます．ファイル名を指定し，**[保存(S)]**ボタンをクリックすると，Export image ダイアログボックスが立ち上がり，Scale×? を訊いてきます． ? の数字が大きいほど，大きな画像が出力されます．

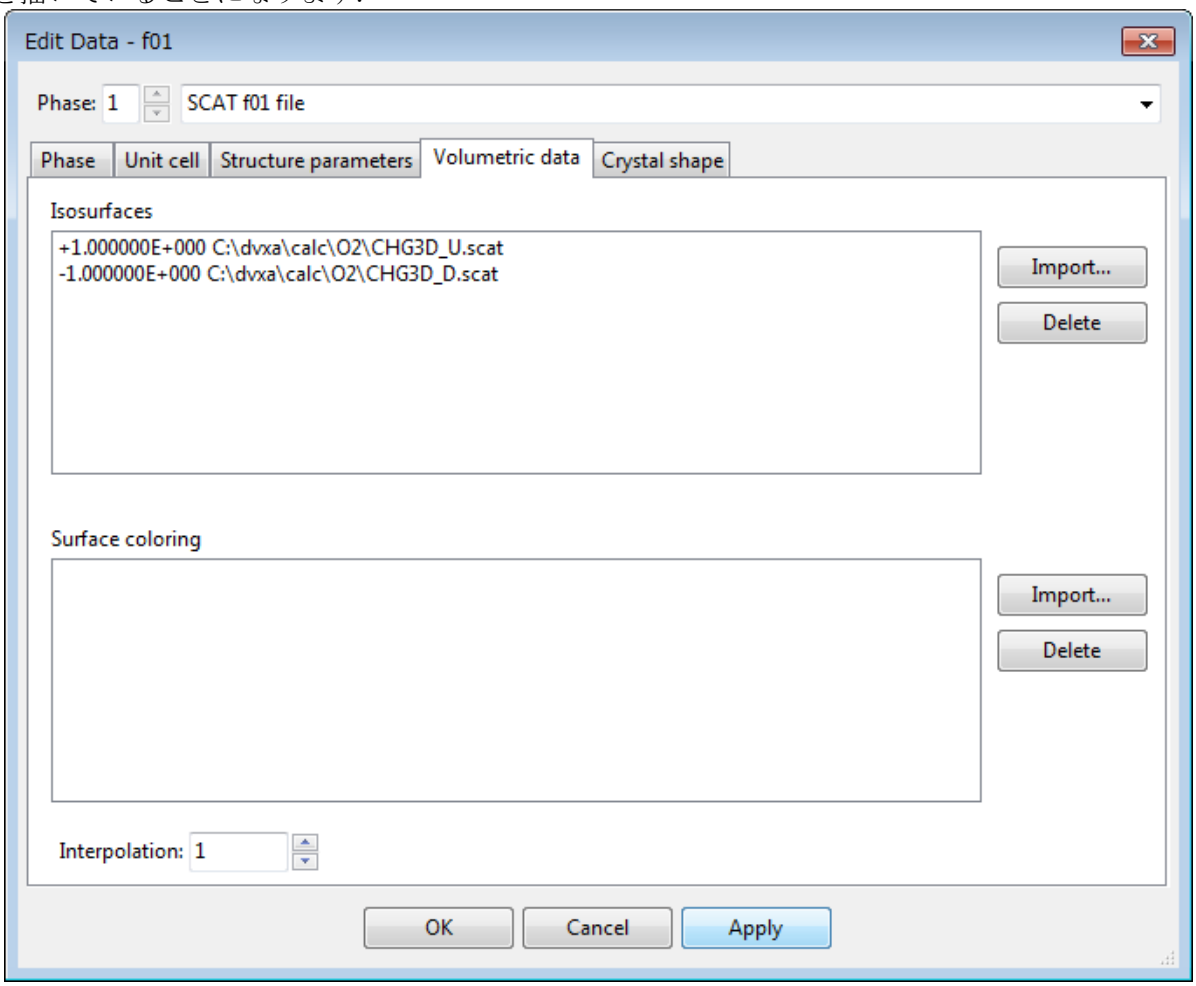


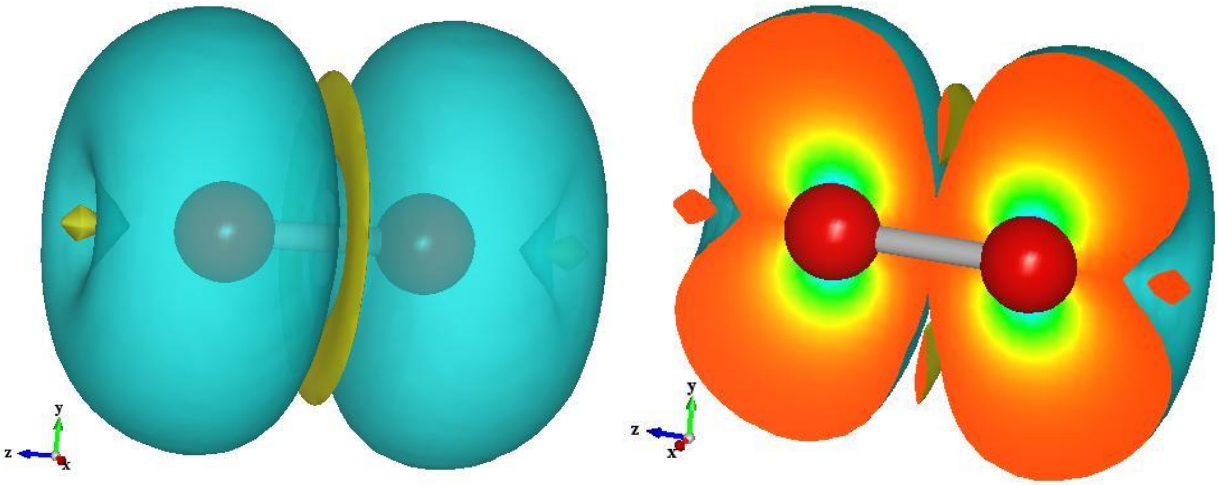
書籍「**量子材料化学入門−DV−Xα 法からのアプローチ−**」（足立裕彦著，三共出版 1991 年）の第 9 章“分子中のスピン状態”(177 頁～202 頁)に常磁性分子である O_2 の有効スピン密度の話がでてきます・・・*「スピン版の **DV−Xα** で O_2 分子を計算した場合，上向きスピンと下向きスピンの電子密度はそれぞれの電子数が異なるので当然違ってくる．もしかりに両スピンに対する波動関数が全く同じであったとしても，スピンの数が異なるので上向き，下向きの電子密度の差，すなわちスピン密度が生じる．」*・・・上向きスピン密度から下向きスピン密度の差をとったもの，それが有効スピン密度です．O_2 分子のようにスピン分極する分子については，上向きスピン密度，下向きスピン密度，有効スピン密度の三次元的な分布を調べることにより，分子の磁気的な性質を考える場合に有用となるかと思います．**VESTA**，および本文書の後半で紹介します教育用分子軌道計算システム **eduDV** を併用すれば，上向きスピン密度，下向きスピン密度，有効スピン密度も容易に三次元可視化できます（教育用分子軌道計算システム **eduDV** に同梱されている **CONTRD** のスピン版は，上向きスピンの電子密度ファイル **CHG3D_U.scat** と下向きスピンの電子密度ファイル **CHG3D_D.scat** を出力してくれます）．例えば O_2 分子の場合，**F01** を読み込んだ後，Edit − Edit Data − Volumetric Data…を開き，上半分の Isosurfaces の箇所の右側の Import…ボタンをクリックし **CHG3D_U.scat** を読み込めば上向きスピン密度 $\rho_{\uparrow}$ を三次元可視化できます．



Import ボタンで **CHG3D_U.scat** を新規で読み込み (Operation は“Add to current data”), 引き続いて Import ボタンで **CHG3D_D.scat** を読み込んだ場合 (Operation は“Subtract from current data”), Isosurfaces は以下のようになります.
すなわち, **CHG3D_U.scat** から **CHG3D_D.scat** を差し引いた値で三次元等値表面を描くことができます.
これはすなわち, 有効スピン密度 $\Delta\rho_{\uparrow} = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$ を描いていることになります.







O_2 分子の有効スピン密度 $\Delta\rho_{\uparrow} = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$（右図は断面図）

6 VENUS の license agreement について

VENUS license agreement については，下記 URL を参照して下さい．

https://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#License

https://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html

2022 年(令和 4 年)9 月 9 日(金)現在，上記各サイトには以下のように書かれております．
（内容は改訂されることもありますので，常に最新の情報をご参照下さい）

12. VENUS license agreement

In what follows, "VENUS" means a software package consisting of VICS + VEND + VESTA + PRIMA + ALBA + Alchemy.

The latest license agreement described below takes priority over any previous descriptions in user's manuals and so on. Term 12.1 should always be obeyed whatever program you may use.

Part of these terms may be changed without any prior announcement.

12.1 Use in commercial software

A contract must be settled to include (part of) VENUS in commercial software or to sell commercial software containing a graphical user interface for (part of) VENUS.

12.2 VESTA

Images produced by VESTA may be included in original and review articles provided that the following article is quoted:

- K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272-1276 (2011).

12.3 PRIMA

Whenever original results acquired with PRIMA are published in journals, proceedings, facility reports, etc. or reported in meetings with abstracts, the program name PRIMA should explicitly be credited. Furthermore, cite the following review article:

- **F. Izumi and R. A. Dilanian, "Recent Research Developments in Physics," Vol. 3, Part II, ed. by S. G. Pandalai, Transworld Research Network, Trivandrum (2002), pp. 699-726.** (ISBN 81-7895-046-4)

Only giving credit to PRIMA is good enough in the cases of abstracts, short reports, and so forth with limited spaces.

12.4 ALBA

Whenever original results acquired with ALBA are published in journals, proceedings, facility reports, etc. or reported in meetings with abstracts, the program name ALBA should explicitly be credited. Furthermore, cite the following reference:

- F. Izumi, "Spectroscopy and Diffraction III," 5th Series of Experimental Chemistry, Vol. 11, ed. by Chem. Soc. Jpn., Maruzen, Tokyo (2006), pp. 220-223. (ISBN 4-621-07310-9; in Japanese)

12.5 Alchemy

Those who are willing to use Alchemy for MEM analysis from TOF neutron powder diffraction data measured with multi-detector banks should come into contact with F. Izumi. In addition, cite the following reference when publishing results obtained with this feature of Alchemy:

- F. Izumi and Y. Kawamura, Bunseki Kagaku, **55**, 391-395 (2006). (in Japanese)

This is the world's first paper reporting the MEM analysis of TOF neutron powder diffraction data.

12.6 Warning

VENUS may still contain a fair number of bugs. VENUS is distributed in the hope that it will be useful and reliable. It is, however, provided "as is" without any warranty. Technical service concerning it is not free.

License agreement

VESTA LICENSE
Version 3
Copyright (C) 2006-2021, Koichi Momma and Fujio Izumi

This software is distributed free of charge for academic, scientific, educational, and noncommercial users. Users belonging to commercial enterprises may also use this software at no cost until a license for business users is established. Permission to use this software is hereby granted under the following conditions:

1) Drawings produced by VESTA may be used in any publications provided that its use is explicitly acknowledged. A suitable reference for VESTA is:

K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272-1276 (2011).

2) You should not redistribute any copy of the distributed files unless you have a written permission from us.

Part of these terms may be changed without any prior announcement.
This software is provided "as is" without any express or implied warranty.

バグ報告、改善要求など、ご意見をお待ちしております。
E-mail: vesta.dev(at)gmail.com

VESTAのリリースアナウンスをご希望の方は、メーリングリストに登録して下さい。

VENUS(VESTA)で得た成果を発表するときには，上記文献を必ず引用して下さい．

教育用分子軌道計算システム eduDV

大学の化学教育では初期段階で，高等学校で習った電子の惑星モデル（長岡半太郎やラザフォードの原子模型）の概念を捨て，シュレディンガー方程式を解いて得られる原子軌道関数について学びます．しかし初めて目にする記号や方程式に途惑い，その具体的なイメージを抱けずに化学に対する興味を失ってしまう学生も多いように見受けられます．

DV−$X\alpha$ 分子軌道法は，原子座標と原子番号の情報を入力するだけ(F01 の内容)で，容易に分子軌道を計算することができます．しかも三次元可視化システム VENUS を用いれば，原子軌道や分子軌道の形状，位相なども一目瞭然です．そして何といっても **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算プログラム**と**三次元可視化システム VENUS** は，教育目的であれば無償で使うことができます．

しかし **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算プログラム**を大学や高専の授業や演習（あるいは高校のクラブ活動）などで使おうとするとき，授業時間は限られていますので，以下の困難があります．

・CP/M−86 や MS−DOS など，**Character-based User Interface(CUI)**の OS でパソコンを使っていた世代とは異なり，現在の学生は，最初に触れたパソコンからすでに Windows など **Graphical User Interface(GUI)**を実装した OS であった世代である．インターネットのWWWブラウザ，ワープロ・表計算ソフト，プレゼンテーションソフトなどは高等学校「情報」の授業および大学での「パソコン入門」系の講義で簡単な操作法は修得しているものの，化学系の学生では unix を扱うこともなく，プログラミングの経験もほとんどない．**CUI** でコンピュータを操作したという経験がほとんど無いため，簡単な MS−DOS コマンドはもとより，ファイル（テキストファイル，バイナリファイル）やディレクトリ（フォルダ）のツリー構造などの概念が構築されていない学生が多い．Fortran も学んだことがないためファイルの入出力，実数型や整数型の書式，ファイルの種類（テキスト，バイナリ），装置番号というような概念がない．しかし書籍“はじめての電子状態計算”の添付 CD−ROM に収録されている **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算プログラムの計算環境**は，Windows のコマンドプロンプトで作業していく **CUI** をベースとしたシステムであり，計算作業ディレクトリを作成したりファイルをコピーしたりなどの必要最低限の MS−DOS コマンドは修得している必要がある．また **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算プログラム**本体は Fortran77 で書かれているため，その入力ファイルをエディタ等で準備するにあたっては，必要最低限の Fortran の書式の概念（実数型・整数型・指数型・文字型変数記述子など）も必要である．これらを授業の中で最初から説明していると，それだけで数時間を要し，情報リテラシーの授業になってしまう（それはそれで意味のある教育ではあるが）．

・F01 を作成するのに，直線型の窒素分子，一酸化炭素分子，二酸化炭素分子程度ならまだしも，水分子やアンモニア分子やメタン分子となってくると，その座標を求めるだけでかなりの時間を要する．例えば三角関数に習熟していない学生が多い場合，まるで数学の幾何の授業のようになってしまう（それはそれで重要な教育ではあるが）．パソコン画面上で三次元的に分子の棒球モデルを表示することで分子を構築して座標を自動出力するなら問題ないであろうが，紙と鉛筆だけで三次元的な分子の座標を自分で算出することが難しい学生は多い．

・無機化学や量子化学などの教科書に掲載されている小分子や単核錯体の分子軌道エネルギー準位図には，その分子・錯体の対称性（属する点群）に基づく分子軌道の名称がついている．学生に指標表の重要性を実感させるためにも，縮退するはずの分子軌道はきちんと縮退させるためにも，正しい対称軌道(F25)を入れて **DV−$X\alpha$ 分子軌道計算**を行いたいが，**DV−$X\alpha$** 用の対称軌道作成プログラム **symOrb**（「はじめての電子状態計算」添付 CD−ROM に同梱）を動かすためには Mathematica が必要である．しかし Mathematica は高価であり，学校現場のパソコンにはインストールされていないことが多い（化学系研究室でも持っていないことが多い）．

そこで岡山理科大学の坂根が中心となり，**DV−$X\alpha$ 研究協会**の SPD(戦略的プログラム開発推進)部会(**https://www.dvxa.org/spd/index.html**)での議論を通して，DV−$X\alpha$ 分子軌道法および三次元可視化システム **VENUS** を活用し，学生が自らパソコンで波動関数のイメージを容易に構築することのできる教育システム，教員側にとっては，限られた授業時間内で容易に，参加している学生全員がフォローできるような，教育現場で気楽に使える分子軌道計算システムを考案・作成しました（**https://www.dvxa.org/hme/fun/**）．その概略は以下の通りです．

・学生が，計算しようとする分子の対称性（形状）を見て，使うシステム名を選択する．
2024 年 3 月 25 日(月)現在，用意できているシステムは以下の 22 種類 ＋Auto-eduDV である．
1.～20.のシステムにはそれぞれノンスピン全自動版，スピン全自動版，手動版の 3 種類が用意されている．21.～22. はノンスピン版全自動版と手動版の 2 種類が用意されている．すなわち全体では (20×3) + (2×2) = 64 種類の教育用分子軌道計算システムが用意されている．

1. 等核二原子分子，**A_2** 型分子(**$D_{\infty h}$** 対称) 例：窒素(**N_2**)，酸素(**O_2**)，塩素(**Cl_2**)
2. 異核二原子分子，**AB** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称) 例：一酸化炭素(**CO**)，塩化水素(**HCl**)
3. 直線 **AB_2**(**B-A-B**)型分子(**$D_{\infty h}$** 対称) 例：二酸化炭素(**CO_2**)，二硫化炭素(**CS_2**)
4. 直線 **A_2B_2**(**B-A-A-B**)型分子(**$D_{\infty h}$** 対称) 例：アセチレン(**H−C≡C−H**)
5. 直線 **ABC** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称) 例：シアン化水素(**HCN**)
6. 直線 **ABCD** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称) 例：雷酸(**HCNO**)，星間分子等
7. 折れ線 **AB_2** 型分子(**C_{2v}** 対称) 例：水(**H_2O**)，硫化水素(**H_2S**)，オゾン(**O_3**)
8. 三角錐 **AB_3** 型分子(**C_{3v}** 対称) 例：アンモニア(**NH_3**)，ホスフィン(**PH_3**)
9. エチレン型(**A_2B_4** 型)分子(**D_{2h}** 対称) 例：エチレン(**C_2H_4**)，四酸化二窒素(**N_2O_4**)
10. エタン型(**A_2B_6** 型)分子(**D_{3d}** 対称) 例：エタン(**C_2H_6**)，ヘキサフルオロエタン(**C_2F_6**)
11. 平面正三角 **AB_3** 型分子(**D_{3h}** 対称) 例：三フッ化ホウ素(**BF_3**)
12. 平面正方形 **AB_4** 型錯イオン(**D_{4h}** 対称) 例：テトラクロリド白金(II)酸イオン(**$[PtCl_4]^{2-}$**)
13. 平面正六角形 **A_6B_6** 型分子(**D_{6h}** 対称) 例：ベンゼン(**C_6H_6**)
14. 正四面体 **AB_4** 型分子(**T_d** 対称) 例：メタン(**CH_4**)，四塩化炭素(**CCl_4**)
15. 正八面体 **AB_6** 型分子(**O_h** 対称) 例：六フッ化硫黄(**SF_6**)，六フッ化ウラン(**UF_6**)
16. 正四面体 **$A(BC)_4$** 型分子(**T_d** 対称) 例：テトラカルボニルニッケル錯体(**$[Ni(CO)_4]$**)
17. 正八面体 **$A(BC)_6$** 型分子(**O_h** 対称) 例：ヘキサカルボニルクロム錯体(**$[Cr(CO)_6]$**)
18. **$M(H_2O)_6$** 型アクア錯イオン(**D_{2h}** 対称) 例：ヘキサアクアコバルト(II)イオン(**$[Co(H_2O)_6]^{2+}$**)
19. 正四面体 **ML_4** 型錯イオン(**T_d** 対称) 例：テトラクロリドコバルト(II)酸イオン(**$[CoCl_4]^{2-}$**)
20. 正八面体 **ML_6** 型錯イオン(**O_h** 対称) 例：ヘキサフルオリドコバルト(III)酸イオン(**$[CoF_6]^{3-}$**)
21. 単原子(対称軌道を使用しない) 例：周期表の水素からプルトニウムまで
22. 単原子イオン(対称軌道を使用しない) 例：三価のコバルト単原子イオン(**Co^{3+}**)

・システムを起動すれば，必要最低限の情報（原子番号や原子間距離，角度，酸化数）を会話形式で入力していくだけで，全自動で F01 が作成される（学生は新規にファイルを作成・編集する必要がない）．F01 を編集する必要もないので，学生は F01 の存在を意識する必要もない．

・予め symOrb で作成しておいた対称軌道ファイル(F25)がシステムに内蔵されているので，自動的に F25 を使用した **DV−Xα 計算**が実行される．学生は F25 の存在を意識する必要がない．

・全自動で F05 が作成(makef05scfs または makef05)され，収束するまで SCAT 計算が繰り返される．10 サイクルごとに「まだ収束していない」旨表示し，収束するまで SCAT 計算が繰り返される．収束た時点で自動的に SCAT 計算は終了される（収束までに要したサイクル数を表示）．

・SCAT 計算終了後，各分子軌道についてポピュレーション解析を行う POPANL，さらに磁気量子数まで区別した原子軌道の割合，および原子軌道間の共有結合性を示す Overlap Population も求める POPANLS，有効電荷（Net Charge）を求める NETC，有効共有結合電荷(Bond Overlap Population)を求める BNDODR，エネルギー準位図を作成する MAKEL04＋LVLSHM，などが全自動で実行される．さらに F08E に出力されているエネルギー準位のうち，HOMO と LUMO のエネルギー差などを計算して eV 単位を波数の cm^{-1} や波長の nm に単位変換して出力する一連のプログラム HLGAP, HLGAPS, PRESTS も全自動で実行される（例えば“槌田龍太郎の分光化学系列”を **DV−Xα 分子軌道計算**で検証する際などに便利）．

・さらに水野正隆氏が開発した CONTRDALL が自動実行される．CONTRDALL はすべての分子軌道の*.sca ファイルを全自動で作成してくれる．しかも F08E に書かれている分子軌道の名称がそのまま*.sca のベースネームとなるので，学生の混乱もない．すぐにそのまま VENUS(VEND や VESTA)を起動し，HOMO や LUMO など好きな分子軌道や，静電ポテンシャルマップ，HOMO マップ，LUMO マップなどを描くことができる．スピン版のシステムの場合は，磁性の議論に重要な，上向きスピン密度($\rho_{\uparrow}$)，下向きスピン密度($\rho_{\downarrow}$)，有効スピン密度（$\Delta\rho_{\uparrow} = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$）なども容易に三次元可視化できる（VESTA を使用した場合）．

・平成 19 年 5 月 31 日(木)(令和 2 年 12 月 18 日(金)に最新版がリリース)に泉富士夫氏のサイト
https://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance_environment
にて正式リリース（一般公開）された**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**に eduDV は完全に組み込まれているので，コマンドプロンプト画面を起動することなくタブエディタ（秀丸エディタ）上で全ての操作を行うことができる．もちろん従来通りにコマンドプロンプトを起動して使う **DV−Xα 計算環境**でも eduDV は使うことはできるが，特に MS−DOS や Linux など **Character-based User Interface(CUI)** での計算機操作に習熟している方以外は，**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**での使用をお勧めする．教育用分子軌道計算システム eduDV は本来，計算機操作や量子化学計算に不慣れな高等学校の生徒さん，大学・大学院の学生さん向けに開発したシステムであり，また先生方には授業，実習，演習，講義，講習会など限られた時間内に大勢で分子軌道計算を行うときに便利なように，といった思想で開発したシステムでもある．ゆえに**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**が公開された現在，教育用分子軌道計算システム eduDV は**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**で使ってこそ，その本領を発揮すると言っても過言ではない．

・平成 25 年 10 月 17 日(木)，eduDV にデータ自動入力（Auto-eduDV）機能が組み込まれた．Auto-eduDV については本冊子 150 ページからの解説を参照されたし．

1. 教育用分子軌道計算システム eduDV のインストールの仕方

教育用分子軌道計算システム eduDV は岡山理科大学の坂根のウェブサイト

https://www.dvxa.org/hme/fun/index.html#edudv

で一般公開されております（プログラムをダウンロードすることができます）.

eduDV には **DV−Xα分子軌道計算プログラム**一式や**三次元可視化システム VENUS** は含まれておりません．書籍「はじめての電子状態計算　**■DV−Xα分子軌道計算への入門■**」添付 CD−ROM の環境に **eduDV** を追加することにより分子軌道計算が行えるようになります.

※2007 年 7 月 7 日(土)より，CD−ROM 環境は不要になりました（本冊子 5 ページ参照）.

必要なプログラム類はすべてインターネット経由でダウンロード入手できます.

タブエディタ（秀丸エディタ）上に構築された**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**（秀丸エディタマクロ集）は泉富士夫先生のサイト“泉 富士夫の粉末回折情報館”より移動した

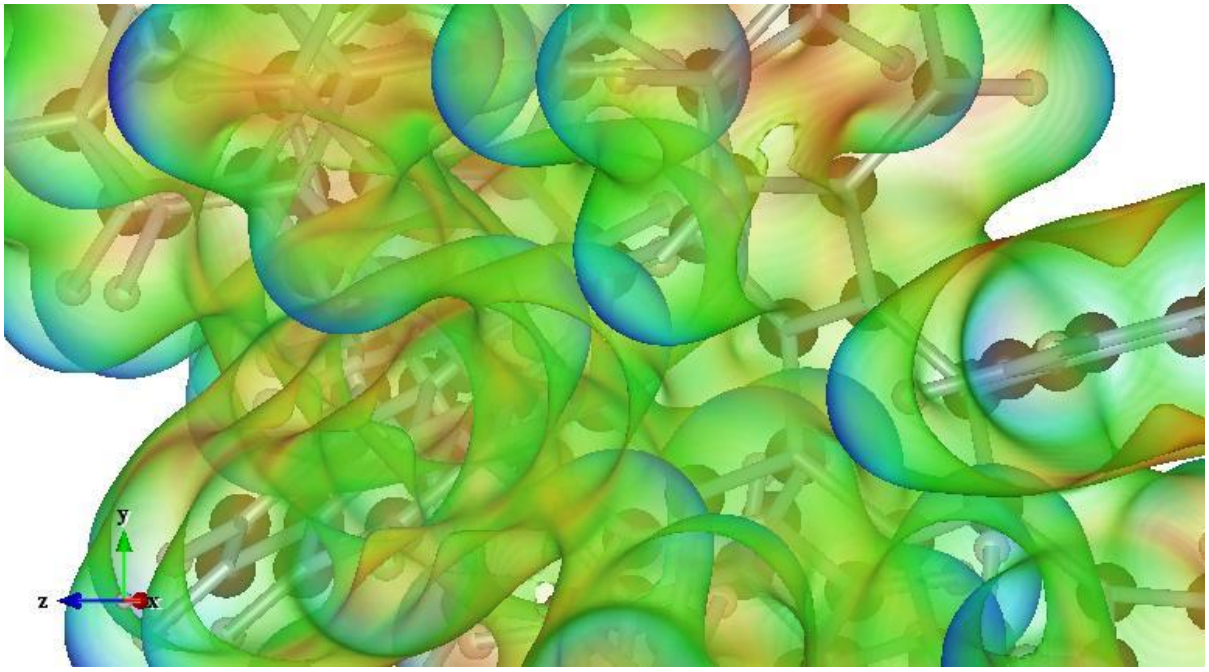
https://www.dvxa.org/hme/dvxa_assistance_environment_7.html

からダウンロードしていただけます. この**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**をインストールすれば, **eduDV** のすべての機能は秀丸エディタ上で操作できるようになります.

Windows 95, 98, NT, 2000 における **eduDV** のインストールの仕方については，以下の URL に詳しく解説してあります.

https://www.dvxa.org/hme/fun/start/start.html

Windows XP, Vista, 7, 8, 8.1, 10, 11 における **eduDV**（秀丸エディタ，支援環境, eduDV, VESTA 等）のインストールの仕方については，本冊子の 4〜12 ページをご覧下さい.

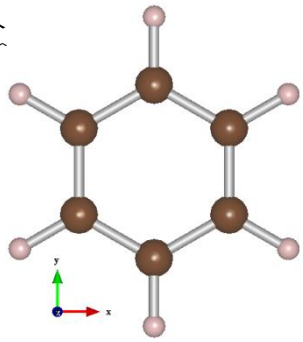


2. 教育用分子軌道計算システム eduDV の使い方

作業手順は，きわめて簡単です．以下，ベンゼン分子をノンスピン版で計算する場合を例にとります．ただし **DV−Xα** では構造の最適化は行いませんので，計算しようとする分子の必要最低限の原子間距離・角度の情報は予めデータ集等で調べておく必要があります．教科書等で登場する代表的な（有名な）分子の原子間距離・角度のデータは本利用の手引きに掲載してあります（**https://www.dvxa.org/hme/fun/index.html#edudv** の「システム名」をクリックしても同様のデータが表示されますので，授業などでご活用下さい）．

なお，平成 25 年 10 月 17 日に公開されたデータ自動入力（**Auto-eduDV**）機能を実装した **eduDV** には，単原子（ノンスピン版）94 種類，単原子イオン（ノンスピン版）248 種類，分子またはイオン（ノンスピン版およびスピン版）274 種類，合計 616 種類のデータ（原子番号，酸化数，原子間距離・角度など）が内蔵されており，**Auto-eduDV** 機能を呼び出せば単原子，単原子イオン，分子，イオンをメニューから選択するだけで **DV−Xα** 法による電子状態計算結果が得られます．

秀丸エディタ・**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**がまだ構築されていない場合



1. dvxa 計算環境（コマンドプロンプト）を起動します．

2. ベンゼンを計算するディレクトリを作成，そこに移動します．

```
C:¥DVXA> cd calc ↵
C:¥DVXA¥calc> md c6h6 ↵
C:¥DVXA¥calc> cd c6h6 ↵
```

3. 平面正六角形 A_6B_6 型分子(D_{6h} 対称)を計算するシステム“d6h66n”を起動します．

```
C:¥DVXA¥calc¥c6h6> d6h66n ↵
```

4. 会話式で原子番号(炭素 ＝6，水素 ＝1)，および原子間距離(C−C, C−H)を入力する．

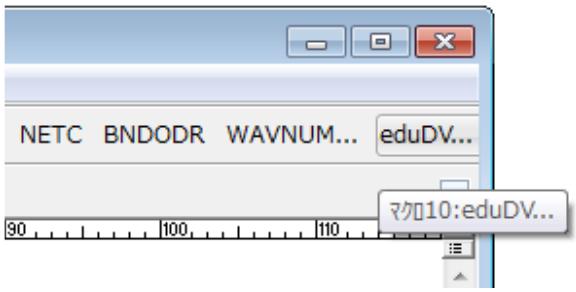
```
Input Atomic Number(Z) (1< Z <94) of Inner Atom A, Z= ?   6 ↵
Input Atomic Number(Z) (1< Z <94) of Terminal Atom B, Z= ?   1 ↵
Input Distance(angstrom), A – A = ?   1.399 ↵
Input Distance(angstrom), A – B = ?   1.101 ↵
```

5. あとは全自動ですべて実行されます．パソコンの機種にもよりますが，2〜3 分ですべての計算が終了するかと思います．※MS-DOS コマンドでは大文字小文字の区別はありません．大文字で入力しても小文字で入力しても同じことです（d6h66n でも D6H66N でも同じ）．

秀丸エディタ・**ＤＶ−Ｘα法計算支援環境**が構築されている場合

1. 秀丸エディタを起動します．

2. 右上の【eduDV…】ボタンをクリックします．

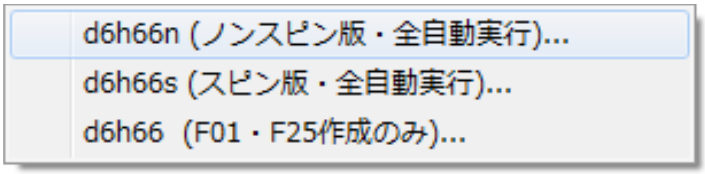


プルダウンメニューの中から,

13. D6h 対称【平面正六角形型分子】A6B6 型分子（ベンゼンなど）...

をクリックします．すると右図のように
プルダウンメニューで

d6h66n(ノンスピン版・全自動実行)
d6h66s(スピン版・全自動実行)
d6h66(F01・F25 作成のみ)



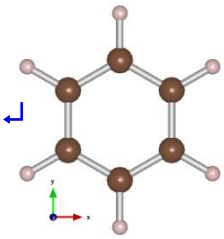
を訊いてきますので,

d6h66n(ノンスピン版・全自動実行)...

をクリックして下さい.

3. コマンドプロンプト画面が立ち上がりますので，会話式で原子番号(炭素 = 6，水素 = 1)，および原子間距離(C−C, C−H)を入力して下さい.

Input Atomic Number(Z) (1< Z <94) of Inner Atom A, Z= ? 6 ↵
Input Atomic Number(Z) (1< Z <94) of Terminal Atom B, Z= ? 1 ↵
Input Distance(angstrom), A – A = ? 1.399 ↵
Input Distance(angstrom), A – B = ? 1.101 ↵



4. あとは全自動ですべて実行されます. 機種にもよりますが, 数分ですべての計算が終了します.

5. **F08E** のタブをクリックして，計算結果（分子軌道のエネルギー準位表）を確認して下さい.

6. **F01** のタブをクリックしてから **VESTA** ボタンをクリックし，HOMO や LUMO などや，静電ポテンシャルマップ，HOMO マップ，LUMO マップなどを三次元可視化してみましょう.

eduDV でベンゼン分子の **DV−Xα 分子軌道計算**を行って，三次元可視化システム **VENUS**（**VICS** および **VEND**）で全分子軌道を三次元可視化した結果を坂根のウェブサイトで紹介しておりますのでご参照下さい.

https://www.dvxa.org/hme/fun/e90/c6h6/c6h6.html

ベンゼンの計算に用いた **d6h66n** 以外にも，全部で 22 種類（ノンスピン版，スピン版，手動版の区別がありますので，その区別を含めれば 64 種類）のシステムがあります．詳しくは先に紹介した **https://www.dvxa.org/hme/fun/index.html#edudv** をご参照下さい.

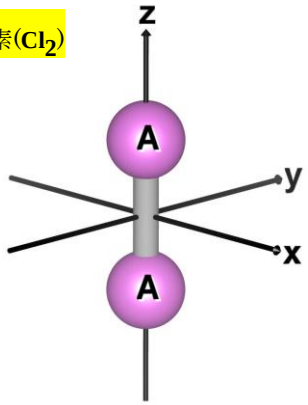
以下の 22 種類のシステム紹介の中で示されている表中の原子間距離・角度は，特に引用のない限りは, 化学便覧 基礎編 改訂 5 版(丸善)に掲載されている値です. **Auto-eduDV** 機能実装版 **eduDV** に登録してある値も同様です．**Auto-eduDV** 機能に登録されていない分子やイオン，あるいは登録のある分子やイオンでも，原子間距離・角度などの値を変えて計算したい場合は，**Auto-eduDV** 機能を使わずに，会話式で必要な値をキーボード入力して下さい.

①．システム名： **A2N**（ノンスピン版） または **D8H2N**（ノンスピン版） **A2S**（スピン版） または **D8H2S**（スピン版）

→ 等核二原子分子，**A_2** 型分子(**$D_{\infty h}$** 対称) 例：窒素(**N_2**)，酸素(**O_2**)，塩素(**Cl_2**)

入力する情報： ①：A の原子番号
②：A−A の結合距離(Å)

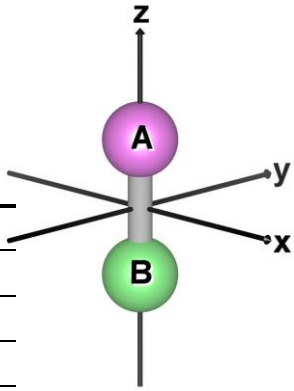
No.	A_2	A	A−A
1	H_2	1	0.7414
2	N_2	7	1.0977
3	O_2	8	1.2075
4	F_2	9	1.4119
5	Cl_2	17	1.9878
6	Br_2	35	2.2811
7	I_2	53	2.6663



②．システム名： **ABN**（ノンスピン版） または **C8V11N**（ノンスピン版） **ABS**（スピン版） または **C8V11S**（スピン版）

→ 異核二原子分子，**AB** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称) 例：一酸化炭素(**CO**)，塩化水素(**HCl**)

入力する情報：　①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)

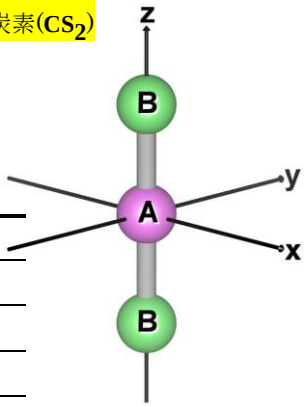


No.	AB	A	B	A−B
1	HF	1	9	0.9169
2	HCl	1	17	1.2746
3	HBr	1	35	1.4145
4	HI	1	53	1.6090
5	CO	6	8	1.1282
6	NO	7	8	1.1508

③．システム名：　**AB2N**（ノンスピン版）　**AB2S**（スピン版）
または　または
D8H12N（ノンスピン版）　**D8H12S**（スピン版）

→ 直線 **AB_2(B−A−B)**型分子(**$D_{\infty h}$** 対称)　例：二酸化炭素(**CO_2**)，二硫化炭素(**CS_2**)

入力する情報：　①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)

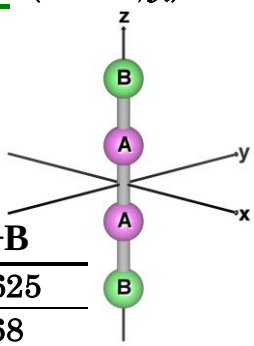


No.	AB_2	A	B	A−B
1	CO_2	6	8	1.1600
2	CS_2	6	16	1.5525
3	KrF_2	36	9	1.8769
4	XeF_2	54	9	1.9744
5	$HgCl_2$	80	17	2.252

④．システム名：　**A2B2N**（ノンスピン版）　**A2B2S**（スピン版）
または　または
D8H22N（ノンスピン版）　**D8H22S**（スピン版）

→ 直線 **A_2B_2(B−A−A−B)**型分子(**$D_{\infty h}$** 対称)例：アセチレン(**H−C≡C−H**)

入力する情報：　①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−A の結合距離(Å)
④：A−B の結合距離(Å)

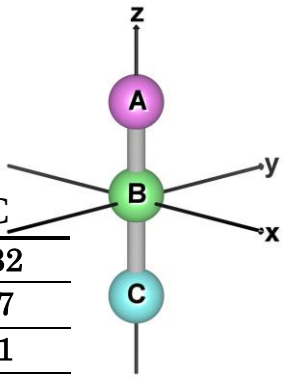


No.	A_2B_2	A	B	A−A	A−B
1	C_2H_2	6	1	1.2024	1.0625
2	Hg_2I_2	80	53	2.69	2.68

⑤．システム名：　**ABCN**（ノンスピン版）　**ABCS**（スピン版）
または　または
C8V111N（ノンスピン版）　**C8V111S**（スピン版）

→ 直線 **ABC** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称)　例：シアン化水素(**HCN**)

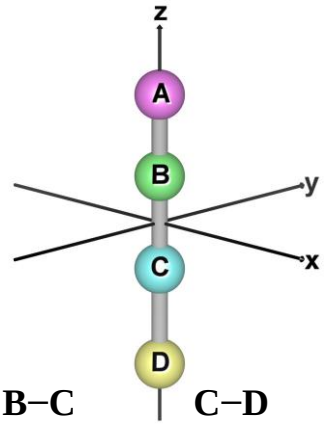
入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：C の原子番号
④：A−B の結合距離(Å)
⑤：B−C の結合距離(Å)



No.	ABC	A	B	C	A−B	B−C
1	HCN	1	6	7	1.0650	1.1532
2	FCN	9	6	7	1.264	1.157
3	ClCN	17	6	7	1.629	1.161
4	BrCN	35	6	7	1.787	1.160

⑥．システム名： **ABCDN**（ノンスピン版） **ABCDS**（スピン版）
または　　または
C8V1111N（ノンスピン版） **C8V1111S**（スピン版）

→ 直線 **ABCD** 型分子(**$C_{\infty v}$** 対称)

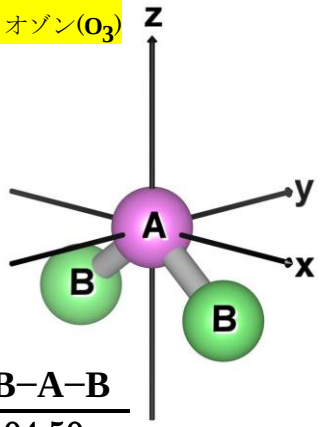


入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：C の原子番号
④：D の原子番号
⑤：A−B の結合距離(Å)
⑥：B−C の結合距離(Å)
⑦：C−D の結合距離(Å)

No.	ABC	A	B	C	D	A−B	B−C	C−D
1	HCNO	1	6	7	8	1.027	1.168	1.199

⑦．システム名： **C2V12N**（ノンスピン版） **C2V12S**（スピン版）

→ 折れ線 **AB_2** 型分子(**C_{2v}** 対称)　例：水(**H_2O**)，硫化水素(**H_2S**)，オゾン(**O_3**)



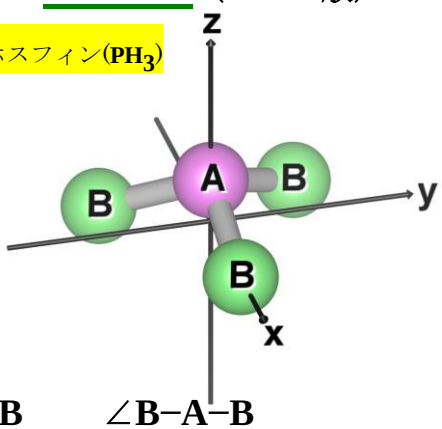
入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)
④：B−A−B の角度(°)

No.	AB_2	A	B	A−B	∠B−A−B
1	H_2O	8	1	0.9579	104.50
2	H_2S	16	1	1.3366	87.77
3	O_3	8	8	1.2716	117.79
4	SO_2	16	8	1.4308	119.33
5	NO_2	7	8	1.1946	133.85
6	SF_2	16	9	1.5875	98.05
7	SCl_2	16	17	2.015	102.7

8	ClO_2	17	8	1.4698	117.40
9	Cl_2O	8	17	1.6959	110.89
10	$GeCl_2$	32	17	2.183	100.3
11	GeF_2	32	9	1.7321	97.15
12	OF_2	8	9	1.4052	103.07
13	SeO_2	34	9	1.6076	113.83
14	SiF_2	14	9	1.590	100.8

⑧. システム名： C3V13N（ノンスピン版） C3V13S（スピン版）

→ 三角錐 **AB_3** 型分子(**C_{3v}** 対称)　例：アンモニア(**NH_3**), ホスフィン(**PH_3**)

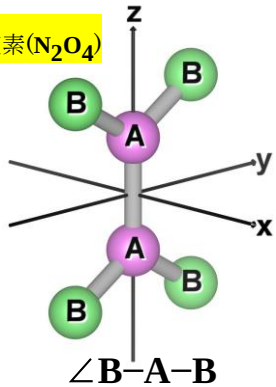


入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)
④：B−A−B の角度(°)

No.	AB_3	A	B	A−B	∠B−A−B
1	NH_3	7	1	1.012	106.7
2	PH_3	15	1	1.561	97.7
3	AsH_3	33	1	1.513	92.1
4	SbH_3	51	1	1.704	91.6
5	NF_3	7	9	1.365	102.4
6	PF_3	15	9	1.561	97.7
7	AsF_3	33	9	1.710	96.0
8	NCl_3	7	17	1.759	107.1
9	PCl_3	15	17	2.039	100.8
10	$AsCl_3$	33	17	2.166	98.6
11	$SbCl_3$	51	17	2.323	97.1
12	$BiCl_3$	83	17	2.424	97.5
13	PBr_3	15	35	2.216	101.0
14	$AsBr_3$	33	35	2.324	99.6
15	$BiBr_3$	83	35	2.63	90
16	AsI_3	33	53	2.557	100.2
17	PrI_3	59	53	2.901	114
18	GdI_3	64	53	2.840	116
19	$LuCl_3$	71	17	2.417	115

⑨. システム名： D2H24N（ノンスピン版） D2H24S（スピン版）

→ エチレン型(A_2B_4 型)分子(D_{2h} 対称)　例：エチレン(C_2H_4)，四酸化二窒素(N_2O_4)

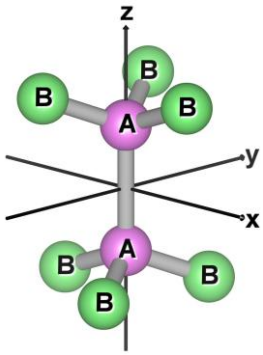


入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−A の結合距離(Å)
④：A−B の結合距離(Å)
⑤：B−A−B の角度(°)

No.	A_2B_4	A	B	A−A	A−B	∠B−A−B
1	C_2H_4	6	1	1.339	1.087	117.4
2	C_2F_4	6	9	1.31	1.319	112.4
3	C_2Cl_4	6	17	1.354	1.718	115.7
4	N_2O_4(気相)	7	8	1.782	1.190	135.4
5	N_2O_4(固相)	7	8	1.64	1.17	108

⑩. システム名： D3D26N（ノンスピン版） D3D26S（スピン版）

→ エタン型(ねじれ型)(A_2B_6 型)分子(D_{3d} 対称)　例：エタン(C_2H_6)，ヘキサフルオロエタン(C_2F_6)

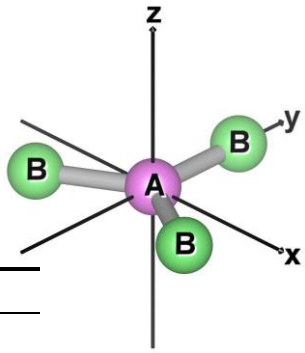


入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−A の結合距離(Å)
④：A−B の結合距離(Å)
⑤：A−A−B の角度(°)

No.	A_2B_6	A	B	A−A	A−B	∠A−A−B
1	C_2H_6	6	1	1.5351	1.0940	111.17
2	C_2F_6	6	9	1.545	1.326	109.8

⑪. システム名： D3H13N（ノンスピン版） D3H13S（スピン版）

→ 平面正三角 AB_3 型分子(D_{3h} 対称)　例：三フッ化ホウ素(BF_3)



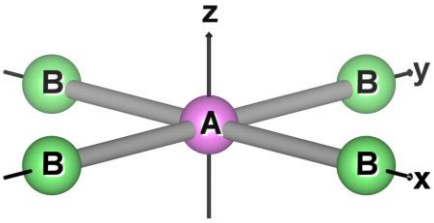
入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)

No.	AB_3	A	B	A−B
1	BF_3	5	9	1.3070
2	BCl_3	5	17	1.742
3	BBr_3	5	35	1.893
4	BI_3	5	53	2.118

⑫. システム名： D4H14N（ノンスピン版） D4H14S（スピン版）

→ 平面正方形$[AB_4]^{n+/n-}$型錯イオン(D_{4h} 対称) 例：テトラクロリド白金(II)酸イオン($[PtCl_4]^{2-}$)

入力する情報：
①：A の原子番号
②：A の酸化数（形式電荷）
③：B の原子番号
④：B の酸化数（形式電荷）
⑤：A−B の結合距離(Å)



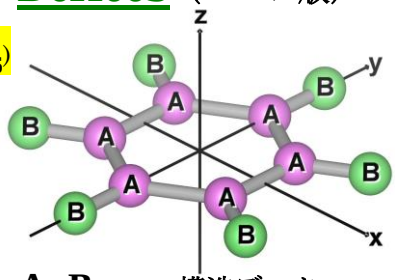
No.	$AB_4^{n+/n-}$	A	A の酸化数	B	B の酸化数	A−B	構造データ
1	$[PtCl_4]^{2-}$	78	2	17	−1	2.308	
2	$[PdCl_4]^{2-}$	46	2	17	−1	2.318	
3	$[AuCl_4]^{-}$	79	3	17	−1	2.282	文献 1

文献 1) A.V.Polishchuk, E.T.Karaseva, M.A.Pushilin (2009) *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct.Rep.Online*, **65**, m1377.

⑬. システム名： D6H66N（ノンスピン版） D6H66S（スピン版）

→ 平面正六角形 A_6B_6 型分子(D_{6h} 対称) 例：ベンゼン(C_6H_6)

入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−A の結合距離(Å)
④：A−B の結合距離(Å)



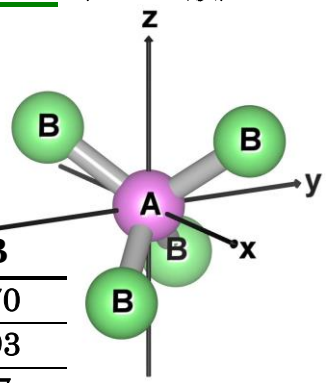
No.	A_6B_6	A	B	A−A	A−B	構造データ
1	C_6H_6	6	1	1.399	1.101	
2	C_6F_6	6	9	1.378	1.334	文献 1
3	C_6Cl_6	6	17	1.402	1.713	文献 2
4	C_6Br_6	6	35	1.400	1.881	文献 3
5	C_6I_6	6	53	1.399	2.109	文献 4

文献 1) H.Shorafa, D.Mollenhauer, B.Paulus, K.Seppelt (2009) *Angew. Chem., Int. Ed.*,**48**, 5845.
文献 2) Thai Thanh Thu Bui, S.Dahaoui, C.Lecomte, G.R.Desiraju, E.Espinosa (2009) *Angew. Chem., Int. Ed.*, **48**, 3838.
文献 3) C.M.Reddy, M.T.Kirchner, R.C.Gundakaram, K.A.Padmanabhan, G.R.Desiraju (2006) *Chem.-Eur.J.*,**12**, 2222.
文献 4) S.Ghosh, C.M.Reddy, G.R.Desiraju (2007) *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online*, **63**, o910.

⑭. システム名： TD14N（ノンスピン版） TD14S（スピン版）

→ 正四面体 AB_4 型分子(T_d 対称) 例：メタン(CH_4)，四塩化炭素(CCl_4)

入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)



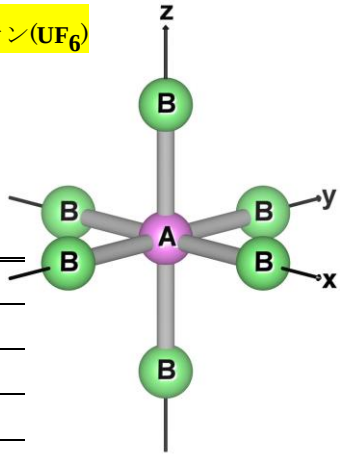
No.	AB_4	A	B	A−B
1	CH_4	6	1	1.0870
2	CF_4	6	9	1.3193
3	CCl_4	6	17	1.767
4	CBr_4	6	35	1.942

5	SiH_4	14	1	1.4707
6	SiF_4	14	9	1.5540
7	$SiCl_4$	14	17	2.019
8	$TiCl_4$	22	17	2.170
9	$TiBr_4$	22	35	2.339
10	VCl_4	23	17	2.138
11	GeH_4	32	1	1.5143
12	$GeCl_4$	32	17	2.113
13	$GeBr_4$	32	35	2.272
14	ZrF_4	40	9	1.90
15	$ZrCl_4$	40	17	2.328
16	RuO_4	44	8	1.706
17	SnH_4	50	1	1.6909
18	$SnCl_4$	50	17	2.281
19	XeO_4	54	8	1.736
20	$HfCl_4$	72	17	2.316
21	OsO_4	76	8	1.712
22	ThF_4	90	9	2.14
23	$ThCl_4$	90	17	2.567

⑮. システム名： OH16N（ノンスピン版） OH16S（スピン版）

→ 正八面体 **AB_6** 型分子(**O_h** 対称)例：六フッ化硫黄(**SF_6**)，六フッ化ウラン(**UF_6**)

入力する情報：
①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：A−B の結合距離(Å)



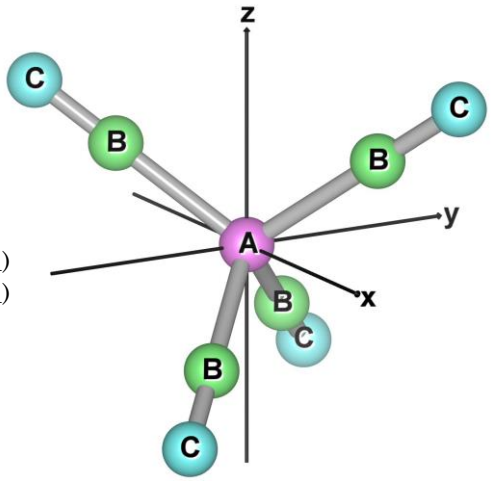
No.	AB_6	A	B	A−B
1	SF_6	16	9	1.5607
2	SeF_6	34	9	1.685
3	MoF_6	42	9	1.820
4	TeF_6	52	9	1.815
5	WF_6	74	9	1.832
6	ReF_6	75	9	1.832
7	OsF_6	76	9	1.831
8	IrF_6	77	9	1.830
9	UF_6	92	9	1.9962
10	NpF_6	93	9	1.981
11	PuF_6	94	9	1.971

⑯. システム名： TD144N（ノンスピン版） TD144S（スピン版）

→ 正四面体 **A(BC)$_4$** 型分子(**T$_d$** 対称)　　例：テトラカルボニルニッケル錯体(**[Ni(CO)$_4$]**)

入力する情報：

①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：C の原子番号
④：A−B の結合距離(Å)
⑤：B−C の結合距離(Å)



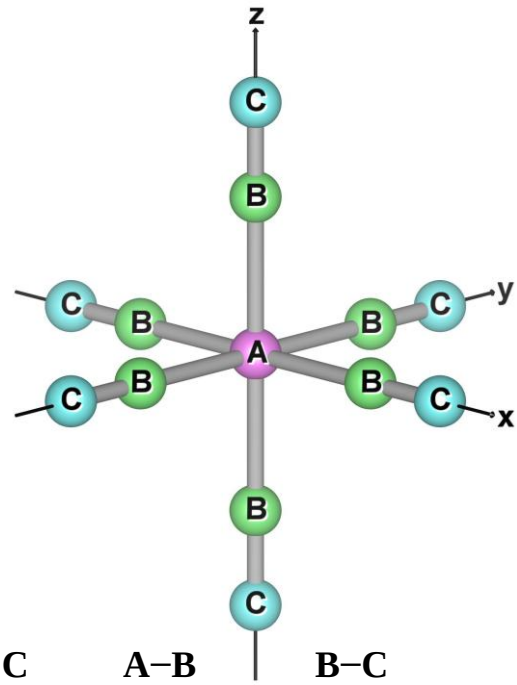
No.	A(BC)$_4$	A	B	C	A−B	B−C
1	[Ni(CO)$_4$]	28	6	8	1.838	1.141

⑰. システム名： OH166N（ノンスピン版） OH166S（スピン版）

→ 正八面体 **A(BC)$_6$** 型分子(**O$_h$** 対称)　　例：ヘキサカルボニルクロム錯体(**[Cr(CO)$_6$]**)

入力する情報：

①：A の原子番号
②：B の原子番号
③：C の原子番号
④：A−B の結合距離(Å)
⑤：B−C の結合距離(Å)



No.	A(BC)$_6$	A	B	C	A−B	B−C
1	[Cr(CO)$_6$]	24	6	8	1.92	1.16
2	[V(CO)$_6$]	23	6	8	2.015	1.138
3	[Mo(CO)$_6$]	42	6	8	2.063	1.145
4	[W(CO)$_6$]	74	6	8	2.059	1.149

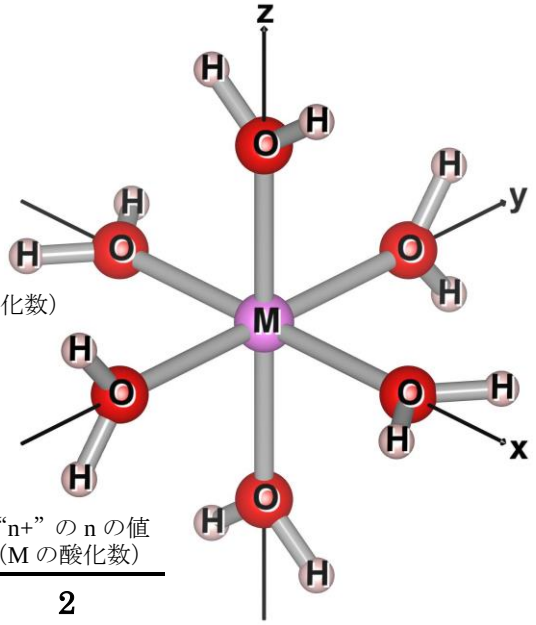
⑱. システム名： MH2O6N（ノンスピン版） MH2O6S（スピン版）

→ **$M(H_2O)_6$ 型アクア錯イオン(D_{2h} 対称)** 例：ヘキサアクアコバルト(II)錯陽イオン(**$[Co(H_2O)_6]^{2+}$**)

※水分子を“点”と見なせば O_h 対称になりますが，水分子の H まで含めて考えると D_{2h} 対称になります．水分子の O−H 距離や∠H−O−H は固定です．変更したい場合は，
https://www.dvxa.org/hme/dvxa/mh2o6.html で公開されている mh2o6.f，mh2o6n.f，mh2o6s.f の中を編集・保存し，Fortran コンパイラ（Open Watcom など）でコンパイルして，C:¥DVXA¥object の中の mh2o6.exe，mh2o6n.exe，mh2o6s.exe を上書き保存してご使用下さい．

※実際の$[M(H_2O)_6]^{n+}$の単結晶X線構造解析では，水分子の水素の位置に関しては D_{2h} 対称にはなっていません．このシステムでの計算は，水分子の水素の位置に関してはあくまで近似計算であることを予めご了承下さい．

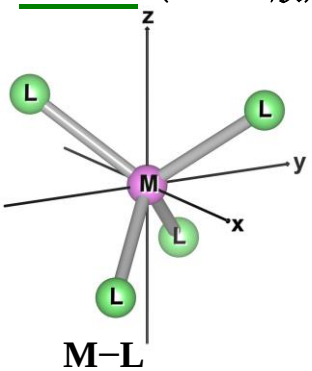
入力する情報：
①：M の原子番号
②：M−O の結合距離(Å)
③：“n+”の n の値（M の酸化数）



No.	$[M(H_2O)_6]^{n+}$	M	M−O	“n+”の n の値（M の酸化数）
1	$[Co(H_2O)_6]^{2+}$	27	2.085	2
2	$[Co(H_2O)_6]^{3+}$	27	2.085	3
3	$[Ni(H_2O)_6]^{2+}$	28	2.079	2
4	$[Ti(H_2O)_6]^{3+}$	22	2.066	3
5	$[Ti(H_2O)_6]^{4+}$	22	2.066	4
6	$[V(H_2O)_6]^{2+}$	23	2.129	2
7	$[V(H_2O)_6]^{3+}$	23	2.129	3
8	$[Cr(H_2O)_6]^{2+}$	24	1.997	2
9	$[Cr(H_2O)_6]^{3+}$	24	1.997	3
10	$[Mn(H_2O)_6]^{2+}$	25	2.189	2
11	$[Fe(H_2O)_6]^{2+}$	26	2.085	2
12	$[Fe(H_2O)_6]^{3+}$	26	2.085	3
13	$[Zn(H_2O)_6]^{2+}$	30	2.097	2
14	$[Ru(H_2O)_6]^{3+}$	44	2.074	3

⑲. システム名： ML4N（ノンスピン版） ML4S（スピン版）

→ 正四面体$[ML_4]^{n+/n-}$型錯イオン(T_d 対称)
例：テトラクロリドコバルト(II)酸イオン($[CoCl_4]^{2-}$)

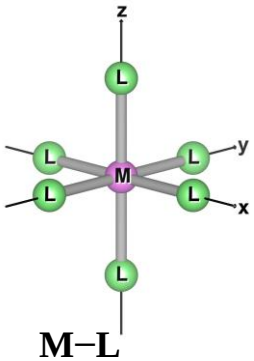


入力する情報：
①：M の原子番号
②：M の酸化数（形式電荷）
③：L の原子番号
④：L の酸化数（形式電荷）
⑤：M−L の結合距離(Å)

No.	$[ML_4]^{n+/n-}$	M	M の酸化数	L	L の酸化数	M−L
1	$[CoCl_4]^{2-}$	27	2	17	−1	2.254
2	$[CoBr_4]^{2-}$	27	2	35	−1	2.384
3	$[CoI_4]^{2-}$	27	2	53	−1	2.594

⑳. システム名： ML6N（ノンスピン版） ML6S（スピン版）

→ 正八面体$[ML_6]^{n+/n-}$型錯イオン(O_h 対称)
例：ヘキサフルオリドコバルト(III)酸イオン($[CoF_6]^{3-}$)

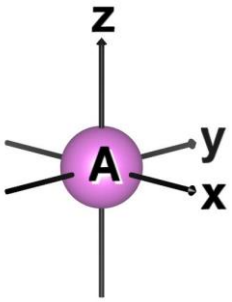


入力する情報：
①：M の原子番号
②：M の酸化数（形式電荷）
③：L の原子番号
④：L の酸化数（形式電荷）
⑤：M−L の結合距離(Å)

No.	$[ML_6]^{n+/n-}$	M	M の酸化数	L	L の酸化数	M−L
1	$[CrF_6]^{3-}$	24	3	9	−1	1.870
2	$[CrCl_6]^{3-}$	24	3	17	−1	2.335
3	$[CrBr_6]^{3-}$	24	3	35	−1	2.577
4	$[CrI_6]^{3-}$	24	3	53	−1	2.782

(21). システム名： ATOMN（ノンスピン版）

→ 単原子 A (対称軌道を使用しない)
例：周期表の水素(H)からプルトニウム(Pu)まで

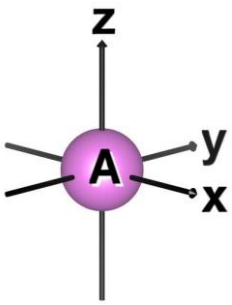


入力する情報：
①：A の原子番号

※ATOMN では BASEF も自動実行されますので，計算終了後
DVPLOT で BO7 を開けて原子の動径関数もご覧下さい．

(22). システム名： IONN（ノンスピン版）

→ 単原子イオン A^{n+} (対称軌道を使用しない)
例：三価のコバルト単原子陽イオン(Co^{3+})



入力する情報：
①：A の原子番号
②：A の酸化数（形式電荷）

※IONN では BASEF も自動実行されますので，計算終了後
DVPLOT で BO7 を開けて原子の動径関数もご覧下さい．

【ATOM, ATOMN, ION, IONN における計算結果(F08E)の見方についての解説】

ATOMN や IONN 実行後の F08E における分子軌道(実際には原子軌道) の名前の読み方ですが, s, p, d, f の記号（副量子数(l)で， l ＝0 → s 軌道， l ＝1 → p 軌道， l ＝2 → d 軌道， l ＝3 → f 軌道) の前の数字を足し算して読んで下さい. この足しあわせ数字がその原子軌道の主量子数(n)になります. 磁気量子数(m)に関する情報は，F25 の内容を参照することにより分かります. p, d, f の記号の後に書かれている数字が，F25 におけるその順番になります. F25 は本来は対称軌道ファイルですが，ATOMN や IONN では，原子軌道に名前を付ける役割を担っています.

【例えば，鉄(Fe)原子の計算結果 F08E の場合】

1+0s → **1 + 0** = **1**(n = 1)→ **1s 軌道**
2+0s → **2 + 0** = **2**(n = 2)→ **2s 軌道**
1+1p2 → **1 + 1** = **2**(n = 2)→ **2p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **2 番目**) → $2p_z$ 軌道(m = 0)
1+1p3 → **1 + 1** = **2**(n = 2)→ **2p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **3 番目**) → $2p_y$ 軌道(m = −1)
1+1p1 → **1 + 1** = **2**(n = 2)→ **2p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **1 番目**) → $2p_x$ 軌道(m = 1)
3+0s → **3 + 0** = **3**(n = 3)→ **3s 軌道**
2+1p1 → **2 + 1** = **3**(n = 3)→ **3p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **1 番目**) → $3p_x$ 軌道(m = 1)
2+1p3 → **2 + 1** = **3**(n = 3)→ **3p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **3 番目**) → $3p_y$ 軌道(m = −1)
2+1p2 → **2 + 1** = **3**(n = 3)→ **3p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **2 番目**) → $3p_z$ 軌道(m = 0)
1+2d4 → **1 + 2** = **3**(n = 3)→ **3d 軌道**(F25 の **d 軌道**(l = 2)の **4 番目**) → $3d_{yz}$ 軌道(m = −1)
1+2d2 → **1 + 2** = **3**(n = 3)→ **3d 軌道**(F25 の **d 軌道**(l = 2)の **2 番目**) → $3d_{xz}$ 軌道(m = 1)
1+2d5 → **1 + 2** = **3**(n = 3)→ **3d 軌道**(F25 の **d 軌道**(l = 2)の **5 番目**) → $3d_{xy}$ 軌道(m = −2)
4+0s → **4 + 0** = **4**(n = 4)→ **4s 軌道**
1+2d1 → **1 + 2** = **3**(n = 3)→ **3d 軌道**(F25 の **d 軌道**(l = 2)の **1 番目**) → $3d_{x^2-y^2}$ 軌道(m = 2)
1+2d3 → **1 + 2** = **3**(n = 3)→ **3d 軌道**(F25 の **d 軌道**(l = 2)の **3 番目**) → $3d_{z^2}$ 軌道(m = 0)
3+1p3 → **3 + 1** = **4**(n = 4)→ **4p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **3 番目**) → $4p_y$ 軌道(m = −1)
3+1p1 → **3 + 1** = **4**(n = 4)→ **4p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **1 番目**) → $4p_x$ 軌道(m = 1)
3+1p2 → **3 + 1** = **4**(n = 4)→ **4p 軌道**(F25 の **p 軌道**(l = 1)の **2 番目**) → $4p_z$ 軌道(m = 0)

F25 に書いてあるのは角度部分(副量子数(l)と磁気量子数(m))の情報(球面調和関数 $\mathscr{Y}_{lm}$)の情報のみであり，動径部分の主量子数(n)に関する情報は F25 には入っておりません.

実数型球面調和関数 $\mathscr{Y}_{lm}$ で,

$\mathscr{Y}_{00}$ =**s** 軌道

$\mathscr{Y}_{11}$ =$\mathbf{p_x}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{10}$ =$\mathbf{p_z}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{1-1}$=$\mathbf{p_y}$ 軌道

$\mathscr{Y}_{22}$ =$\mathbf{d_{x2-y2}}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{21}$ =$\mathbf{d_{xz}}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{20}$ =$\mathbf{d_{z2}}$ 軌道

$\mathscr{Y}_{2-1}$=$\mathbf{d_{yz}}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{2-2}$ =$\mathbf{d_{xy}}$ 軌道

$\mathscr{Y}_{33}$ =$\mathbf{f_{x(x2-3y2)}}$軌道　$\mathscr{Y}_{32}$ =$\mathbf{f_{z(x2-y2)}}$軌道　$\mathscr{Y}_{31}$ =$\mathbf{f_{xz2}}$ 軌道

$\mathscr{Y}_{30}$ =$\mathbf{f_{z3}}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{3-1}$=$\mathbf{f_{yz2}}$ 軌道　$\mathscr{Y}_{3-2}$=$\mathbf{f_{xyz}}$ 軌道

$\mathscr{Y}_{3-3}$=$\mathbf{f_{y(3x2-y2)}}$軌道　です.

単原子（イオン）計算(atom, atomn, ion, ionn)時の F25(**C:¥DVXA¥DATA¥ATOMF**)は,

```
----+----1----+----2----+----3----+----4---
1+0s
0 1
0 1 1.0000000
1+1p1
1 1
1 1 1.0000000
1+1p2
1 1
0 1 1.0000000
1+1p3
1 1
-1 1 1.0000000
1+2d1
2 1
2 1 1.0000000
1+2d2
2 1
1 1 1.0000000
1+2d3
2 1
0 1 1.0000000
1+2d4
2 1
-1 1 1.0000000
1+2d5
2 1
-2 1 1.0000000
----+----1----+----2----+----3----+----4---
（右上に続く）
```

```
----+----1----+----2----+----3----+----4---
1+3f1
3 1
3 1 1.0000000
1+3f2
3 1
2 1 1.0000000
1+3f3
3 1
1 1 1.0000000
1+3f4
3 1
0 1 1.0000000
1+3f5
3 1
-1 1 1.0000000
1+3f6
3 1
-2 1 1.0000000
1+3f7
3 1
-3 1 1.0000000

symOrb v*.*d
** Nsym, Isyml, Jsyml **

16
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1
----+----1----+----2----+----3----+----4---
```

となっております．これを日本語に翻訳すると,

+0s $\mathscr{Y}_{00}$ **(l = 0, m = 0)** ＝**S** 軌道

+1p1 $\mathscr{Y}_{11}$ **(l = 1, m = 1)** ＝$\mathbf{p_x}$ 軌道 **(F25 における p 軌道の１番目の軌道)**

+1p2 $\mathscr{Y}_{10}$ **(l = 1, m = 0)** ＝$\mathbf{p_z}$ 軌道 **(F25 における p 軌道の２番目の軌道)**

+1p3 $\mathscr{Y}_{1-1}$ **(l = 1, m = −1)** ＝$\mathbf{p_y}$ 軌道 **(F25 における p 軌道の３番目の軌道)**

+2d1 $\mathscr{Y}_{22}$ **(l = 2, m = 2)** ＝$\mathbf{d_{x2-y2}}$ 軌道 **(F25 における d 軌道の１番目の軌道)**

+2d2 $\mathscr{Y}_{21}$ **(l = 2, m = 1)** ＝$\mathbf{d_{xz}}$ 軌道 **(F25 における d 軌道の２番目の軌道)**

+2d3 $\mathscr{Y}_{20}$ **(l = 2, m = 0)** ＝$\mathbf{d_{z2}}$ 軌道 **(F25 における d 軌道の３番目の軌道)**

+2d4 $\mathscr{Y}_{2-1}$ **(l = 2, m = −1)** ＝$\mathbf{d_{yz}}$ 軌道 **(F25 における d 軌道の４番目の軌道)**

+2d5 $\mathscr{Y}_{2-2}$ **(l = 2, m = -2)** ＝$\mathbf{d_{xy}}$ 軌道 **(F25 における d 軌道の５番目の軌道)**

+3f1 $\mathscr{Y}_{33}$ **(l = 3, m = 3)** **=$f_{x(x^2-3y^2)}$**軌道 **(F25 における f 軌道の１番目の軌道)**

+3f2 $\mathscr{Y}_{32}$ **(l = 3, m = 2)** **=$f_{z(x^2-y^2)}$**軌道 **(F25 における f 軌道の２番目の軌道)**

+3f3 $\mathscr{Y}_{31}$ **(l = 3, m = 1)** **=f_{xz^2}** 軌道 **(F25 における f 軌道の３番目の軌道)**

+3f4 $\mathscr{Y}_{30}$ **(l = 3, m = 0)** **=f_{z^3}** 軌道 **(F25 における f 軌道の４番目の軌道)**

+3f5 $\mathscr{Y}_{3-1}$ **(l = 3, m = −1)** **=f_{yz^2}** 軌道 **(F25 における f 軌道の５番目の軌道)**

+3f6 $\mathscr{Y}_{3-2}$ **(l = 3, m = −2)** **=f_{xyz}** 軌道 **(F25 における f 軌道の６番目の軌道)**

+3f7 $\mathscr{Y}_{3-3}$ **(l = 3, m = −3)** **=$f_{y(3x^2-y^2)}$**軌道 **(F25 における f 軌道の７番目の軌道)**

となります．

単原子（または単原子イオン）の電子状態を atom, atomn, ion, ionn で計算したときは，この対称ブロックラベルに内殻側から順番に 1，2，3 と数字が先頭に付加されていきます．

s 軌道のブロックは内殻側から 1，2，3 でよろしいのですが，p 軌道のブロックはそれでは困ります．なぜなら p 軌道は 2p 軌道から始まるからです（1p 軌道というものは存在しません）．

同様に，d 軌道は 3d 軌道から始まります（1d 軌道，2d 軌道というものは存在しません）．
f 軌道は 4f 軌道から始まります（1f，2f，3f 軌道というものは存在しません）．

これをなんとかしようと苦肉の策が，

s 軌道ブロックを“ +0s ”
p 軌道ブロックを“ +1p ”
d 軌道ブロックを“ +2d ”
f 軌道ブロックを“ +3f ”

と名づけるという，各原子軌道ブロックへのラベル付けのアイデアです．
これなら内殻側から，1，2，3 と番号が付いても，ちゃんと足し算をすれば，

1s: 1 +0s = 1s			
2s: 2 +0s = 2s	**2p: 1 +1p = 2p**		
3s: 3 +0s = 3s	**3p: 2 +1p = 3p**	**3d: 1 +2d = 3d**	
4s: 4 +0s = 4s	**4p: 3 +1p = 4p**	**4d: 2 +2d = 4d**	**4f: 1 +3f = 4f**
5s: 5 +0s = 5s	**5p: 4 +1p = 5p**	**5d: 3 +2d = 5d**	**5f: 2 +3f = 5f**
6s: 6 +0s = 6s	**6p: 5 +1p = 6p**	**6d: 4 +2d = 6d**	
7s: 7 +0s = 7s	**7p: 6 +1p = 7p**		

となってくれるといった次第です．ご面倒でも足し算をして原子軌道名をお読み下さい．

そして角度部分（球面調和関数）の情報について，例えば p 軌道といっても **p_x** 軌道なのか **p_y** 軌道なのか **p_z** 軌道なのかといった情報も，F25（**C:¥DVXA¥DATA¥ATOMF**）において p 軌道の箇所で何番目の原子軌道なのかを調べればすぐに分かるといった仕組みです．

なお，eduDV におけるすべてのシステムは，システム名の語尾の“**n**”または“**S**”を省いて実行すれば，F01 を作成して F25 を準備した時点で動作が停止します．この場合は F01 をエディタ等で適宜編集のうえ，MAKEF05 および DVSCAT を手動で実行することができます．

【eduDV に関する文献】

1. 坂根弦太, "DV−Xα 分子軌道計算プログラムと三次元可視化システム VENUS の大学基礎化学教育での活用", *日本教育情報学会第 22 回年会（岡山）論文集*, 2D3, 198-199 (2006). http://iss.ndl.go.jp/books/R000000024-I003501878-00
2. 坂根弦太, 小和田善之, "教育用 F01・F25 準備システム eduDV と錯体計算用 F05 準備システム MAKEF05SCFS", *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα* **20** (1&2), 247-251 (2007).
3. 門馬綱一, 泉富士夫, 坂根弦太, "3 次元可視化システム VESTA と DV-Xα法計算支援環境の開発", *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα* **20** (1&2), 252-253 (2007).
4. 坂根弦太, "三次元可視化システムを用いた基礎化学教育", *平成 19 年度私立大学教員の授業改善白書*, p.15, 社団法人私立大学情報教育協会 (Japan Universities Association for Computer Education), 2008 年 6 月 5 日, https://www.juce.jp/LINK/report/hakusho2007/hakusho2007.pdf
5. Genta Sakane, Koichi Momma, Fujio Izumi, "Building of an Integrated Assistance Environment for the DV-Xα Method", 7th Award for Distinguished Contributions, Memorial Award Lecture, *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα* **21** (1&2), 13-17 (2008).
6. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV を利用した電子についての基礎化学教育", *JUCE Journal(大学教育と情報)* **18** (4), 15-17 (2010), 社団法人私立大学情報教育協会, https://iss.ndl.go.jp/books/R000000004-I10607830-00, https://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html
7. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **31**, 9-17 (2010). https://jglobal.jst.go.jp/detail?JGLOBAL_ID=201102244786621166, https://iss.ndl.go.jp/books/R000000004-I11037051-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_31.pdf, http://id.nii.ac.jp/1182/00002927/
8. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（２）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **32**, 11-36 (2011). https://jglobal.jst.go.jp/detail?JGLOBAL_ID=201202287539780098, https://jglobal.jst.go.jp/public/20090422/201202287539780098, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_32.pdf, http://id.nii.ac.jp/1182/00002937/
9. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（３）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **33**, 1-31 (2012). https://jglobal.jst.go.jp/detail?JGLOBAL_ID=201402241767933214, https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402183-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_33.pdf, http://id.nii.ac.jp/1182/00002944/
10. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（４）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **34**, 1-37 (2013). https://jglobal.jst.go.jp/detail?JGLOBAL_ID=201402225769125250, https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402176-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_34.pdf, http://id.nii.ac.jp/1182/00002951/
11. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（５）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **35**, 1-32 (2014). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402170-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_35.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002957/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2967/files/jkh35p1-32.pdf
12. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（６）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **36**, 1-18 (2015). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402164-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_36.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002963/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2973/files/jkh36p1-18.pdf
13. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（７）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **37**, 1-16 (2016). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402158-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_37.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002969/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2979/files/jkh37p1-16.pdf
14. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（８）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **38**, 1-20 (2017). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402155-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_38.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002972/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2982/files/jkh38p1-20.pdf
15. 坂根弦太, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（９）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **39**, 1-20 (2018). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402151-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_39.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002976/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2986/files/jkh39p1-20.pdf
16. 坂根弦太, 森義裕, "教育用分子軌道計算システム eduDV の開発（１０）", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **40**, 11-30 (2019). https://iss.ndl.go.jp/books/R000000025-I008402146-00, http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_40.pdf http://id.nii.ac.jp/1182/00002981/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2991/files/jkh40p11-30.pdf
17. 坂根弦太, 森義裕, "教育用分子軌道計算システム eduDV の教育現場での活用", *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **41/42**, 9280 (2020/2021). http://id.nii.ac.jp/1182/00002987/, https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2997/files/jkh41-42p9-28.pdf
18. 坂根弦太, 森義裕, "DV-Xα法の高等教育現場での活用", *DV-Xα研究協会会報(Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα)*, ISSN 1346-5015, **33**, 1&2, 15-34 (2020).

・～

本 pdf 文書（冊子）は，以下の講演・講習会で参加者に配布されました．

1. 西暦 2006 年(平成 18 年) 9 月 8 日(金), 70 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
   「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(岡山理科大学 40 周年記念館) http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/kosyu/kosyu.html
2. 西暦 2007 年(平成 19 年) 1 月 24 日(水), pdf 文書ネット配布
   「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(東京工業大学) http://www.sci.hyogo-u.ac.jp/ykowada/kosyu2007.html
3. 西暦 2007 年(平成 19 年) 3 月 5 日(月), pdf 文書ネット配布
   「粉末構造解析 ― 次世代ソフトウェアの開発と応用」講習会(物質・材料研究機構) http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50145189.html
4. 西暦 2007 年(平成 19 年) 4 月 26 日(木)～27 日(金), pdf 文書ネット配布
   「化学，薬学，生化学者のための粉末・微小結晶解析の最前線」講演・講習会(阪大) http://www.spring8.or.jp/ext/ja/iuss/htm/text/06file/organic_powder-4.htm
5. 西暦 2007 年(平成 19 年) 8 月 2 日(木)～4 日(土), 100 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
   第 20 回 DV−Xα 研究会（第 20 回記念大会）（兵庫教育大学） http://www.sci.hyogo-u.ac.jp/ykowada/dvxa20.html
6. 西暦 2007 年(平成 19 年) 11 月 19 日(月), 106 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
   公開セミナー「粉末回折ユーザのための電子状態計算」(三菱総合研究所本社) http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50172626.html
7. 西暦 2008 年(平成 20 年) 1 月 8 日(火)～9 日(水), 76 冊 印刷製本（希望者全員に配布）
   「放射光地球惑星・高圧物性科学の現状と課題」(SPring-8 放射光普及棟大講堂) http://ns56a.das.ous.ac.jp/mori/sp8/
8. 西暦 2008 年(平成 20 年) 1 月 24 日(木), 46 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
   「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(福岡大学 A 棟 8 階 PC 教室 A) http://imac.eng.kagawa-u.ac.jp/DVSeminar/
9. 西暦 2008 年(平成 20 年) 11 月 22 日(土), 6 冊 印刷製本配布（アドバンスコース参加者に配布）
   「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(兵庫教育大学・神戸サテライト) http://www.sci.hyogo-u.ac.jp/ykowada/kosyu2008_1.html
10. 西暦 2009 年(平成 21 年) 3 月 23 日(月), 印刷製本 and / or USB メモリ配布
    「生体関連物質の各種スペクトル解析研究会」(福岡大学理学部 9 号館 2 階) http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/visiting.html#20090323
11. 西暦 2009 年(平成 21 年) 8 月 4 日(火), 24 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
    教員免許更新講習講座「教師のための理科教育最新情報」(岡山理大 40 周年記念館) http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/visiting.html#20090804
12. 西暦 2010 年(平成 22 年) 3 月 13 日(土), 印刷製本配布（アドバンス A コース受講者全員に配布）
    「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(兵庫教育大学・神戸サテライト) http://blog.livedoor.jp/tgs0001/archives/50392576.html
13. 西暦 2010 年(平成 22 年) 8 月 20 日(金), 30 冊 印刷製本配布（参加者全員に配布）
    岡山県教育委員会主催「高等学校理科研修講座（物理）」(岡山理大 40 周年記念館) http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egsakane/visiting.html#20100820
14. 西暦 2010 年(平成 22 年) 11 月 27 日(土), 印刷製本配布（アドバンスコース受講者全員に配布）
    「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(兵庫教育大学・神戸サテライト) http://www.sci.hyogo-u.ac.jp/ykowada/kosyu2010_1.html
15. 西暦 2013 年(平成 25 年) 11 月 2 日(土), 21 冊 印刷製本配布（受講者全員に配布）
    「DV−Xα 分子軌道計算講習会」(兵庫教育大学・ハーバーランドキャンパス) http://www.sci.hyogo-u.ac.jp/ykowada/kosyu2013.html

錯体・有機分子用 F05 作成システム MAKEF05SCFS

書籍「はじめての電子状態計算」添付 CD-ROM の **DV−Xα 計算環境**では，**F01** からプログラム **MAKEF05** で **F05** を作成した場合，3 行目左端 A4 フォーマット（Fortran77 の書式に関する文法で A4 は文字型変数で半角 4 文字分という意味）の変数 **MSCF** は **“SCCS”** となっています.

しかし筆者（坂根）は，**MSCF= “SCFS”** で普段，錯体の電子状態計算を行っています. **MSCF= “SCCS”** の場合は原子の基底関数が作成されるとき，周囲の原子の電子を感ずることなく，孤立原子としてその電子密度よりポテンシャルが作成され基底関数がセルフコンシステントチャージになるまで最適化されます. **MSCF= “SCFS”** の場合は，周囲の原子の電子もある程度感じた電子密度によりポテンシャルが作成され，基底関数がセルフコンシステントチャージになるまで最適化されます.

錯体，有機金属分子，有機分子など共有結合・配位結合を主たる結合とする分子・イオンの計算では，**MSCF= “SCFS”** の計算の方が精度の高い電子状態計算ができると筆者（坂根）は考えています. 一方，イオン結合を主たる結合とするクラスターモデルの計算では，**MSCF= “SCFS”** としなくても，**MSCF= “SCCS”** の計算で十分に実験結果をよく説明する良い計算結果が得られるようです. もちろん錯体，有機金属分子，有機分子などの計算で **MSCF= “SCCS”** を用いても目的によっては十分に良い計算結果が得られます. ただ **MSCF=“SCFS”** の計算と比較した場合，錯体，有機金属分子，有機分子などでは，より精度の高い，より実験結果をよく説明する計算結果が得られることが多いという話です.

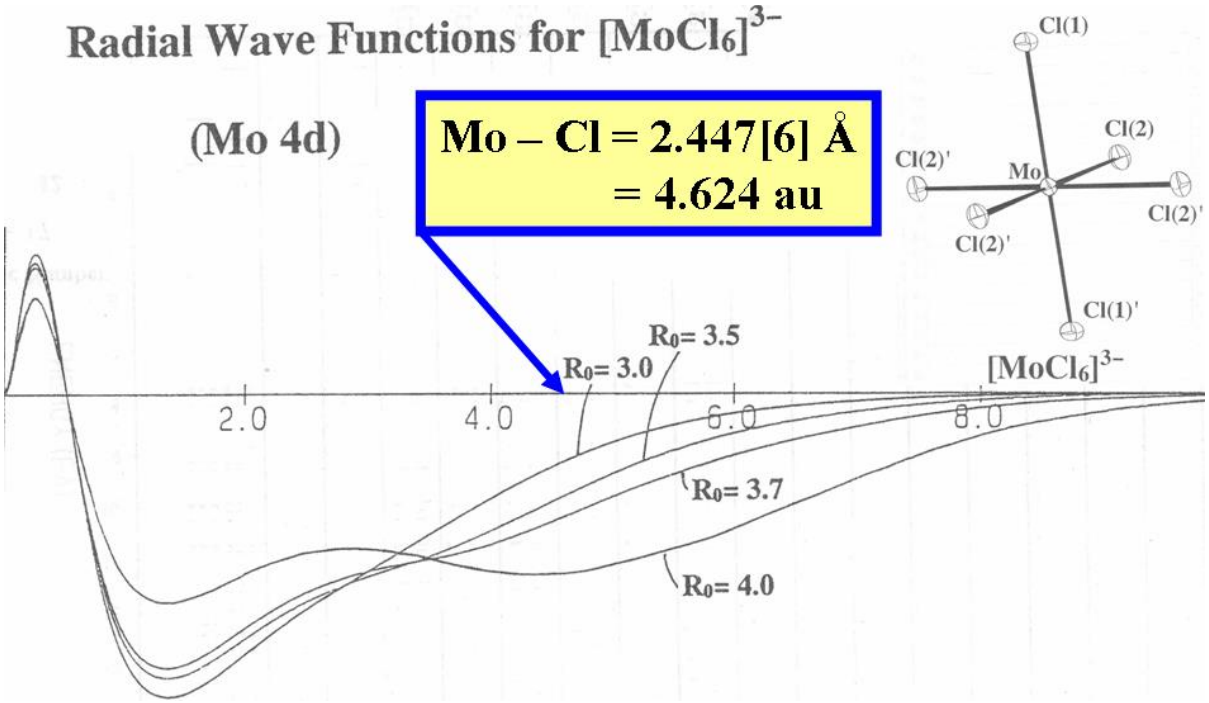
筆者は無機化学の合成系研究室に所属しており，1989 年(平成元年)に **DV−Xα 法**を使い始めて以来，研究室で合成され単結晶 X 線構造解析により原子種（原子番号）と原子座標の明かとなった数多くのクラスター錯体の電子状態を **DV−Xα 法**で計算してきましたが，**MSCF= “SCCS”** では実験結果との一致が比較的悪く，**MSCF= “SCFS”** では見事に実験結果と一致することが多かったという経験を有しています. 詳しくは例えば以下の URL をご参照下さい.

https://www.dvxa.org/hme/venus/dvxa_venus.html

共有結合や配位結合を主たる結合とする有機分子・錯体・錯イオンの電子状態計算では一般に **MSCF= “SCFS”** の **SCAT** 計算の方が実験結果をよく説明する計算結果を与えることが多いようです. そのため，有機小分子や錯体の計算を行うことの多い **eduDV** では **MSCF= “SCFS”** をデフォルトとしております(単原子計算の **ATOMN**, 単原子イオン計算の **IONN** は **MSCF=“SCCS”** となっております）.

1991 年（平成 3 年）8 月 5 日(月)～7 日(水)に蒲郡市のサンヒルズ三河湾で開催された**第 4 回 DV−Xα 研究会**で筆者は，錯体（錯イオン）の計算において，変数 **MSCF** が **“SCFS”** の場合と **“SCCS”** の場合の違いについて，さらに変数 **MSCF** が **“SCFS”** の場合に井戸型ポテンシャルのパラメータ **RIDO**（半径），**VIDO**（深さ），**IDOA**（繋ぎ目の形状），原子球半径・サンプル点分布関数としての役割を有するパラメータ R_0 などについて，その値を変動させたときに計算結果がどのような影響を受けるのかについて詳細に検討を行いました.

その結果，**MSCF= “SCFS”** の場合，特に R_0 の値に基底関数の形が大きく影響を受け，場合によっては周囲の原子の電子を感じすぎて，おかしな形の基底関数が使われてしまう危険性があることを指摘しました（次ページの図のモリブデン 4d 原子軌道関数）.



上の図を見れば明らかなように，MSCF= “SCFS” の場合，原子球半径 R_0 の値が適当でないと（特に大きすぎると），周りの原子の電子を必要以上に感じすぎたポテンシャルが生成され，その結果，動径関数の図を人間が見て変であると判定できるような，おかしな基底関数が分子軌道計算に使われてしまう危険性があります．上の図は，$[MoCl_6]^{3-}$ という正八面体型六配位 O_h 対称の単核錯イオンにおける，中心のモリブデン原子の 4d 原子軌道の動径分布を見た図ですが，原子球半径 R_0 の値が $4.0a_0$ の場合など，モリブデンの 4d 原子軌道なのに，塩素原子の位置に膨らみを持つようなおかしな形になってしまっていることが分かります．R_0 の値が $3.7a_0$ あるいは $3.5a_0$ でも塩素の原子位置に僅かながら膨らみが見受けられます．上図の場合で判断するならば，モリブデンの原子球半径 R_0 の値は $3.0a_0$ か，それ以下の値とすべきでしょう．

DV−Xα 法には，原子基底関数を数値関数で表現できるという極めて大きなメリット（長所）があります．電子密度分布の情報を元に原子が感じるポテンシャルを求め，そのポテンシャルを元に原子軌道関数を作成し，原子軌道関数の線形結合により分子軌道を求め，マリケンの電子密度解析の方法で軌道電子を，分子軌道を構成している原子軌道成分に分配し，それを各原子について積算する．そうして再び電子密度分布の情報を得て，それを元に再び原子が感じるポテンシャルを求め，そのポテンシャルを元に原子軌道関数を作成し，分子軌道を求め，マリケンの電子密度解析により再々度電子密度分布の情報を得て，という繰り返しの中で，電子密度に矛盾が無くなるまで（self-consistent-charge になるまで）繰り返し計算をして，最適な基底関数が得られ，分子軌道計算結果は例えば XPS（X線光電子スペクトル）などの実験結果とよく一致するという **DV−Xα 法**の大きな長所です．詳しくは足立裕彦先生の執筆された著書をご参照下さい．

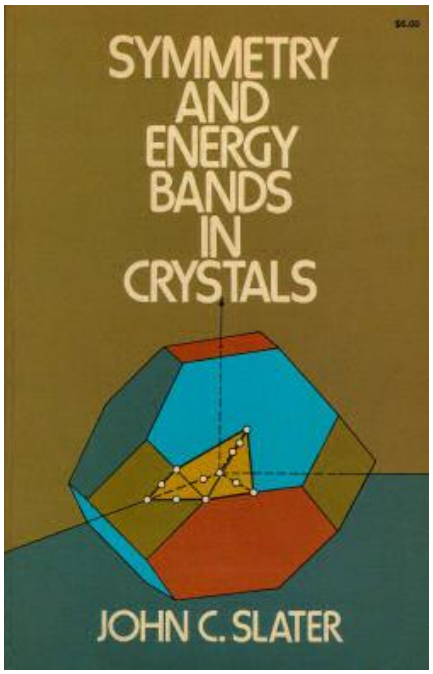
それゆえに，おかしな形（隣の原子の位置に極大（または膨らみ）をもつような動径分布）の基底関数になってもらっては困るのです．

MSCF= “SCCS” の場合，周りの原子の電子は感ずることなくポテンシャルが作成されますので，前述のようなおかしな形の基底関数に最適化されてしまう危険性は全くありません．ゆえに一般には，MSCF= “SCCS” の計算の方が，明らかに無難です．書籍「はじめての電子状態計算」では MSCF= “SCCS” の SCAT のみが解説されています．

しかし錯体，錯イオン，有機金属化合物，有機物などの合成系実験室では，以下に列挙する強い欲求と事情がありました．

1. 特に錯体では色の議論をするので，少しでも精度の高い分子軌道計算がしたい．
2. 実験結果をよく説明する，合成現場のイメージ（特に形式的酸化数や電気陰性度のイメージ）に即した計算結果を得たい．例えば二価のコバルト錯体と三価のコバルト錯体では，もちろんネットチャージは電気的中性の原理からゼロには近くはなるが，それでも両者のネットチャージを比べたときに，三価のコバルト錯体の方がプラス側に大きな数字になって欲しい．電気陰性度についても同様であり，例えば同じような環境であれば，硫黄よりも酸素の方がネットチャージの値はマイナス側に大きな数字になって欲しい．
3. 単結晶Ｘ線構造解析により新規化合物の原子種（原子番号）と原子座標が決定できた後は，ルーチンワークとして MSCF= “SCFS” の **DV−$X\alpha$ 計算**を行いたい．だが MSCF= “SCFS” の SCAT を計算して，147 ページの図のようにおかしな形の基底関数となってもらっては困る．
4. 問題のない適当な値の井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値を使いたい．しかし計算のたびに井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値を変更したくない（変更すると特にマリケンポピュレーション解析結果が大きく変わってくるため）．
5. **DV−$X\alpha$ 法**は原子種と原子座標さえ入力すれば電子状態の計算できる第一原理計算プログラムであり，原子種と原子座標以外に人間がいじるパラメータは無くしたい．

そこで岡山理科大学理学部化学科の無機化学系・合成研究室（坂根）は，長年の経験により，個々の原子種に対する井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値として，Slater の原子半径の値を採用することに決心しました．特に理論的な，あるいは実験的な根拠があるわけではないのですが，Slater の原子半径の値が，いろいろなクラスター錯体の計算を行ったときに，原子基底関数の動径分布がおかしな形とならず，そして実験結果をよく説明する良い計算結果を得ていることから，井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値をパラメータ化せずに固定するという目的で，Slater の原子半径の値を井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値にすると決心したのです．



Slater の原子半径の値は，**John Clark Slater** 著

"Symmetry and Energy Bands in Crystals"

Dover Publications, Inc., New York, 1972.

という書籍の 55 頁の

Table 3-1

Atomic radii in Angstroms

(the inert gases do not appear, since they do not form bonds)

に掲載されています．この書籍には pp. 307-333 の

Appendix 1

Interatomic Distances and Crystal Structures

という主な分子における原子間距離の膨大なデータも掲載されており，色々な場面で，とても役に立ちます．

Table 3-1
Atomic radii in Angstroms (the inert gases do not appear, since they do not form bonds)

														Cs	2.60	Fr	
														Ba	2.15	Ra	2.15
														La	1.95	Ac	1.95
														Ce	1.85	Th	1.80
														Pr	1.85	Pa	1.80
														Nd	1.85	U	1.75
														Pm	1.85	Np	1.75
								K	2.20	Rb	2.35	Sm	1.85	Pu	1.75
								Ca	1.80	Sr	2.00	Eu	1.85	Am	1.75
								Sc	1.60	Y	1.80	Gd	1.80		
								Ti	1.40	Zr	1.55	Tb	1.75		
								V	1.35	Nb	1.45	Dy	1.75		
								Cr	1.40	Mo	1.45	Ho	1.75		
								Mn	1.40	Tc	1.35	Er	1.75		
								Fe	1.40	Ru	1.30	Tu	1.75		
								Co	1.35	Rh	1.35	Yb	1.75		
								Ni	1.35	Pd	1.40	Lu	1.75		
								Cu	1.35	Ag	1.60	Hf	1.55		
								Zn	1.35	Cd	1.55	Ta	1.45		
								Ga	1.30	In	1.55	W	1.35		
								Ge	1.25	Sn	1.45	Re	1.35		
								As	1.15	Sb	1.45	Os	1.30		
								Se	1.15	Te	1.40	Ir	1.35		
								Br	1.15	I	1.40	Pt	1.35		
												Au	1.35		
												Hg	1.50		
												Tl	1.90		
												Pb	1.80		
												Bi	1.60		
												Po	1.90		
												At			
		Li	1.45	Na	1.80										
		Be	1.05	Mg	1.50										
		B	0.85	Al	1.25										
H	0.25	C	0.70	Si	1.10										
		N	0.65	P	1.00										
		O	0.60	S	1.00										
		F	0.50	Cl	1.00										

この Table 3-1 の値の単位はÅです．これを原子単位に変換したものを以下の URL で公開しております．

https://www.dvxa.org/hme/venus/SCFS/R0.html

この Slater の原子半径の値を筆者は長年にわたり MAKEF05 で F05 を作成した後，手作業で F05 の井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値などを編集作業して入力・上書き保存しておりました

例：**https://www.dvxa.org/hme/venus/c01/DV/f05.txt**

この作業は大変手間のかかる作業であり，また人間が手作業することによるケアレスミスも招きかねないことから，何とか自動的に Slater の原子半径の値を適用した MSCF = “SCFS” の F05 を作成してくれるプログラムはできないものかと考え，筆者が兵庫教育大学の小和田善之先生に依頼し，MAKEF05SCFS というプログラムを作成していただきました．MAKEF05SCFS の使い方は MAKEF05 と同様ですが，F01 から F05 が作成される際に MSCF= “SCFS” となり，さらに個々の原子種に対する井戸型ポテンシャルの半径 RIDO および原子球半径 R_0 の値として Slater の原子半径の値が自動的に適用されます．また，本冊子 92 ページで説明しているように MAKEF05SCFS は **DV−*Xα* 法計算支援環境**からも呼び出して容易に使うことができます．

MAKEF05SCFS の実行に必要な EXE ファイルおよびバッチファイルは，本冊子 5 ページで紹介している URL より **dvxa_v205.zip (2020.05.15; 143.7 MB)** をダウンロード･解凍していただければ，その中にすべて必要なファイルは含まれています．

F01 から F05 を作成する際，MAKEF05 を使う（MSCF=“SCCS”）か，MAKEF05SCFS を使うか（MSCF= “SCFS” ）は，一概にどちらが良いとは言えません．まず計算を始められる場合，デフォルトとしては MAKEF05 をお使い下さい．はっきり言えることは，MAKEF05 の方が無難な計算ができる（おかしな計算をしてしまうリスクが低い）ということです．ただ，共有結合を主たる結合とする有機分子・有機金属分子や，配位結合を主たる結合とする錯体などでは，MAKEF05SCFS を使うことにより，周囲にどんな原子（元素）がどれぐらいいるのかを感じてそれぞれの原子基底関数が最適化されますので，より精度の高い（何らかの実験結果（何らかの物性値の傾向））を良く説明できる計算結果が得られる可能性があります（おかしな計算をしてしまうリスクはありますので，基底関数の形を確認するなど注意深く計算する必要はあります）．

MSCF に関する文献

1. 坂根弦太，足立裕彦，“$[MoCl_6]^{3-}$の電子状態”, *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα* **3**, 9 (1991).
2. 坂根弦太，“モリブデン錯体の DV−Xα 計算におけるパラメータの効果”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告(The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science)*, ISSN 1341-6839, **17**, 35-38 (1996). http://www.center.ous.ac.jp/pdf/bulletin/bulletin_17.pdf, http://id.nii.ac.jp/1182/00002785/ https://ous.repo.nii.ac.jp/record/2795/files/jkh17p35-38.pdf
3. 坂根弦太，小和田善之，“教育用 F01・F25 準備システム eduDV と錯体計算用 F05 準備システム MAKEF05SCFS”, *Bulletin of the Society for Discrete Variational Xα* **20** (1&2), 247-251 (2007).
4. 岩沢美佐子，足立裕彦，早藤貴範，木村仁史，今永俊治，“DV-Xα法による電子状態計算—そのプログラムと解説”，三共出版 1996.

eduDV のデータ自動入力機能 Auto-eduDV

化学基礎，無機化学，物理化学，量子化学などの授業（演習）で**教育用分子軌道計算システム eduDV** を使おうとするとき，学生によっては以下のような困難や欲求を感じることがあります.

- 「分子軌道」という言葉自体，今日初めて聞いたのに，**DV−$X\alpha$ 分子軌道法**なんて難しいことを言われても，何をするプログラムなのかよく分からない.
- 秀丸エディタ上で **eduDV** を立ち上げて下さい，と言われても，**eduDV** の仕組み（何を入力すれば良いのか，何が出力されるのか，そもそも **eduDV** は何をする（している）システムなのか）がよく分からない.
- **eduDV** からシステム（点群で分類される 22 種類のいずれか）を起動すると，コマンドプロンプト画面が立ち上がるが，ここでの **CUI** 操作にハードルの高さを感じる．できたら全てをマウス操作だけで済ましたく，キーボードからの入力操作はなるべく避けたい.
- **eduDV** を起動すると，原子番号，酸化数，原子間距離(Å)，原子間角度(°)などの数値を会話式で入力するよう求められるが，何を入力したら良いか，よく分からない．原子番号は周期表を見ないと分からないし，原子間距離や角度のデータに至っては，どこにそのようなデータがあるのか知らない．酸化数もどんな数字を入れたら良いか，よく分からない.

教員側も，以下のような困難や欲求を感じることがあります.

- 授業時間は限られており，**DV−$X\alpha$ 法**や **eduDV** とはそもそも何なのかという説明をしていると，肝心の演習時間が少なくなってしまう．原子軌道や分子軌道とは何か，ということを学生に実感してもらうにあたって，**DV−$X\alpha$ 法**や **eduDV** の説明は本質ではなく，そのような説明を省いて，すぐに学生自身に **VESTA** で原子軌道や分子軌道を三次元可視化してもらいたい.
- **eduDV** のコマンドプロンプト画面で入力すべき原子番号，酸化数，原子間距離(Å)，原子間角度(°)などの数値情報を，学生全員に提示する（黒板，ホワイトボード，パワーポイントスライド）のは手間がかかるし，教室の後ろの席の学生には伝わりにくい．また学生によっては **eduDV** のコマンドプロンプトでの入力をキータッチミスして，**eduDV** がエラーとなったり，入力数値を間違えたために，他の人とは異なる計算結果になってしまうことがある.

教育現場以外の一般ユーザでも，以下のようなことはあるでしょう.

- 結晶学（粉末回折，単結晶回折）分野の仕事で **VESTA** の操作には慣れており，秀丸エディタ上で使う **RIETAN-FP·VENUS 統合支援環境**にも慣れているが，これまでに **DV−$X\alpha$ 法**というプログラムに縁がなく，原子軌道や分子軌道を **VESTA** で三次元可視化してみたり，電子密度の等値曲面を静電ポテンシャルの大小によって彩色してみたりすることに興味はあるものの，**DV−$X\alpha$ 法**や **eduDV** の操作法に関する情報を集める余裕がなく，秀丸エディタ上で使う **DV−$X\alpha$ 法計算支援環境**の導入を躊躇している.
- タッチカバー（キーボード）を装着していない状態のタブレット PC (Windows 8.1)で，タッチパネル上でのタップで秀丸エディタを起動，引き続き **eduDV** をタップだけで操作し（スクリーンキーボードを呼び出して数値を **CUI** で入力することは，タブレット PC ではそれほど容易ではない），タップで **VESTA** を起動，原子軌道，分子軌道の等値曲面を描き，スワイプ（スライド）で回転させたり，ピンチまたはストレッチで縮小させたり拡大させたりしたい.

これらの障壁を取り除き，欲求（要望）を実現するため，**教育用分子軌道計算システム eduDV** に，データ自動入力機能「**Auto-eduDV** 」を実装しました.

Auto-eduDV 機能で自動的に入力されるデータとは，これまでの eduDV ではコマンドプロンプト画面が立ち上がって，会話形式でキーボードからの入力が求められていた，原子番号，酸化数，原子間距離(Å)，原子間角度(°)などの数値データです．

本冊子の 132～141 ページに掲載してあるデータは，すべて eduDV に内蔵されました（もう，授業の際に，本冊子や坂根のウェブサイトを参照する必要はなくなりました）．Auto-eduDV 機能を実行すれば，ユーザは原子，分子，イオンなどをプルダウンメニューから選ぶだけで，座標の構築，対称軌道の準備，**DV−Xα** 計算，CONTRD などが全自動で実行されます．あとは VESTA を起動して分子の形を Ball-and-stick で確認し，Edit - Edit Data - Volumetric Data...で可視化したい波動関数を等値曲面図で描いたり，静電ポテンシャルマップを可視化したりするだけです．

すなわち，ユーザに求められる操作は以下の 4 ステップのみで，あとは VESTA の世界です．

1. **秀丸エディタ（DV−Xα 法計算支援環境）**を起動
2. **DV−Xα 法計算支援環境**の eduDV ボタンをクリック
3. 00. Automatic【データ自動入力】...を選択，計算したい原子，分子，イオンを選ぶ
4. **DV−Xα 法計算支援環境**の VESTA ボタンをクリック

Auto-eduDV 機能を実装した eduDV では，ユーザは **DV−Xα 法**については特に何の知識も要求されず，**DV−Xα 法**の操作については全く意識する必要がありません．ユーザの（情報リテラシーや量子化学や **DV−Xα 法**に関する）知識，経験，バックグラウンドなどに関係なく，いつでも，どこでも，誰でも，同じように操作できる「ユニバーサルデザイン」の教育システムです．ユーザはマウス操作（またはタッチパネルへのタップ操作）で Auto-eduDV 機能のメニューから原子，分子，イオンを選択するのみで，キーボードに触れることなく，VESTA の世界に入れます．

もちろん，Auto-eduDV 機能のメニューに登録されていない原子，分子，イオンは計算できません．その場合は，従来の eduDV （コマンドプロンプト画面が立ち上がり，原子番号，酸化数，原子間距離・角度などの数値データをキーボードから入力する方法）が利用できますし，CIF (*.cif) や MDL Molfile(*.mol)などの座標データがあれば，本冊子の 32～95 ページに説明があるように，**DV−Xα 法計算支援環境**の様々な機能を使って電子状態計算ができます．

現在，Auto-eduDV 機能のメニューに登録されているモデルの数は，

１．単原子（ノンスピン版のみ）	94 種類
２．単原子イオン（ノンスピン版のみ）	248 種類
３．分子またはイオン（ノンスピン版）	137 種類
４．分子またはイオン（スピン版）	137 種類
合　計	616 種類

です．

1. Auto-eduDV 機能実装版教育用分子軌道計算システム eduDV のインストール方法

2024 年 3 月 25 日(月)現在，以下の URL で公開されている教育用分子軌道計算システム eduDV には Auto-eduDV 機能が実装されています（実装していないバージョンは配布していません）．

https://www.dvxa.org/hme/fun/index.html#edudv

Auto-eduDV 機能は，秀丸エディタ上に構築された **DV−Xα 法計算支援環境**での利用を前提にシステムが設計されています（**DV−Xα 法計算支援環境**が構築されていない **DV−Xα** 法計算環境での

利用は想定していません）．**DV−Xα 法計算支援環境**は以下の URL で公開されています．

https://www.dvxa.org/hme/dvxa_assistance_environment_7.html

DV−Xα 法計算支援環境を含めた **eduDV** のインストールの仕方については，本冊子の 4〜12 ページをご覧下さい（秀丸エディタ，**DV−Xα 法**プログラム本体，**VESTA** 等を含みます）．

2. Auto-eduDV 機能実装版教育用分子軌道計算システム eduDV の使い方

本冊子の 4〜12 ページに書かれている環境設定作業が完了しているものとして話を進めます．

1. 秀丸エディタを起動します．**DV−Xα 法計算支援環境**の設定が完了していれば，秀丸エディタの上の方にあるツールバー上に左から，**XYZ2F01**，**MAKEF25**，**MAKEF05**，**DVSCAT**，**POPANL**，**POPANLS**，**NETC**，**BNDODR**，**WAVNUM…**，**eduDV…**といったボタンが表示されているはずです．さらに，秀丸エディタ画面の下の方にあるステータスバー上には左から，**MAKEL04…**，**LVLSHM**，**DVPLOT…**，**MAKEC04D…**，**CONTRD**，**CONTRDALL**，**VESTA**，**ｴｸｽﾌﾟﾛｰﾗ**，**ｺﾏﾝﾄﾞﾌﾟﾛﾝﾌﾟﾄ**といったボタンが表示されているはずです．

秀丸エディタが起動している状態で，キーボードの [Ctrl] + [E] を押せば **DV−Xα User Menu** というタイトルのポップアップメニューが表示され，**DV−Xα** に関する様々なマクロを選択することができます．

キーボードの[Ctrl]キーと何かのキーを同時に押す方法は，他には以下のような組み合わせがあります．それぞれ，登録されているマクロを起動できます．

[Ctrl] + [1]	XYZ2F01	[Ctrl] + [2]	MAKEF25
[Ctrl] + [3]	MAKEF05	[Ctrl] + [4]	DVSCAT
[Ctrl] + [5]	POPANL	[Ctrl] + [6]	POPANLS
[Ctrl] + [7]	NETC	[Ctrl] + [8]	BNDODR
[Ctrl] + [9]	WAVNUM…	[Ctrl] + [0]	eduDV…

また，キーボードのファンクションキー（F1〜F9）には，それぞれ以下のマクロが割り当てられています．

[F1]	MAKEL04…	[F2]	LVLSHM	[F3]	DVPLOT…
[F4]	MAKEC04D…	[F5]	CONTRD	[F6]	CONTRDALL
[F7]	VESTA	[F8]	エクスプローラ	[F9]	コマンドプロンプト

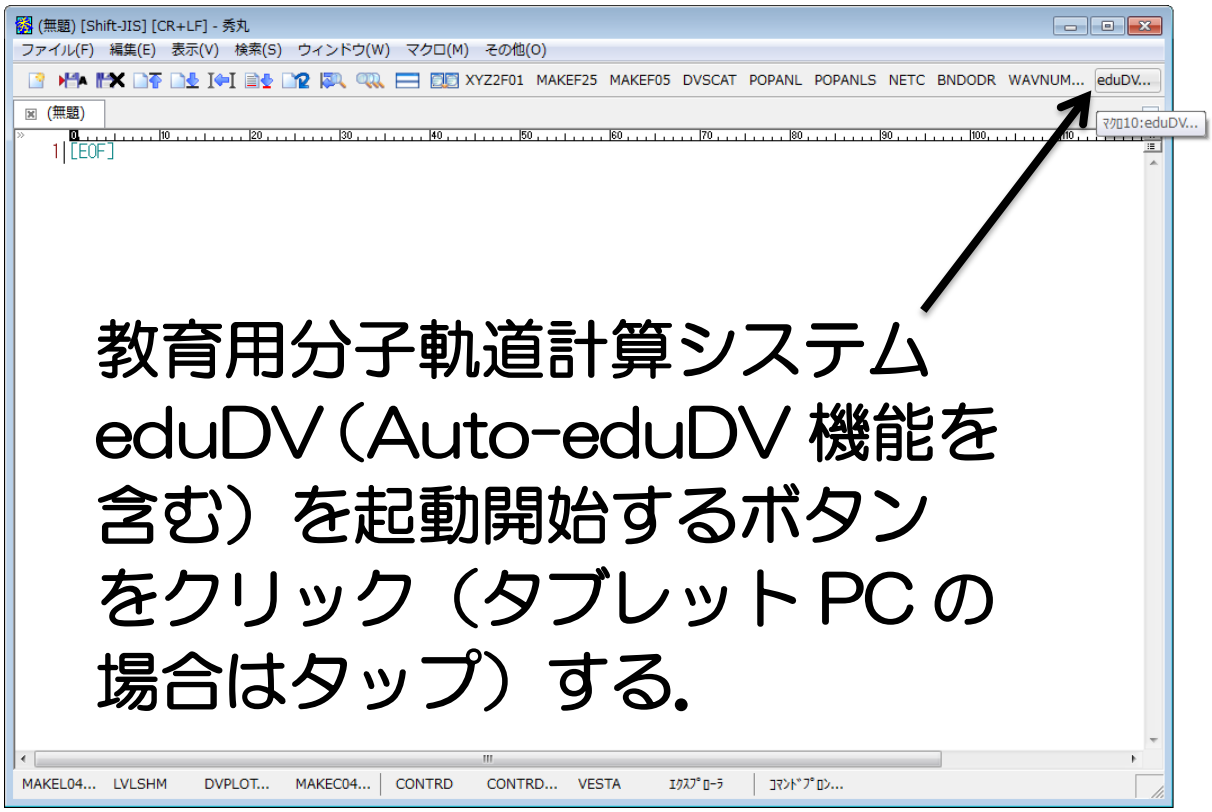
秀丸エディタのタイトルバーの**マクロ(M)**をクリックすれば，登録されているマクロがプルダウンメニューで示されます（クラスターモデル，グラフデータ，可視化などのサブメニューあり）．

XYZ2F01	本冊子 38，91 ページ	*.xyz を F01 に変換
MAKEF25	本冊子 101 ページ	**DV−Xα** 研究協会会員限定機能
MAKEF05	本冊子 39 ページ	F01 から F05 を作成
DVSCAT	本冊子 39, 93 ページ	**DV−Xα 法**本体プログラム SCAT
POPANL	本冊子 48〜49 ページ	マリケンポピュレーション解析
POPANLS	本冊子 128 ページ	マリケンポピュレーション解析
NETC	本冊子 25, 50〜51 ページ	有効電荷を求める
BNDODR	本冊子 25〜26, 51〜52 ページ	有効共有結合電荷を求める
WAVNUM…	本冊子 28, 102 ページ	波動関数の番号を調べる
eduDV…	本冊子 125〜141 ページほか	教育用分子軌道計算システム

クラスターモデル→ MAKEUNITC…

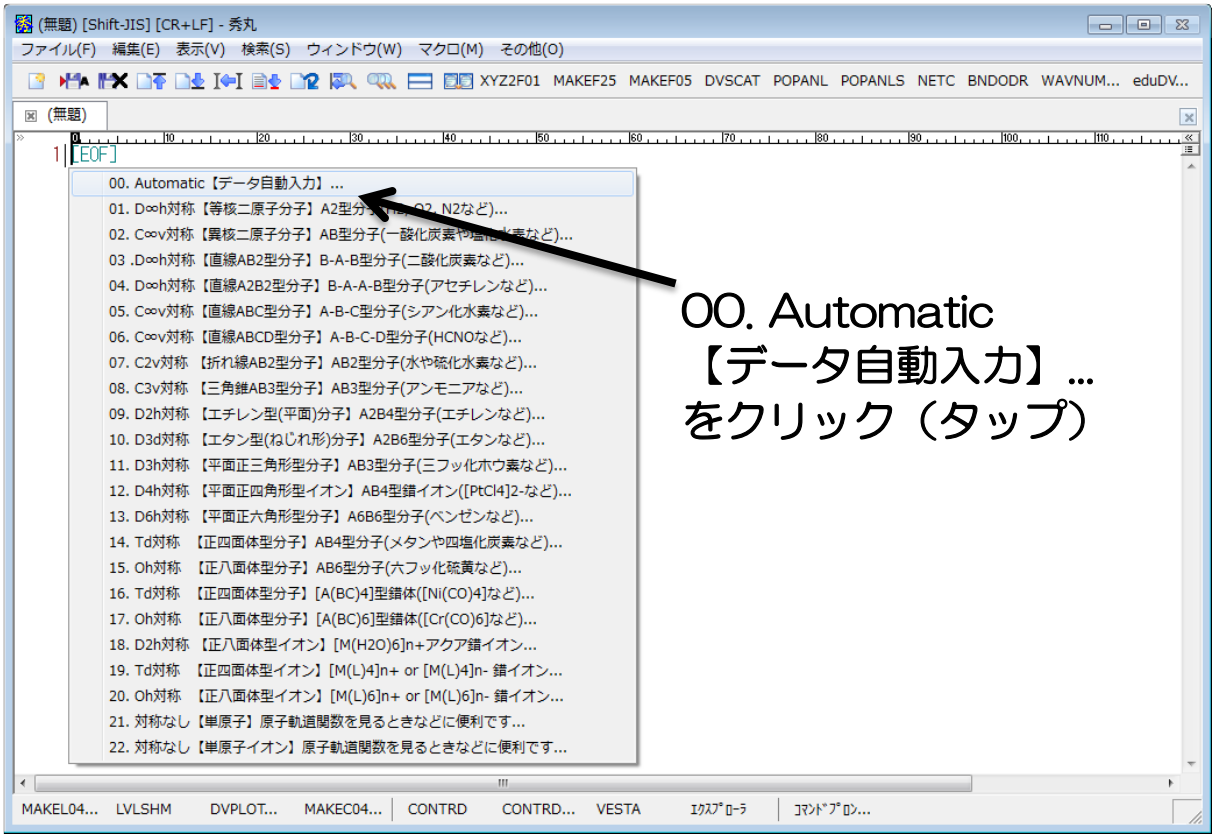
	MAKELAT…	
	DISPLAT…	
	SYMCHK	
	MADANAL	
	OPTF03	
	ATLIST	
	BLLIST	本冊子 41～43 ページ
	ATOMLEN…	
	NSCH…	
グラフデータ →	MAKEL04…	本冊子 54～55 ページ
	LVLSHM	本冊子 54～55 ページ
	MAKED04…	本冊子 55 ページ
	DOS	本冊子 55～57 ページ
	MAKEX04	本冊子 57 ページ
	XPS	本冊子 57～59 ページ
	MAKELB	本冊子 53～54 ページ
	LVLBNDS	本冊子 53～54 ページ
	MAKEB05	本冊子 59 ページ
	BAEF	本冊子 59～60 ページ
可視化 →	DVPLOT…	本冊子 30, 56～57 ページ
	MAKEC04D…	本冊子 40～41 ページ
	CONTRD	本冊子 41,101～103 ページ
	CONTRDALL	本冊子 100, 128 ページ
	VESTA	本冊子 105～119 ページほか
	MAKEC04	本冊子 28～29 ページ
	CONTR	本冊子 29 ページ
	CMAP	本冊子 30 ページ
その他 →	HLGAP	本冊子 61 ページ
	HLGAPS	本冊子 62 ページ
	PRESTS	本冊子 63 ページ
	PRESTSL	本冊子 64 ページ
	VLINN	
	Open Babel…	本冊子 65～66 ページ
	MAKEF05SCFS	本冊子 14, 92, 146～149 ページ
汎用マクロ →	エクスプローラ	
	コマンドプロンプト	
	桁揃え	

2. ツールバー上の右端の **eduDV…**ボタンをクリックします（下図）.

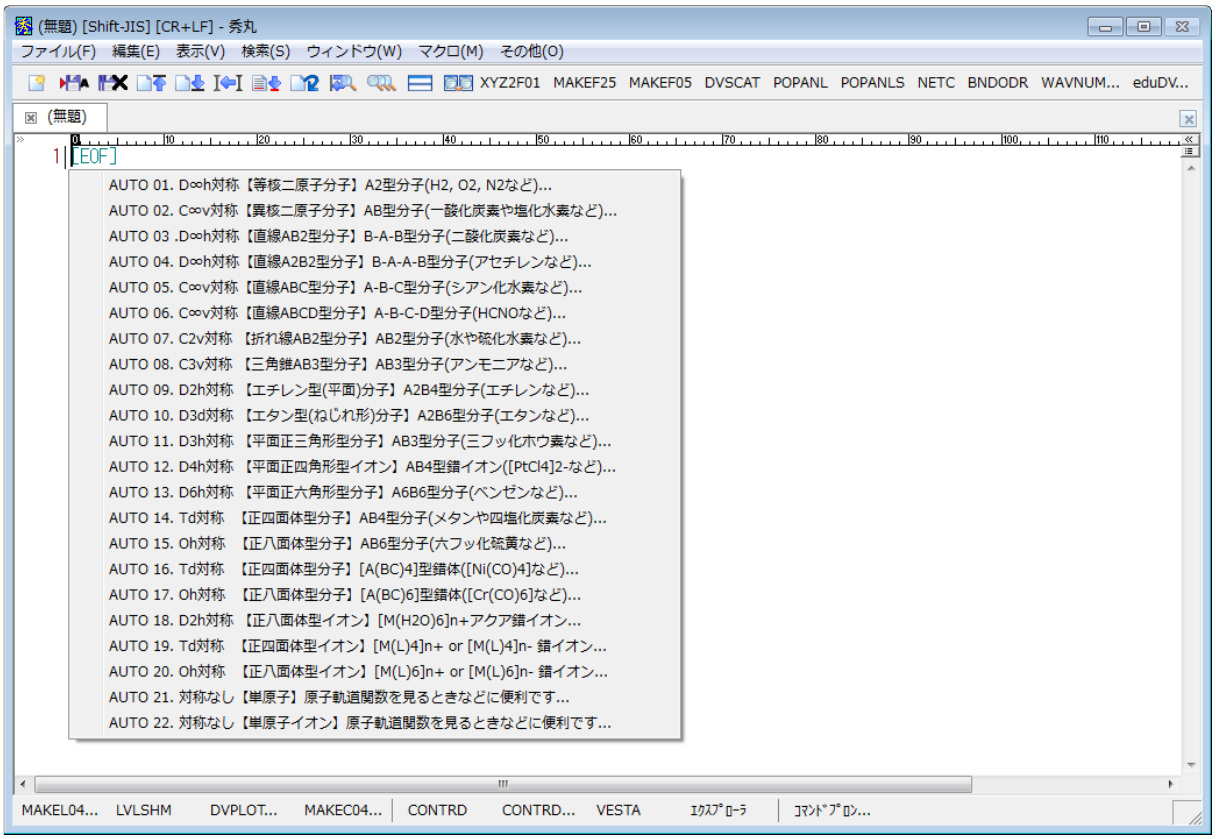


あるいは，キーボードで[Ctrl]キーを押しながら数字の[0]キーを押しても起動できます.

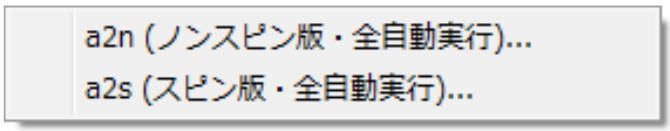
3. **eduDV** のプルダウンメニューの中から，一番上の行の **00. Automatic【データ自動入力】...** を選びます（PC の場合はマウスでクリック，タブレットの場合はタッチスクリーンでタップ）.



4. **Auto-eduDV** のプルダウンメニュー（属する点群（および分子の形）で分類された 22 種類のシステム）の中から，計算したい（**VESTA** で原子軌道，分子軌道を三次元可視化したい）原子，分子，イオンの属するシステムを選択します（本書 132～141 ページ参照）．



5. *No.* AUTO 01～20 のシステムの場合は，ノンスピン版（スピン分極を考慮しない DV−*Xα* 法分子軌道計算，通常はこちらを選択）か，スピン版（スピン分極を考慮した DV−*Xα* 法分子軌道計算，総電子数が奇数の場合，計算する化合物が常磁性であることが期待される場合など）のいずれかを選択します．下図は *No.* AUTO 01 の A_2 型，等核二原子分子（$D_{\infty h}$ 対称）を選択した場合に現れるメニューです．例えば，反磁性である窒素分子(N_2)を計算する場合は **a2n (ノンスピン版・全自動実行)...**を選べば良いですし，常磁性である酸素分子(O_2)を計算する場合は **a2s (スピン版・全自動実行)...**を選べば良いでしょう．



6. *No.* AUTO 01～20 のシステムの場合は，それぞれ以下のようなメニューが現れますので，計算したい分子，イオンを選びます．それぞれの分子，イオンの **F01**（原子の原子番号と座標，さらにイオン（錯イオン）の場合は必要に応じて初期電荷）を準備するために必要な数値情報（原子番号，酸化数，原子間距離，原子間角度など）は，これまでの **eduDV** の場合（例えば，本冊子の 128 ページを参照）はコマンドプロンプト画面が立ち上がり，会話式に数値をキーボード入力する必要がありました．しかし **Auto-eduDV** では，登録されている分子，イオンについては数値データをライブラリ化してシステムに内臓しており，自動的に使用されますので，ユーザはメニュ

ーから計算したい分子，イオンを選んだ後，キーボードからは何も入力する必要はありません（キーボードに一切触れる必要はありません）．

AUTO 01. $D_{\infty h}$ 対称【等核二原子分子】A_2 型分子(H_2, O_2, N_2 など)...

H2 水素分子 ノンスピン版
N2 窒素分子 ノンスピン版
O2 酸素分子 ノンスピン版
F2 フッ素分子 ノンスピン版
Cl2 塩素分子 ノンスピン版
Br2 臭素分子 ノンスピン版
I2 ヨウ素分子 ノンスピン版

H2 水素分子 スピン版
N2 窒素分子 スピン版
O2 酸素分子 スピン版
F2 フッ素分子 スピン版
Cl2 塩素分子 スピン版
Br2 臭素分子 スピン版
I2 ヨウ素分子 スピン版

AUTO 02. $C_{\infty v}$ 対称【異核二原子分子】AB 型分子(一酸化炭素や塩化水素など)...

HF フッ化水素分子 ノンスピン版
HCl 塩化水素分子 ノンスピン版
HBr 臭化水素分子 ノンスピン版
HI ヨウ化水素分子 ノンスピン版
CO 一酸化炭素分子 ノンスピン版
NO 一酸化窒素分子 ノンスピン版

HF フッ化水素分子 スピン版
HCl 塩化水素分子 スピン版
HBr 臭化水素分子 スピン版
HI ヨウ化水素分子 スピン版
CO 一酸化炭素分子 スピン版
NO 一酸化窒素分子 スピン版

AUTO 03 .$D_{\infty h}$ 対称【直線 AB_2 型分子】B−A−B 型分子(二酸化炭素など)...

CO2 二酸化炭素分子 ノンスピン版
CS2 二硫化炭素分子 ノンスピン版
KrF2 二フッ化クリプトン分子 ノンスピン版
XeF2 二フッ化キセノン分子 ノンスピン版
HgCl2 塩化水銀(II)分子（昇汞分子） ノンスピン版

CO2 二酸化炭素分子 スピン版
CS2 二硫化炭素分子 スピン版
KrF2 二フッ化クリプトン分子 スピン版
XeF2 二フッ化キセノン分子 スピン版
HgCl2 塩化水銀(II)分子（昇汞分子） スピン版

AUTO 04. $D_{\infty h}$ 対称【直線 A_2B_2 型分子】B−A−A−B 型分子(アセチレンなど)...

C2H2 アセチレン分子 ノンスピン版
Hg2I2 ヨウ化水銀(I)分子 ノンスピン版

C2H2 アセチレン分子 スピン版
Hg2I2 ヨウ化水銀(I)分子 スピン版

AUTO 05. $C_{\infty v}$ 対称【直線 ABC 型分子】A−B−C 型分子(シアン化水素など)...

HCN シアン化水素分子 ノンスピン版
FCN(NCF) フッ化シアン分子 ノンスピン版
ClCN 塩化シアン分子 ノンスピン版
BrCN 臭化シアン分子 ノンスピン版

HCN シアン化水素分子 スピン版
FCN(NCF) フッ化シアン分子 スピン版
ClCN 塩化シアン分子 スピン版
BrCN 臭化シアン分子 スピン版

AUTO 06. $C_{\infty v}$ 対称【直線 ABCD 型分子】A−B−C−D 型分子(HCNO など)...

HCNO 雷酸(fulminic acid)分子 ノンスピン版

HCNO 雷酸(fulminic acid)分子 スピン版

AUTO 07. C_{2v} 対称 【折れ線 AB_2 型分子】AB_2 型分子(水や硫化水素など)...

H2O 水分子 ノンスピン版
H2S 硫化水素分子 ノンスピン版
O3 オゾン分子 ノンスピン版
SO2 二酸化硫黄分子 ノンスピン版
NO2 二酸化窒素分子 ノンスピン版
SF2 二フッ化硫黄分子 ノンスピン版
SCl2 二塩化硫黄分子 ノンスピン版
ClO2 二酸化塩素分子 ノンスピン版
Cl2O 一酸化二塩素分子 ノンスピン版
GeCl2 塩化ゲルマニウム(II)分子 ノンスピン版
GeF2 フッ化ゲルマニウム(II)分子 ノンスピン版
OF2 二フッ化酸素分子 ノンスピン版
SeO2 二酸化セレン分子 ノンスピン版
SiF2 二フッ化ケイ素分子 ノンスピン版

H2O 水分子 スピン版
H2S 硫化水素分子 スピン版
O3 オゾン分子 スピン版
SO2 二酸化硫黄分子 スピン版
NO2 二酸化窒素分子 スピン版
SF2 二フッ化硫黄分子 スピン版
SCl2 二塩化硫黄分子 スピン版
ClO2 二酸化塩素分子 スピン版
Cl2O 一酸化二塩素分子 スピン版
GeCl2 塩化ゲルマニウム(II)分子 スピン版
GeF2 フッ化ゲルマニウム(II)分子 スピン版
OF2 二フッ化酸素分子 スピン版
SeO2 二酸化セレン分子 スピン版
SiF2 二フッ化ケイ素分子 スピン版

AUTO 08. C_{3v} 対称 【三角錐 AB_3 型分子】AB_3 型分子(アンモニアなど)...

NH3 アンモニア分子 ノンスピン版
PH3 ホスフィン(水素化リン)分子 ノンスピン版
AsH3 アルシン(水素化ヒ素)分子 ノンスピン版
SbH3 スチビン(水素化アンチモン)分子 ノンスピン版
NF3 三フッ化窒素分子 ノンスピン版
PF3 三フッ化リン分子 ノンスピン版
AsF3 三フッ化ヒ素分子 ノンスピン版
NCl3 三塩化窒素分子 ノンスピン版
PCl3 三塩化リン分子 ノンスピン版
AsCl3 三塩化ヒ素分子 ノンスピン版
SbCl3 三塩化アンチモン分子 ノンスピン版
BiCl3 三塩化ビスマス分子 ノンスピン版
PBr3 三臭化リン分子 ノンスピン版
AsBr3 三臭化ヒ素分子 ノンスピン版
BiBr3 三臭化ビスマス分子 ノンスピン版
AsI3 三ヨウ化ヒ素分子 ノンスピン版
PrI3 三ヨウ化プラセオジム分子 ノンスピン版
GdI3 三ヨウ化ガドリニウム分子 ノンスピン版
LuCl3 三塩化ルテチウム分子 ノンスピン版

NH3 アンモニア分子 スピン版
PH3 ホスフィン(水素化リン)分子 スピン版
AsH3 アルシン(水素化ヒ素)分子 スピン版
SbH3 スチビン(水素化アンチモン)分子 スピン版
NF3 三フッ化窒素分子 スピン版
PF3 三フッ化リン分子 スピン版
AsF3 三フッ化ヒ素分子 スピン版
NCl3 三塩化窒素分子 スピン版
PCl3 三塩化リン分子 スピン版
AsCl3 三塩化ヒ素分子 スピン版
SbCl3 三塩化アンチモン分子 スピン版
BiCl3 三塩化ビスマス分子 スピン版
PBr3 三臭化リン分子 スピン版
AsBr3 三臭化ヒ素分子 スピン版
BiBr3 三臭化ビスマス分子 スピン版
AsI3 三ヨウ化ヒ素分子 スピン版
PrI3 三ヨウ化プラセオジム分子 スピン版
GdI3 三ヨウ化ガドリニウム分子 スピン版
LuCl3 三塩化ルテチウム分子 スピン版

AUTO 09. D_{2h} 対称 【エチレン型(平面)分子】A_2B_4 型分子(エチレンなど)...

C2H4 エチレン分子 ノンスピン版
C2F4 テトラフルオロエチレン分子 ノンスピン版
C2Cl4 テトラクロロエチレン分子 ノンスピン版
N2O4 四酸化二窒素分子(気相) ノンスピン版
N2O4 四酸化二窒素分子(固相) ノンスピン版

C2H4 エチレン分子 スピン版
C2F4 テトラフルオロエチレン分子 スピン版
C2Cl4 テトラクロロエチレン分子 スピン版
N2O4 四酸化二窒素分子(気相) スピン版
N2O4 四酸化二窒素分子(固相) スピン版

AUTO 10. D_{3d} 対称 【エタン型(ねじれ形)分子】A_2B_6 型分子(エタンなど)...

C2H6 エタン分子 ノンスピン版
C2F6 ヘキサフルオロエタン分子 ノンスピン版

C2H6 エタン分子 スピン版
C2F6 ヘキサフルオロエタン分子 スピン版

AUTO 11. D_{3h} 対称 【平面正三角形型分子】AB_3 型分子(三フッ化ホウ素など)...

BF3 三フッ化ホウ素分子 ノンスピン版
BCl3 三塩化ホウ素分子 ノンスピン版
BBr3 三臭化ホウ素分子 ノンスピン版
BI3 三ヨウ化ホウ素分子 ノンスピン版

BF3 三フッ化ホウ素分子 スピン版
BCl3 三塩化ホウ素分子 スピン版
BBr3 三臭化ホウ素分子 スピン版
BI3 三ヨウ化ホウ素分子 スピン版

AUTO 12. D_{4h} 対称 【平面正四角形型イオン】AB_4 型錯イオン($[PtCl_4]^{2-}$など)...

[PtCl4]2- テトラクロリド白金(II)酸イオン ノンスピン版
[PdCl4]2- テトラクロリドパラジウム(II)酸イオン ノンスピン版
[AuCl4]- テトラクロリド金(III)酸イオン ノンスピン版

[PtCl4]2- テトラクロリド白金(II)酸イオン スピン版
[PdCl4]2- テトラクロリドパラジウム(II)酸イオン スピン版
[AuCl4]- テトラクロリド金(III)酸イオン スピン版

AUTO 13. D_{6h} 対称 【平面正六角形型分子】A_6B_6 型分子(ベンゼンなど)...

C6H6 ベンゼン分子 ノンスピン版
C6F6 ヘキサフルオロベンゼン分子 ノンスピン版
C6Cl6 ヘキサクロロベンゼン分子 ノンスピン版
C6Br6 ヘキサブロモベンゼン分子 ノンスピン版
C6I6 ヘキサヨードベンゼン分子 ノンスピン版

C6H6 ベンゼン分子 スピン版
C6F6 ヘキサフルオロベンゼン分子 スピン版
C6Cl6 ヘキサクロロベンゼン分子 スピン版
C6Br6 ヘキサブロモベンゼン分子 スピン版
C6I6 ヘキサヨードベンゼン分子 スピン版

コラム 秀丸エディタウィンドウの起動時のサイズについて

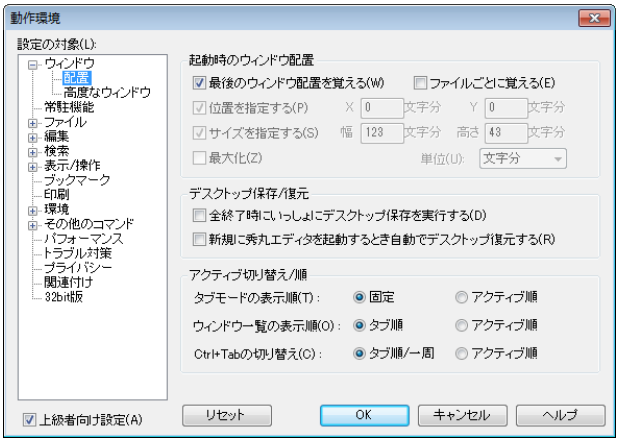
画面の比較的小さいタブレット PC では，秀丸エディタを起動したとき，右上の **eduDV** ボタンが見えないことがあります．

秀丸エディタのタイトルバーの，**その他** − **動作環境(E)…** − **ウィンドウ** − **配置** − **起動時のウィンドウ配置** で，

□最後のウィンドウ配置を覚える(W)

にチェック「レ」を入れて下さい．

次回の秀丸エディタ起動時に反映されます．



AUTO 14. T_d 対称　【正四面体型分子】AB_4 型分子(メタンや四塩化炭素など)...

- CH4 メタン分子 ノンスピン版
- CF4 四フッ化炭素分子 ノンスピン版
- CCl4 四塩化炭素分子 ノンスピン版
- CBr4 四臭化炭素分子 ノンスピン版
- SiH4 シラン(水素化ケイ素)分子 ノンスピン版
- SiF4 四フッ化ケイ素分子 ノンスピン版
- SiCl4 四塩化ケイ素分子 ノンスピン版
- TiCl4 四塩化チタン分子 ノンスピン版
- TiBr4 四臭化チタン分子 ノンスピン版
- VCl4 四塩化バナジウム分子 ノンスピン版
- GeH4 ゲルマン(水素化ゲルマニウム)分子 ノンスピン版
- GeCl4 四塩化ゲルマニウム分子 ノンスピン版
- GeBr4 四臭化ゲルマニウム分子 ノンスピン版
- ZrF4 四フッ化ジルコニウム分子 ノンスピン版
- ZrCl4 四塩化ジルコニウム分子 ノンスピン版
- RuO4 四酸化ルテニウム分子 ノンスピン版
- SnH4 スタンナン(四水素化スズ)分子 ノンスピン版
- SnCl4 四塩化スズ分子 ノンスピン版
- XeO4 四酸化キセノン分子 ノンスピン版
- HfCl4 四塩化ハフニウム分子 ノンスピン版
- OsO4 四酸化オスミウム分子 ノンスピン版
- ThF4 四フッ化トリウム分子 ノンスピン版
- ThCl4 四塩化トリウム分子 ノンスピン版

- CH4 メタン分子 スピン版
- CF4 四フッ化炭素分子 スピン版
- CCl4 四塩化炭素分子 スピン版
- CBr4 四臭化炭素分子 スピン版
- SiH4 シラン(水素化ケイ素)分子 スピン版
- SiF4 四フッ化ケイ素分子 スピン版
- SiCl4 四塩化ケイ素分子 スピン版
- TiCl4 四塩化チタン分子 スピン版
- TiBr4 四臭化チタン分子 スピン版
- VCl4 四塩化バナジウム分子 スピン版
- GeH4 ゲルマン(水素化ゲルマニウム)分子 スピン版
- GeCl4 四塩化ゲルマニウム分子 スピン版
- GeBr4 四臭化ゲルマニウム分子 スピン版
- ZrF4 四フッ化ジルコニウム分子 スピン版
- ZrCl4 四塩化ジルコニウム分子 スピン版
- RuO4 四酸化ルテニウム分子 スピン版
- SnH4 スタンナン(四水素化スズ)分子 スピン版
- SnCl4 四塩化スズ分子 スピン版
- XeO4 四酸化キセノン分子 スピン版
- HfCl4 四塩化ハフニウム分子 スピン版
- OsO4 四酸化オスミウム分子 スピン版
- ThF4 四フッ化トリウム分子 スピン版
- ThCl4 四塩化トリウム分子 スピン版

AUTO 15. O_h 対称　【正八面体型分子】AB_6 型分子(六フッ化硫黄など)...

- SF6 六フッ化硫黄分子 ノンスピン版
- SeF6 六フッ化セレン分子 ノンスピン版
- MoF6 六フッ化モリブデン分子 ノンスピン版
- TeF6 六フッ化テルル分子 ノンスピン版
- WF6 六フッ化タングステン分子 ノンスピン版
- ReF6 六フッ化レニウム分子 ノンスピン版
- OsF6 六フッ化オスミウム分子 ノンスピン版
- IrF6 六フッ化イリジウム分子 ノンスピン版
- UF6 六フッ化ウラン分子 ノンスピン版
- NpF6 六フッ化ネプツニウム分子 ノンスピン版
- PuF6 六フッ化プルトニウム分子 ノンスピン版

- SF6 六フッ化硫黄分子 スピン版
- SeF6 六フッ化セレン分子 スピン版
- MoF6 六フッ化モリブデン分子 スピン版
- TeF6 六フッ化テルル分子 スピン版
- WF6 六フッ化タングステン分子 スピン版
- ReF6 六フッ化レニウム分子 スピン版
- OsF6 六フッ化オスミウム分子 スピン版
- IrF6 六フッ化イリジウム分子 スピン版
- UF6 六フッ化ウラン分子 スピン版
- NpF6 六フッ化ネプツニウム分子 スピン版
- PuF6 六フッ化プルトニウム分子 スピン版

AUTO 16. T_d 対称　【正四面体型分子】$[A(BC)_4]$型錯体($[Ni(CO)_4]$など)...

- [Ni(CO)4] テトラカルボニルニッケル分子 ノンスピン版

- [Ni(CO)4] テトラカルボニルニッケル分子 スピン版

AUTO 17. O_h 対称　【正八面体型分子】[A(BC)$_6$]型錯体([Cr(CO)$_6$]など)...

[Cr(CO)6] ヘキサカルボニルクロム分子 ノンスピン版
[V(CO)6] ヘキサカルボニルバナジウム分子 ノンスピン版
[Mo(CO)6] ヘキサカルボニルモリブデン分子 ノンスピン版
[W(CO)6] ヘキサカルボニルタングステン分子 ノンスピン版

[Cr(CO)6] ヘキサカルボニルクロム分子 スピン版
[V(CO)6] ヘキサカルボニルバナジウム分子 スピン版
[Mo(CO)6] ヘキサカルボニルモリブデン分子 スピン版
[W(CO)6] ヘキサカルボニルタングステン分子 スピン版

AUTO 18. D_{2h} 対称　【正八面体型イオン】[M(H_2O)$_6$]$^{n+}$アクア錯イオン...

[Co(H2O)6]2+ ヘキサアクアコバルト(II)イオン ノンスピン版
[Co(H2O)6]3+ ヘキサアクアコバルト(III)イオン ノンスピン版
[Ni(H2O)6]2+ ヘキサアクアニッケル(II)イオン ノンスピン版
[Ti(H2O)6]3+ ヘキサアクアチタン(III)イオン ノンスピン版
[Ti(H2O)6]4+ ヘキサアクアチタン(IV)イオン ノンスピン版
[V(H2O)6]2+ ヘキサアクアバナジウム(II)イオン ノンスピン版
[V(H2O)6]3+ ヘキサアクアバナジウム(III)イオン ノンスピン版
[Cr(H2O)6]2+ ヘキサアクアクロム(II)イオン ノンスピン版
[Cr(H2O)6]3+ ヘキサアクアクロム(III)イオン ノンスピン版
[Mn(H2O)6]2+ ヘキサアクアマンガン(II)イオン ノンスピン版
[Fe(H2O)6]2+ ヘキサアクア鉄(II)イオン ノンスピン版
[Fe(H2O)6]3+ ヘキサアクア鉄(III)イオン ノンスピン版
[Zn(H2O)6]2+ ヘキサアクア亜鉛(II)イオン ノンスピン版
[Ru(H2O)6]3+ ヘキサアクアルテニウム(III)イオン ノンスピン版

[Co(H2O)6]2+ ヘキサアクアコバルト(II)イオン スピン版
[Co(H2O)6]3+ ヘキサアクアコバルト(III)イオン スピン版
[Ni(H2O)6]2+ ヘキサアクアニッケル(II)イオン スピン版
[Ti(H2O)6]3+ ヘキサアクアチタン(III)イオン スピン版
[Ti(H2O)6]4+ ヘキサアクアチタン(IV)イオン スピン版
[V(H2O)6]2+ ヘキサアクアバナジウム(II)イオン スピン版
[V(H2O)6]3+ ヘキサアクアバナジウム(III)イオン スピン版
[Cr(H2O)6]2+ ヘキサアクアクロム(II)イオン スピン版
[Cr(H2O)6]3+ ヘキサアクアクロム(III)イオン スピン版
[Mn(H2O)6]2+ ヘキサアクアマンガン(II)イオン スピン版
[Fe(H2O)6]2+ ヘキサアクア鉄(II)イオン スピン版
[Fe(H2O)6]3+ ヘキサアクア鉄(III)イオン スピン版
[Zn(H2O)6]2+ ヘキサアクア亜鉛(II)イオン スピン版
[Ru(H2O)6]3+ ヘキサアクアルテニウム(III)イオン スピン版

AUTO 19. T_d 対称　【正四面体型イオン】$[M(L)_4]^{n+}$ or $[M(L)_4]^{n-}$ 錯イオン...

[CoCl4]2- テトラクロリドコバルト(II)酸イオン ノンスピン版
[CoBr4]2- テトラブロミドコバルト(II)酸イオン ノンスピン版
[CoI4]2- テトラヨージドコバルト(II)酸イオン ノンスピン版

[CoCl4]2- テトラクロリドコバルト(II)酸イオン スピン版
[CoBr4]2- テトラブロミドコバルト(II)酸イオン スピン版
[CoI4]2- テトラヨージドコバルト(II)酸イオン スピン版

AUTO 20. O_h 対称　【正八面体型イオン】$[M(L)_6]^{n+}$ or $[M(L)_6]^{n-}$ 錯イオン...

[CrF6]3- ヘキサフルオリドクロム(III)酸イオン ノンスピン版
[CrCl6]3- ヘキサクロリドクロム(III)酸イオン ノンスピン版
[CrBr6]3- ヘキサブロミドクロム(III)酸イオン ノンスピン版
[CrI6]3- ヘキサヨージドクロム(III)酸イオン ノンスピン版

[CrF6]3- ヘキサフルオリドクロム(III)酸イオン スピン版
[CrCl6]3- ヘキサクロリドクロム(III)酸イオン スピン版
[CrBr6]3- ヘキサブロミドクロム(III)酸イオン スピン版
[CrI6]3- ヘキサヨージドクロム(III)酸イオン スピン版

7. *No.* AUTO 21 のシステム（単原子）の場合は，以下のようなメニューが現れますので，計算したい原子を選びます．これまでの **eduDV** の場合（本冊子の 141 ページ）はコマンドプロンプト画面が立ち上がり，会話式に計算したい単原子の原子番号をキーボード入力する必要がありましたが，**Auto-eduDV** では，原子番号 1 番から 94 番の元素メニューが現れますので，ユーザはメニューから計算したい元素を選ぶだけで，その元素の単原子の電子状態が計算できます．キーボードに一度も触れることなく，**VESTA** で周期表の各元素の原子軌道を三次元可視化できます．

なお，*No.* AUTO 21 のシステム（単原子）はノンスピン版のみ用意されており，スピン版は用意されていません．

AUTO 21. 対称なし【単原子】原子軌道関数を見るときなどに便利です...

まずは以下のメニューで，原子番号が 01～20，21～40，41～60，61～80，81～94，の中からいずれかを選択して下さい．現在は原子番号 94 番のプルトニウムまでが登録されていますが，今後の **eduDV** (**Auto-eduDV**)のバージョンアップにより，95 番のアメリシウム，96 番のキュリウム以降，111 番のレントゲニウム(Rg)，112 番のコペルニシウム(Cn)，原子番号 114 番のフレロビウム(Fl)，116 番のリバモリウム(Lv)などにも対応していく予定です．

（2022.9.9 原子番号 118 番のオガネソンまで現在は対応しています）

atom 原子番号 01～20 (ノンスピン版・全自動実行)...
atom 原子番号 21～40 (ノンスピン版・全自動実行)...
atom 原子番号 41～60 (ノンスピン版・全自動実行)...
atom 原子番号 61～80 (ノンスピン版・全自動実行)...
atom 原子番号 81～94 (ノンスピン版・全自動実行)...

1 H Hydrogen 水素 1s1
2 He Helium ヘリウム 1s2
3 Li Lithium リチウム [He] 2s1
4 Be Beryllium ベリリウム [He] 2s2
5 B Boron ホウ素 [He] 2s2 2p1
6 C Carbon 炭素 [He] 2s2 2p2
7 N Nitrogen 窒素 [He] 2s2 2p3
8 O Oxygen 酸素 [He] 2s2 2p4
9 F Fluorine フッ素 [He] 2s2 2p5
10 Ne Neon ネオン [He] 2s2 2p6
11 Na Sodium ナトリウム [Ne] 3s1
12 Mg Magnesium マグネシウム [Ne] 3s2
13 Al Aluminium アルミニウム [Ne] 3s2 3p1
14 Si Silicon ケイ素 [Ne] 3s2 3p2
15 P Phosphorus リン [Ne] 3s2 3p3
16 S Sulfur 硫黄 [Ne] 3s2 3p4
17 Cl Chlorine 塩素 [Ne] 3s2 3p5
18 Ar Argon アルゴン [Ne] 3s2 3p6
19 K Potassium カリウム [Ar] 4s1
20 Ca Calcium カルシウム [Ar] 4s2

21 Sc Scandium スカンジウム [Ar] 3d1 4s2
22 Ti Titanium チタン [Ar] 3d2 4s2
23 V Vanadium バナジウム [Ar] 3d3 4s2
24 Cr Chromium クロム [Ar] 3d5 4s1
25 Mn Manganese マンガン [Ar] 3d5 4s2
26 Fe Iron 鉄 [Ar] 3d6 4s2
27 Co Cobalt コバルト [Ar] 3d7 4s2
28 Ni Nickel ニッケル [Ar] 3d8 4s2
29 Cu Copper 銅 [Ar] 3d10 4s1
30 Zn Zinc 亜鉛 [Ar] 3d10 4s2
31 Ga Gallium ガリウム [Ar] 3d10 4s2 4p1
32 Ge Germanium ゲルマニウム [Ar] 3d10 4s2 4p2
33 As Arsenic ヒ素 [Ar] 3d10 4s2 4p3
34 Se Selenium セレン [Ar] 3d10 4s2 4p4
35 Br Bromine 臭素 [Ar] 3d10 4s2 4p5
36 Kr Krypton クリプトン [Ar] 3d10 4s2 4p6
37 Rb Rubidium ルビジウム [Kr] 5s1
38 Sr Strontium ストロンチウム [Kr] 5s2
39 Y Yttrium イットリウム [Kr] 4d1 5s2
40 Zr Zirconium ジルコニウム [Kr] 4d2 5s2

41 Nb Niobium ニオブ [Kr] 4d4 5s1
42 Mo Molybdenum モリブデン [Kr] 4d5 5s1
43 Tc Technetium テクネチウム [Kr] 4d5 5s2
44 Ru Ruthenium ルテニウム [Kr] 4d7 5s1
45 Rh Rhodium ロジウム [Kr] 4d8 5s1
46 Pd Palladium パラジウム [Kr] 4d10
47 Ag Silver 銀 [Kr] 4d10 5s1
48 Cd Cadmium カドミウム [Kr] 4d10 5s2
49 In Indium インジウム [Kr] 4d10 5s2 5p1
50 Sn Tin スズ [Kr] 4d10 5s2 5p2
51 Sb Antimony アンチモン [Kr] 4d10 5s2 5p3
52 Te Tellurium テルル [Kr] 4d10 5s2 5p4
53 I Iodine ヨウ素 [Kr] 4d10 5s2 5p5
54 Xe Xenon キセノン [Kr] 4d10 5s2 5p6
55 Cs Caesium セシウム [Xe] 6s1
56 Ba Barium バリウム [Xe] 6s2
57 La Lanthanum ランタン [Xe] 5d1 6s2
58 Ce Cerium セリウム [Xe] 4f1 5d1 6s2
59 Pr Praseodymium プラセオジム [Xe] 4f3 6s2
60 Nd Neodymium ネオジム [Xe] 4f4 6s2

61 Pm Promethium プロメチウム [Xe] 4f5 6s2
62 Sm Samarium サマリウム [Xe] 4f6 6s2
63 Eu Europium ユウロピウム [Xe] 4f7 6s2
64 Gd Gadolinium ガドリニウム [Xe] 4f7 5d1 6s2
65 Tb Terbium テルビウム [Xe] 4f9 6s2
66 Dy Dysprosium ジスプロシウム [Xe] 4f10 6s2
67 Ho Holmium ホルミウム [Xe] 4f11 6s2
68 Er Erbium エルビウム [Xe] 4f12 6s2
69 Tm Thulium ツリウム [Xe] 4f13 6s2
70 Yb Ytterbium イッテルビウム [Xe] 4f14 6s2
71 Lu Lutetiu ルテチウム [Xe] 4f14 5d1 6s2
72 Hf Hafnium ハフニウム [Xe] 4f14 5d2 6s2
73 Ta Tantalum タンタル [Xe] 4f14 5d3 6s2
74 W Tungsten タングステン [Xe] 4f14 5d4 6s2
75 Re Rhenium レニウム [Xe] 4f14 5d5 6s2
76 Os Osmium オスミウム [Xe] 4f14 5d6 6s2
77 Ir Iridium イリジウム [Xe] 4f14 5d7 6s2
78 Pt Platinum 白金 [Xe] 4f14 5d9 6s1
79 Au Gold 金 [Xe] 4f14 5d10 6s1
80 Hg Mercury 水銀 [Xe] 4f14 5d10 6s2

81 Tl Thallium タリウム [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p1
82 Pb Lead 鉛 [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p2
83 Bi Bismuth ビスマス [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p3
84 Po Polonium ポロニウム [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p4
85 At Astatine アスタチン [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p5
86 Rn Radon ラドン [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p6
87 Fr Francium フランシウム [Rn] 7s1
88 Ra Radium ラジウム [Rn] 7s2
89 Ac Actinium アクチニウム [Rn] 6d1 7s2
90 Th Thorium トリウム [Rn] 6d2 7s2
91 Pa Protactinium プロトアクチニウム [Rn] 5f2 6d1 7s2
92 U Uranium ウラン [Rn] 5f3 6d1 7s2
93 Np Neptunium ネプツニウム [Rn] 5f4 6d1 7s2
94 Pu Plutonium プルトニウム [Rn] 5f6 7s2

VESTA の Edit ― Edit Data ― Volumetric Data... で **＊. sca** ファイルを読み込んで原子軌道の等値表面を三次元可視化しますが，その時の原子軌道のファイル名(**＊. sca** の**＊**)について，本冊子の 142～144 ページに説明がありますので，参照して下さい．

8. *No.* AUTO 22 のシステム（単原子イオン）では，まず元素を選び，次に酸化数を選んで下さい．

AUTO 22. 対称なし【単原子イオン】原子軌道関数を見るときなどに便利です...

最初に以下のメニューで，原子番号が 01～20，21～40，41～60，61～80，81～94，の中からいずれかを選択して下さい．

ion 原子番号 01～20 (ノンスピン版・全自動実行)...
ion 原子番号 21～40 (ノンスピン版・全自動実行)...
ion 原子番号 41～60 (ノンスピン版・全自動実行)...
ion 原子番号 61～80 (ノンスピン版・全自動実行)...
ion 原子番号 81～94 (ノンスピン版・全自動実行)...

次に，以下のメニューの中から，計算したい元素を選んで下さい．

1 H Hydrogen 水素...
2 He Helium ヘリウム...
3 Li Lithium リチウム...
4 Be Beryllium ベリリウム...
5 B Boron ホウ素...
6 C Carbon 炭素...
7 N Nitrogen 窒素...
8 O Oxygen 酸素...
9 F Fluorine フッ素...
10 Ne Neon ネオン...
11 Na Sodium ナトリウム...
12 Mg Magnesium マグネシウム...
13 Al Aluminium アルミニウム...
14 Si Silicon ケイ素...
15 P Phosphorus リン...
16 S Sulfur 硫黄...
17 Cl Chlorine 塩素...
18 Ar Argon アルゴン...
19 K Potassium カリウム...
20 Ca Calcium カルシウム...

41 Nb Niobium ニオブ...
42 Mo Molybdenum モリブデン...
43 Tc Technetium テクネチウム...
44 Ru Ruthenium ルテニウム...
45 Rh Rhodium ロジウム...
46 Pd Palladium パラジウム...
47 Ag Silver 銀...
48 Cd Cadmium カドミウム...
49 In Indium インジウム...
50 Sn Tin スズ...
51 Sb Antimony アンチモン...
52 Te Tellurium テルル...
53 I Iodine ヨウ素...
54 Xe Xenon キセノン...
55 Cs Caesium セシウム...
56 Ba Barium バリウム...
57 La Lanthanum ランタン...
58 Ce Cerium セリウム...
59 Pr Praseodymium プラセオジム...
60 Nd Neodymium ネオジム...

21 Sc Scandium スカンジウム...
22 Ti Titanium チタン...
23 V Vanadium バナジウム...
24 Cr Chromium クロム...
25 Mn Manganese マンガン...
26 Fe Iron 鉄...
27 Co Cobalt コバルト...
28 Ni Nickel ニッケル...
29 Cu Copper 銅...
30 Zn Zinc 亜鉛...
31 Ga Gallium ガリウム...
32 Ge Germanium ゲルマニウム...
33 As Arsenic ヒ素...
34 Se Selenium セレン...
35 Br Bromine 臭素...
36 Kr Krypton クリプトン...
37 Rb Rubidium ルビジウム...
38 Sr Strontium ストロンチウム...
39 Y Yttrium イットリウム...
40 Zr Zirconium ジルコニウム...

61 Pm Promethium プロメチウム...
62 Sm Samarium サマリウム...
63 Eu Europium ユウロピウム...
64 Gd Gadolinium ガドリニウム...
65 Tb Terbium テルビウム...
66 Dy Dysprosium ジスプロシウム...
67 Ho Holmium ホルミウム...
68 Er Erbium エルビウム...
69 Tm Thulium ツリウム...
70 Yb Ytterbium イッテルビウム...
71 Lu Lutetiu ルテチウム...
72 Hf Hafnium ハフニウム...
73 Ta Tantalum タンタル...
74 W Tungsten タングステン...
75 Re Rhenium レニウム...
76 Os Osmium オスミウム...
77 Ir Iridium イリジウム...
78 Pt Platinum 白金...
79 Au Gold 金...
80 Hg Mercury 水銀...

81 Tl Thallium タリウム...
82 Pb Lead 鉛...
83 Bi Bismuth ビスマス...
84 Po Polonium ポロニウム...
85 At Astatine アスタチン...
86 Rn Radon ラドン...
87 Fr Francium フランシウム...
88 Ra Radium ラジウム...
89 Ac Actinium アクチニウム...
90 Th Thorium トリウム...
91 Pa Protactinium プロトアクチニウム...
92 U Uranium ウラン...
93 Np Neptunium ネプツニウム...
94 Pu Plutonium プルトニウム...

なお，*No.* AUTO 22 のシステム（単原子イオン）はノンスピン版のみ用意されており，スピン版は用意されていません．

最後に，計算したい酸化数を選択します．各元素とも，化学便覧 基礎編 改訂５版（丸善）に掲載されている酸化数のみ選択できます．メニューに掲載されていない酸化状態を計算したい場合は，従来の **IONN**（本冊子の 141 ページ）を起動し，コマンドプロンプト画面での会話形式で酸化数を入力して下さい．なお，全ての元素メニューにおいて，酸化数 0 の状態の計算（*No.* AUTO 21 のシステム（単原子）と同じ計算）が選択できます．

H - (酸化数:-I) 【ionn】
H (酸化数: 0) 【atomn】

He (酸化数: 0) 【atomn】

Li (酸化数: 0) 【atomn】
Li + (酸化数: I) 【ionn】

Be (酸化数: 0) 【atomn】
Be 2+ (酸化数: II) 【ionn】

B (酸化数: 0) 【atomn】
B 3+ (酸化数: III) 【ionn】

C (酸化数: 0) 【atomn】
C 2+ (酸化数: II) 【ionn】
C 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

N 3- (酸化数: -III) 【ionn】
N (酸化数: 0) 【atomn】
N + (酸化数: I) 【ionn】
N 2+ (酸化数: II) 【ionn】
N 3+ (酸化数: III) 【ionn】
N 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
N 5+ (酸化数: V) 【ionn】

O 2- (酸化数: -II) 【ionn】
O (酸化数: 0) 【atomn】

F - (酸化数: -I) 【ionn】
F (酸化数: 0) 【atomn】

Ne (酸化数: 0) 【atomn】

Na (酸化数: 0) 【atomn】
Na + (酸化数: I) 【ionn】

Mg (酸化数: 0) 【atomn】
Mg 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Al (酸化数: 0) 【atomn】
Al 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Si (酸化数: 0) 【atomn】
Si 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

P 3- (酸化数: -III) 【ionn】
P (酸化数: 0) 【atomn】
P 3+ (酸化数: III) 【ionn】
P 5+ (酸化数: V) 【ionn】

S 2- (酸化数: -II) 【ionn】
S (酸化数: 0) 【atomn】
S 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
S 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Cl - (酸化数: -I) 【ionn】
Cl (酸化数: 0) 【atomn】
Cl + (酸化数: I) 【ionn】
Cl 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Cl 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Cl 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Cl 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Cl 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Ar (酸化数: 0) 【atomn】

K (酸化数: 0) 【atomn】
K + (酸化数: I) 【ionn】

Ca (酸化数: 0) 【atomn】
Ca 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Sc (酸化数: 0) 【atomn】
Sc 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Ti (酸化数: 0) 【atomn】
Ti 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ti 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ti 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

V (酸化数: 0) 【atomn】
V 2+ (酸化数: II) 【ionn】
V 3+ (酸化数: III) 【ionn】
V 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
V 5+ (酸化数: V) 【ionn】

Cr (酸化数: 0) 【atomn】
Cr 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Cr 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Cr 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Cr 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Cr 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Mn (酸化数: 0) 【atomn】
Mn 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Mn 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Mn 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Mn 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Mn 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Mn 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Fe (酸化数: 0) 【atomn】
Fe 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Fe 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Fe 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Fe 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Co (酸化数: 0) 【atomn】
Co + (酸化数: I) 【ionn】
Co 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Co 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Co 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Ni (酸化数: 0) 【atomn】
Ni + (酸化数: I) 【ionn】
Ni 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ni 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ni 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Cu (酸化数: 0) 【atomn】
Cu + (酸化数: I) 【ionn】
Cu 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Cu 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Zn (酸化数: 0) 【atomn】
Zn 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Ga (酸化数: 0) 【atomn】
Ga 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ga 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Ge (酸化数: 0) 【atomn】
Ge 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ge 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

As -3 (酸化数: -III) 【ionn】
As (酸化数: 0) 【atomn】
As +3 (酸化数: III) 【ionn】
As +5 (酸化数: V) 【ionn】

Se 2- (酸化数: -II) 【ionn】
Se (酸化数: 0) 【atomn】
Se 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Se 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Br - (酸化数: -I) 【ionn】
Br (酸化数: 0) 【atomn】
Br + (酸化数: I) 【ionn】
Br 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Br 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Br 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Kr (酸化数: 0) 【atomn】

Rb (酸化数: 0) 【atomn】
Rb + (酸化数: I) 【ionn】

Sr (酸化数: 0) 【atomn】
Sr 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Y (酸化数: 0) 【atomn】
Y 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Zr (酸化数: 0) 【atomn】
Zr 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Zr 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Zr 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Nb (酸化数: 0) 【atomn】
Nb 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Nb 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Nb 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Nb 5+ (酸化数: V) 【ionn】

Mo (酸化数: 0) 【atomn】
Mo + (酸化数: I) 【ionn】
Mo 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Mo 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Mo 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Mo 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Mo 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Tc (酸化数: 0) 【atomn】
Tc 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Tc 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Tc 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Tc 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Tc 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Tc 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Ru (酸化数: 0) 【atomn】
Ru 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ru 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ru 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Ru 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Ru 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Ru 7+ (酸化数: VII) 【ionn】
Ru 8+ (酸化数: VIII) 【ionn】

Rh (酸化数: 0) 【atomn】
Rh + (酸化数: I) 【ionn】
Rh 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Rh 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Rh 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Rh 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Pd (酸化数: 0) 【atomn】
Pd 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Pd 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Pd 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Ag (酸化数: 0) 【atomn】
Ag + (酸化数: I) 【ionn】
Ag 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ag 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Cd (酸化数: 0) 【atomn】
Cd 2+ (酸化数: II) 【ionn】

In (酸化数: 0) 【atomn】
In 2+ (酸化数: II) 【ionn】
In 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Sn (酸化数: 0) 【atomn】
Sn 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Sn 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Sb 3- (酸化数: -III) 【ionn】
Sb (酸化数: 0) 【atomn】
Sb 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Sb 5+ (酸化数: V) 【ionn】

Te 2- (酸化数: -II) 【ionn】
Te (酸化数: 0) 【atomn】
Te 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Te 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

I - (酸化数: -I) 【ionn】
I (酸化数: 0) 【atomn】
I + (酸化数: I) 【ionn】
I 3+ (酸化数: III) 【ionn】
I 5+ (酸化数: V) 【ionn】
I 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Xe (酸化数: 0) 【atomn】
Xe 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Xe 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Xe 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Xe 8+ (酸化数: VIII) 【ionn】

Cs (酸化数: 0) 【atomn】
Cs + (酸化数: I) 【ionn】

Ba (酸化数: 0) 【atomn】
Ba 2+ (酸化数: II) 【ionn】

La (酸化数: 0) 【atomn】
La 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Ce (酸化数: 0) 【atomn】
Ce 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ce 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Pr (酸化数: 0) 【atomn】
Pr 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Pr 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Nd (酸化数: 0) 【atomn】
Nd 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Pm (酸化数: 0) 【atomn】
Pm 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Sm (酸化数: 0) 【atomn】
Sm 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Sm 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Eu (酸化数: 0) 【atomn】
Eu 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Eu 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Gd (酸化数: 0) 【atomn】
Gd 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Tb (酸化数: 0) 【atomn】
Tb 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Tb 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Dy (酸化数: 0) 【atomn】
Dy 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Ho (酸化数: 0) 【atomn】
Ho 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Er (酸化数: 0) 【atomn】
Er 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Tm (酸化数: 0) 【atomn】
Tm 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Yb (酸化数: 0) 【atomn】
Yb 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Yb 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Lu (酸化数: 0) 【atomn】
Lu 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Hf (酸化数: 0) 【atomn】
Hf 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Hf 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Hf 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Ta (酸化数: 0) 【atomn】
Ta 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ta 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ta 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Ta 5+ (酸化数: V) 【ionn】

W (酸化数: 0) 【atomn】
W + (酸化数: I) 【ionn】
W 2+ (酸化数: II) 【ionn】
W 3+ (酸化数: III) 【ionn】
W 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
W 5+ (酸化数: V) 【ionn】
W 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Re (酸化数: 0) 【atomn】
Re + (酸化数: I) 【ionn】
Re 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Re 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Re 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Re 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Re 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Re 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Os (酸化数: 0) 【atomn】
Os 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Os 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Os 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Os 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Os 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Os 7+ (酸化数: VII) 【ionn】
Os 8+ (酸化数: VIII) 【ionn】

Ir (酸化数: 0) 【atomn】
Ir + (酸化数: I) 【ionn】
Ir 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Ir 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Ir 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Pt (酸化数: 0) 【atomn】
Pt 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Pt 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Pt 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Pt 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Pt 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Au (酸化数: 0) 【atomn】
Au + (酸化数: I) 【ionn】
Au 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Au 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Hg (酸化数: 0) 【atomn】
Hg + (酸化数: I) 【ionn】
Hg 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Tl (酸化数: 0) 【atomn】
Tl + (酸化数: I) 【ionn】
Tl 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Pb (酸化数: 0) 【atomn】
Pb 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Pb 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

Bi (酸化数: 0) 【atomn】
Bi 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Bi 5+ (酸化数: V) 【ionn】

Po 2- (酸化数: -II) 【ionn】
Po (酸化数: 0) 【atomn】
Po 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Po 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Po 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

At - (酸化数: -I) 【ionn】
At (酸化数: 0) 【atomn】
At + (酸化数: I) 【ionn】
At 3+ (酸化数: III) 【ionn】
At 5+ (酸化数: V) 【ionn】
At 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Rn (酸化数: 0) 【atomn】

Fr (酸化数: 0) 【atomn】
Fr + (酸化数: I) 【ionn】

Ra (酸化数: 0) 【atomn】
Ra 2+ (酸化数: II) 【ionn】

Ac (酸化数: 0) 【atomn】
Ac 3+ (酸化数: III) 【ionn】

Th (酸化数: 0) 【atomn】
Th 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Th 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Th 4+ (酸化数: IV) 【ionn】

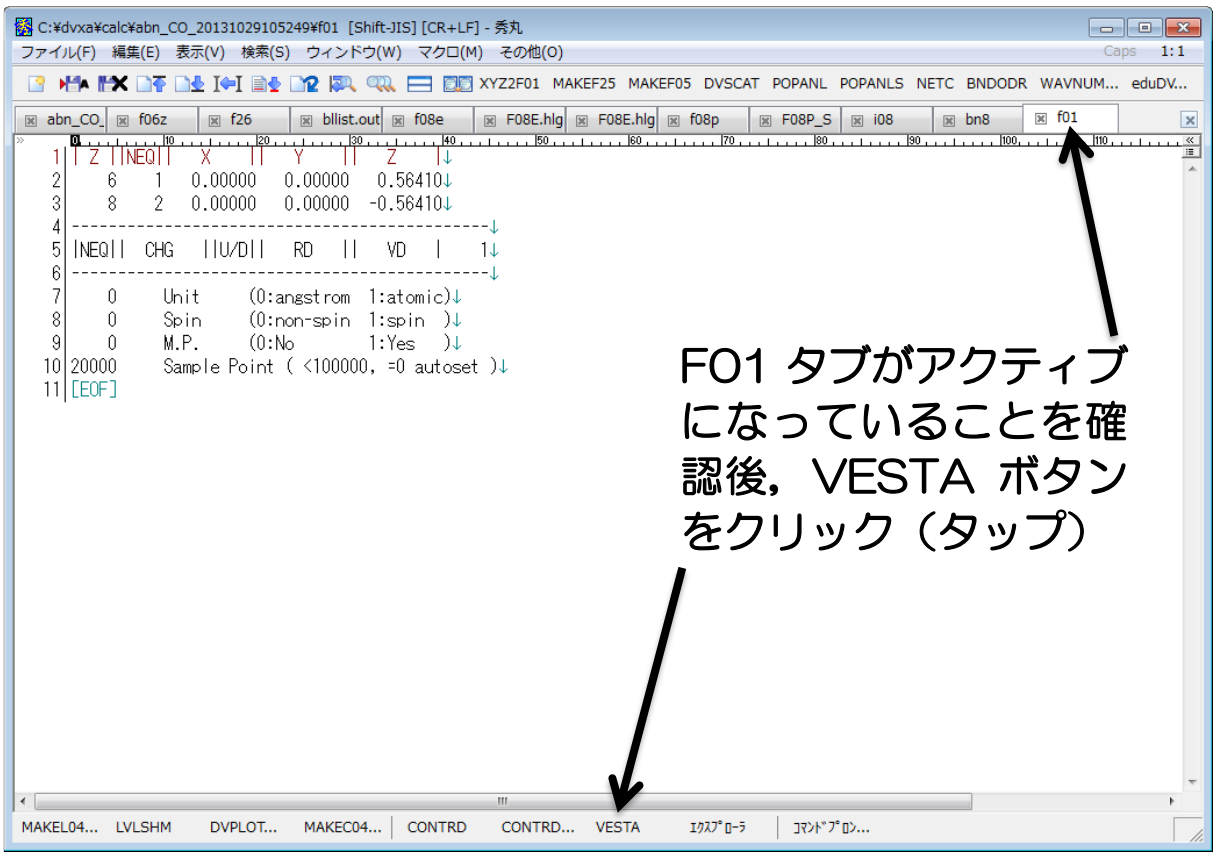
Pa (酸化数: 0) 【atomn】
Pa 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Pa 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Pa 5+ (酸化数: V) 【ionn】

U (酸化数: 0) 【atomn】
U 2+ (酸化数: II) 【ionn】
U 3+ (酸化数: III) 【ionn】
U 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
U 5+ (酸化数: V) 【ionn】
U 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

Np (酸化数: 0) 【atomn】
Np 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Np 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Np 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Np 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Np 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Np 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

Pu (酸化数: 0) 【atomn】
Pu 2+ (酸化数: II) 【ionn】
Pu 3+ (酸化数: III) 【ionn】
Pu 4+ (酸化数: IV) 【ionn】
Pu 5+ (酸化数: V) 【ionn】
Pu 6+ (酸化数: VI) 【ionn】
Pu 7+ (酸化数: VII) 【ionn】

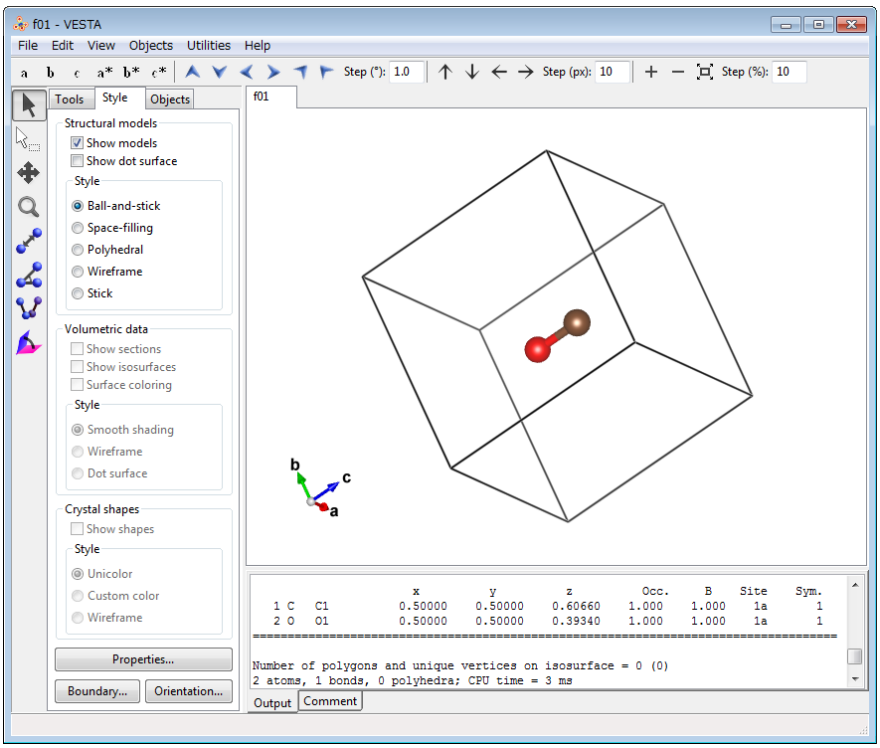
9. *No.* AUTO 01～AUTO 22 のいずれかの原子，分子，イオンを計算後は，秀丸エディタにおいて，**F01** が表に来ています（アクティブタブになっています）．原子軌道，分子軌道を三次元可視化したい場合は，秀丸エディタ画面の右下にある**[VESTA]**ボタンをクリック（タップ）して下さい（下の画像は，*No.* AUTO 02. $C_{\infty v}$ 対称【異核二原子分子】で一酸化炭素分子（ノンスピン版）を実行した後の場面です）．



VESTA を起動した後は本冊子の 15 ページに説明のある状態と同じ状態です．

タイトルメニューの Edit から，プルダウンメニューで，Edit Data を選び，Volumetric Data…を選びます．

Isosurface の Import ボタンをクリック（タップ）し，描きたい波動関数ファイル（***. sca**）を選んで，**[OK]**，**[Apply]**，**[OK]**をクリック（タップ）して下さい．



10. **Auto-eduDV** 実行後の秀丸エディタでは，タブをクリックすることにより，以下のファイルを見ることができます（*No.* AUTO 02. $C_{\infty v}$ 対称【異核二原子分子】で一酸化炭素分子（ノンスピン版）を実行した後の例）.

左より順に,

・**abn_CO_time.txt**　**SCAT** の開始時刻と終了時刻が書いてあります．異なるパソコンで，DV−$X\alpha$ 分子軌道計算の速度を比較するときなどに便利です.

・**f06z**　**SCAT** が収束するまでに繰り返した計算の数および収束の状況が書いてあります．計算が収束した場合は，1 行目に“Converged”と書かれてあり，収束に至らなかった場合は書かれていません.

・**f26**　**SCAT** 計算後の（最終的な）一般入力ファイルです．**SCAT** は **f05** を読んで，**f26** を書き出します．**SCAT** 計算を継続する場合は **f26** を **f05** にコピーして次の計算が始まります（本冊子 92 ページを参照）.

・**bllist.out**　主な原子間距離が出力されています. **Auto-eduDV** ではライブラリ登録されている原子番号，酸化数，原子間距離，原子間角度などが自動的に使われています．モデル内の原子間距離が何Åになっているか，このファイルで確認して下さい．原子間距離や角度は，**VESTA** で確認することもできます.

・**f08e**　分子軌道（または原子軌道）のエネルギー準位表です. 分子軌道（または原子軌道）の名前，エネルギー固有値（単位：リュドベリ，ハートリー，電子ボルト），軌道に入っている電子数が記されています.

・**F08E.hlgap**　HOMO（最高被占軌道）と LUMO（最低空軌道）のエネルギー差（ギャップ）が，エネルギー(eV)，波数(cm^{-1})，波長(nm)で出力されています．なお，電子が占有している一番上の軌道を HOMO，その一つ上の空軌道を LUMO とプログラムは判断していますので，必ずしも HOMO が定員いっぱいの電子で満たされているとは限りません.

・**F08E.hlgaps**　HOMO 近傍の（HOMO 自身も含めた）3 つの占有軌道（HOMO, HOMO−1, HOMO−2）と，LUMO 近傍の（LUMO 自身も含めた）2 つの空軌道（LUMO, LUMO+1）のエネルギー差（ギャップ）を全て計算し，エネルギー(eV)，波数(cm^{-1})，波長(nm)で出力されています.

・**f08p**　それぞれの分子軌道が，どの原子のどの原子軌道が何パーセントから成っているのか，成分の内訳が記載してあります．数字に 100 をかけるとパーセントになります. どの原子が何番かという番号(NEQ)は，**F01** を参照して下さい.

・**F08P_S**　f08p の情報に加え，磁気量子数まで区別した原子軌道の割合（対称軌道ファイル **F25** の該当行の先頭の項の磁気量子数が表示されます），原子軌道間の Overlap Population が出力されています.

・i08　　各原子のネットチャージ（純電荷）が記されています．分子の場合は，各原子のネットチャージを足し合わせれば，合計はゼロになります（分子全体の電荷はゼロという意味）．イオンの場合は，各原子のネットチャージを体合わせると，イオンの電荷になります．

・bn8　　分子（イオン）内における各原子間の有効共有結合電荷が記されています．Auto-eduDV では，その分子（イオン）の属する点群に従って symOrb（または MAKEF25）で予め作成しておいた対称軌道が使われます．F01 で同じ原子種番号（NEQ）の原子同士の有効共有結合電荷は出力されません（値がゼロになっています）．例えば *No.* AUTO 04. $D_{\infty h}$ 対称【直線 A_2B_2 型分子】でアセチレン（H−C≡C−H）分子を計算（ノンスピン版）した場合，二つの炭素原子が NEQ = 1，二つの水素原子が NEQ = 2 となっており，炭素－水素間の有効共有結合電荷は 1.5383÷2 ≒ 0.769 と bn8 に出力されていますが，同じ NEQ = 1 の炭素原子間の有効共有結合電荷は値がゼロとなっており出力されていません．もし炭素原子間の有効共有結合電荷を知りたい場合は，C:¥dvxa¥calc の下に新しいフォルダを作り，F01 のみをコピーし，F01 の各原子の NEQ の番号を，全部違う番号に書き換えます（1, 1, 2, 2 となっているのを，1, 2, 3, 4 に書き換える）．そして秀丸エディタを新規に立ち上げ，新規に作ったフォルダ中の F01 のみを開き，MAKEF05SCFS を実行して F05 を作成し，DVSCAT を実行して計算を収束させます．そして BNDODR を実行して bn8 を見ると，今度は２つの炭素原子が別々の原子種（異なる NEQ 番号）として計算されましたので，炭素間の有効共有結合電荷 1.744 が出力されています．

・f01　　原子番号，原子種番号(NEQ)，原子座標，初期電荷などの情報が書かれています．F01 がアクティブな状態で VESTA ボタンをクリック（タップ）すれば，すぐに VESTA で分子（イオン）の形状を棒球表示で三次元可視化できます．

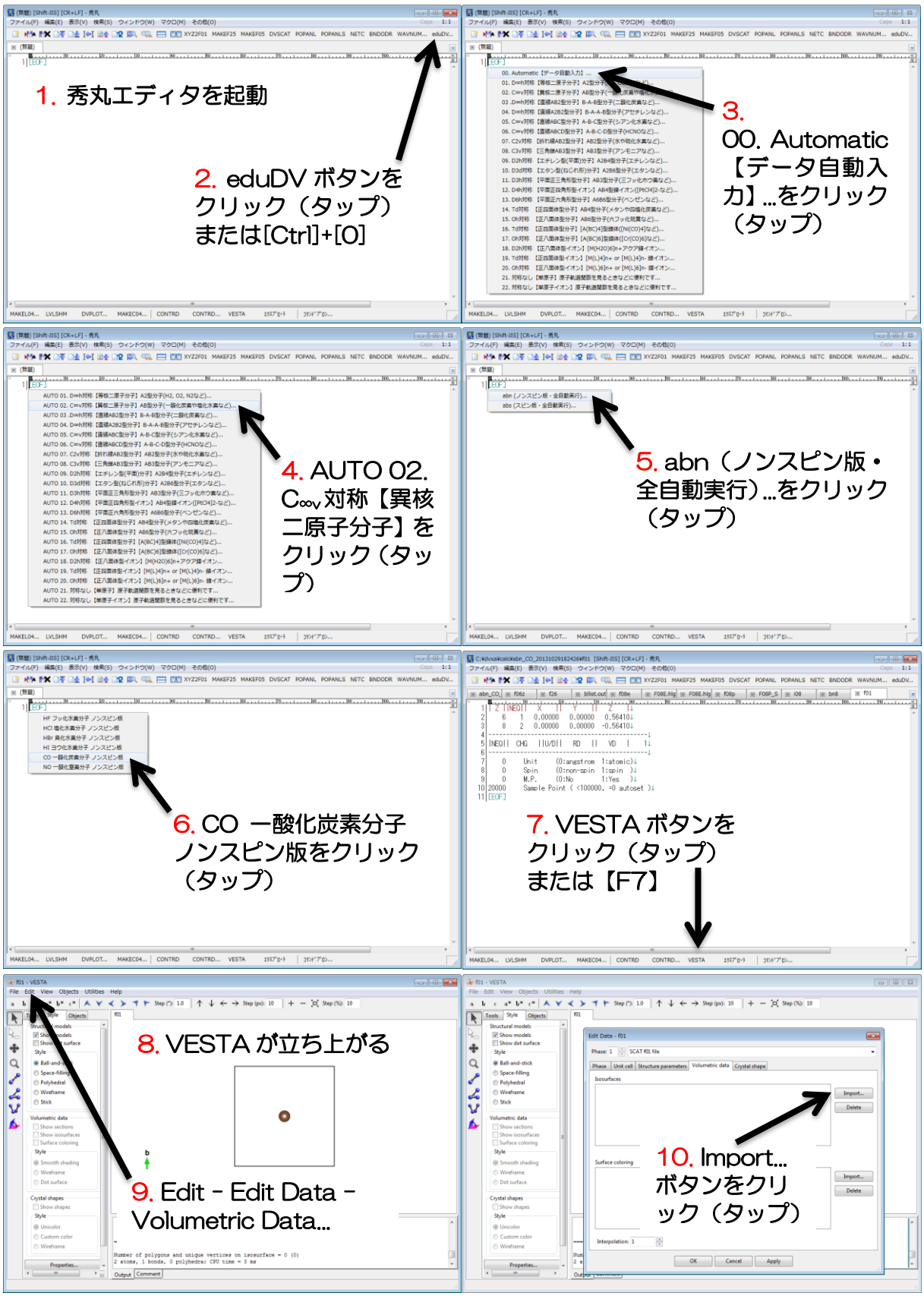
以上のファイルが秀丸エディタでオープンされており，タブをクリックすることによって切り替えて表示できます．なお，*No.* AUTO 21【単原子】および *No.* AUTO 22【単原子イオン】の場合は，必要がないため，bllist.out，F08E.hlgap，F08E.hlgaps，f08p，F08P_S，bn8 は出力されません．

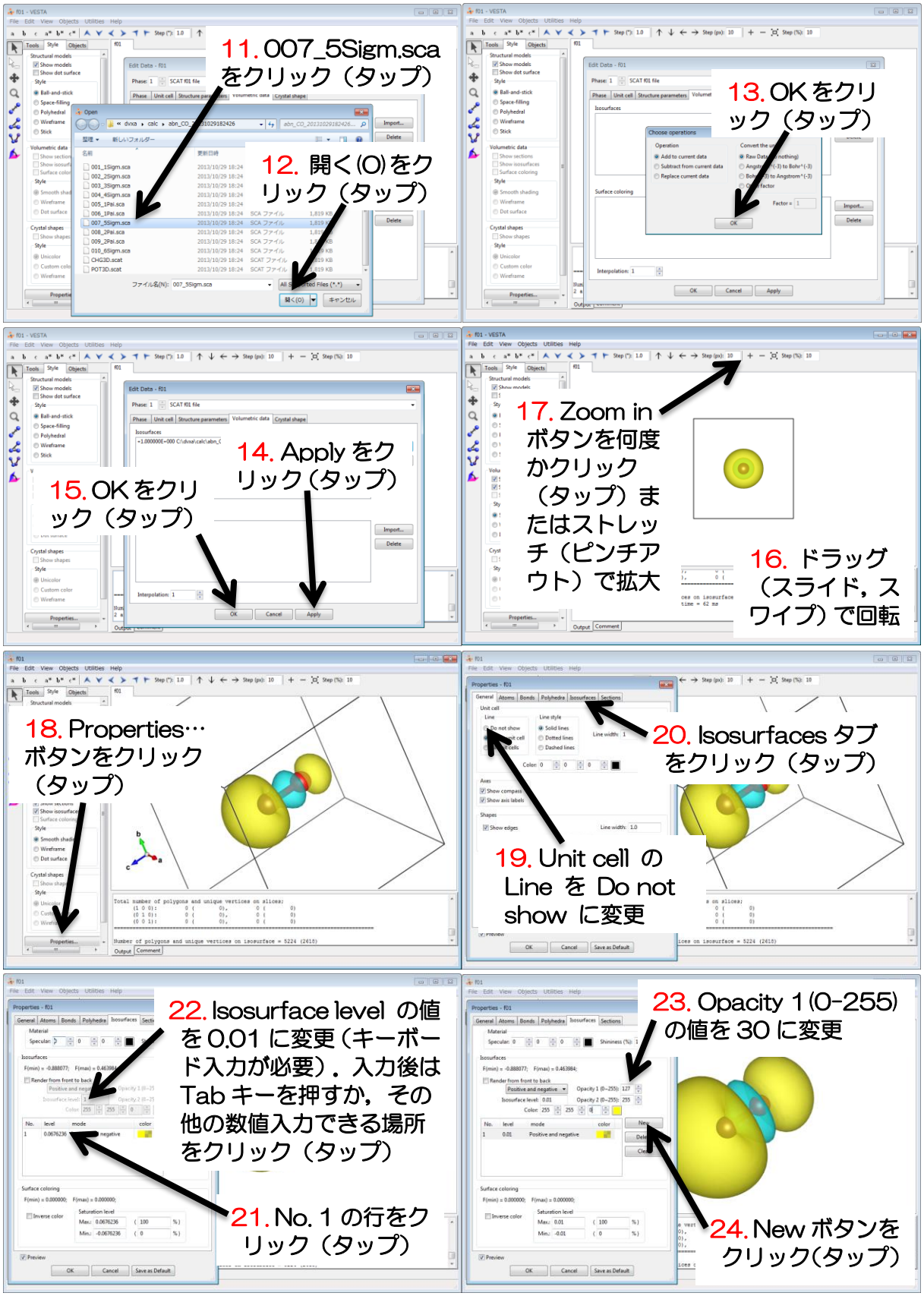
No. AUTO 21【単原子】および *No.* AUTO 22【単原子イオン】で出力されるのは，以下の 6 つのファイルです（例えば，水素原子の場合）．

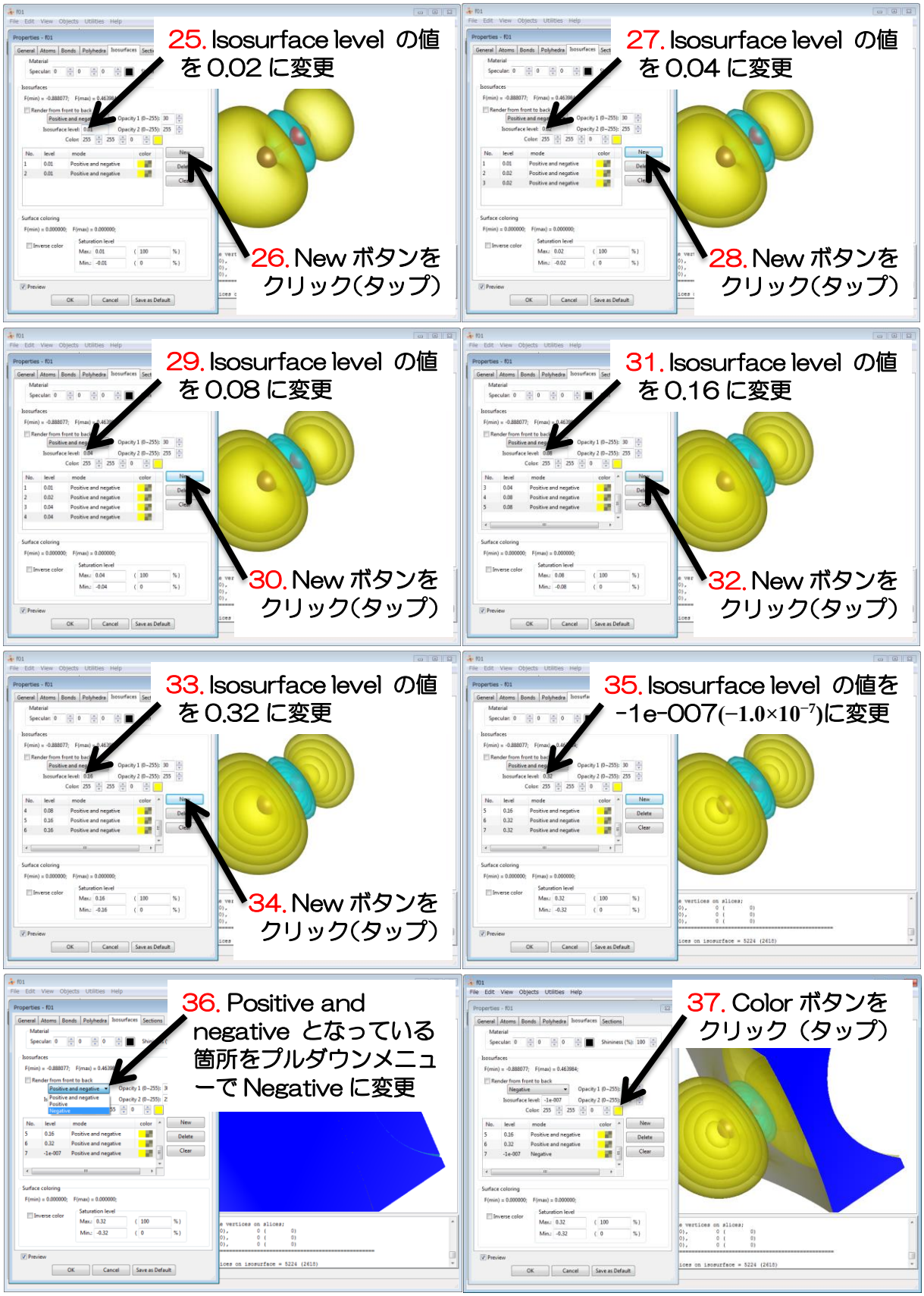
・atomn_H_time.txt	・f06z	・f26
・f08e	・i08	・f01

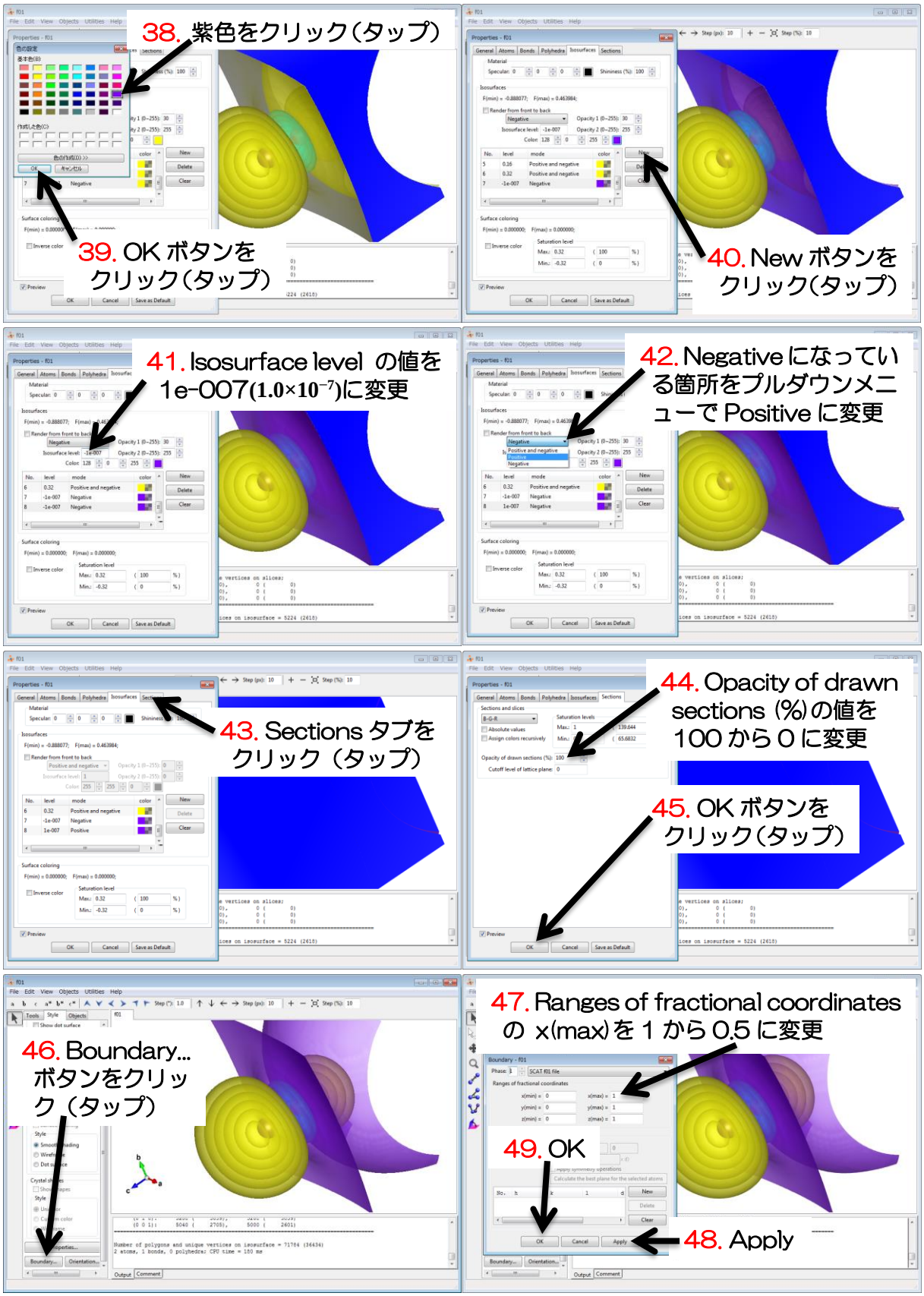
3. Auto-eduDV 機能実装版教育用分子軌道計算システム eduDV の授業での活用例

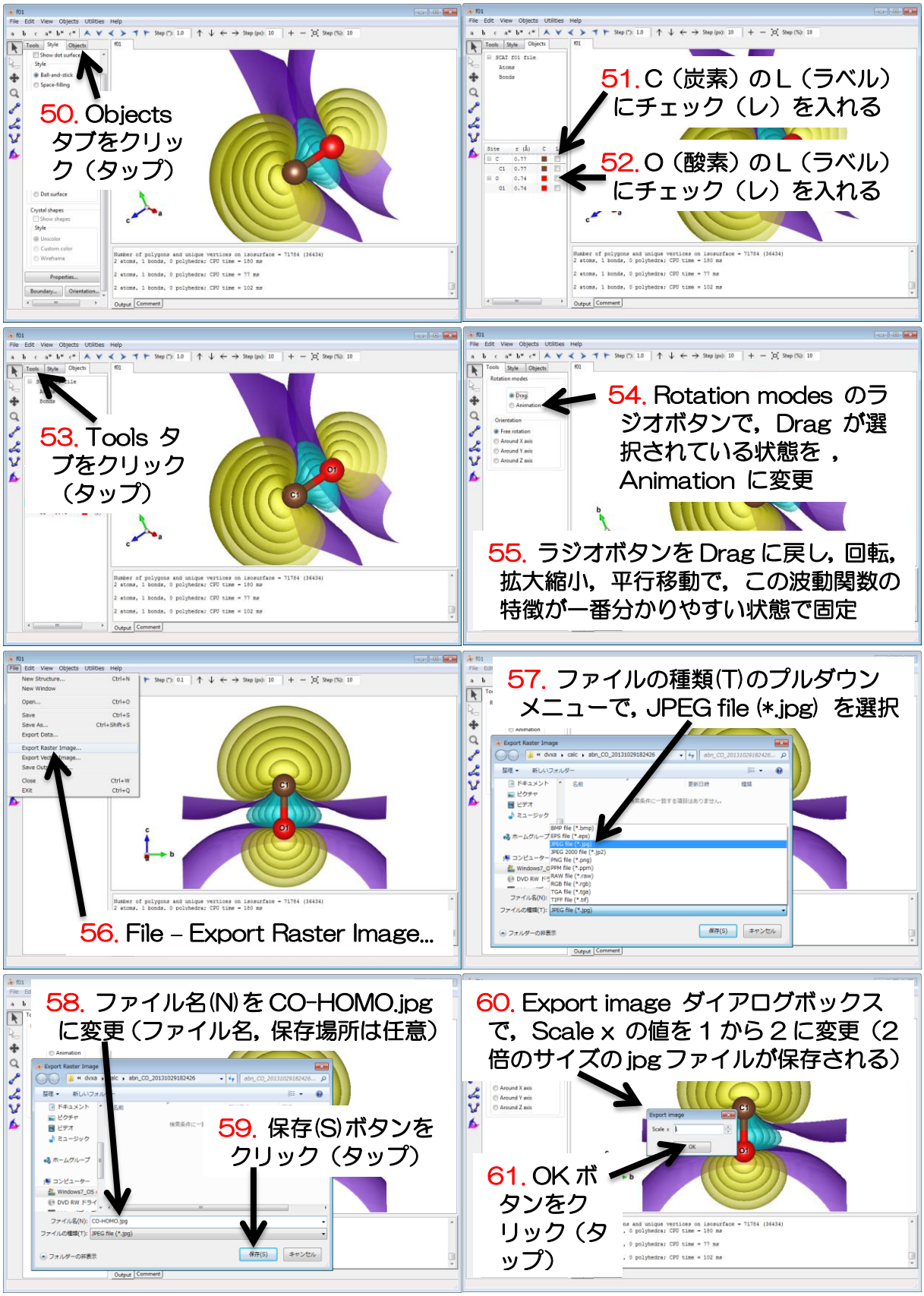
1. 一酸化炭素分子の HOMO(5σ軌道)を VESTA で三次元可視化する.

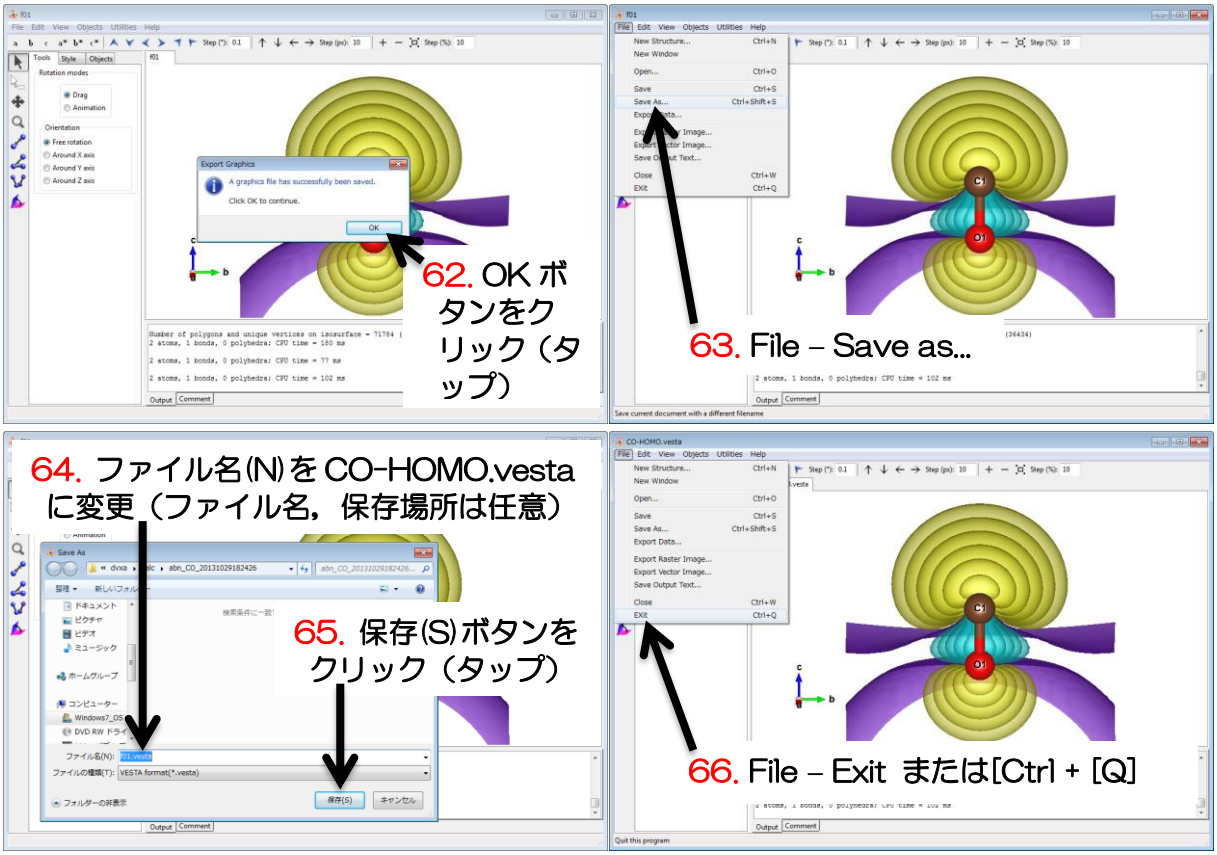


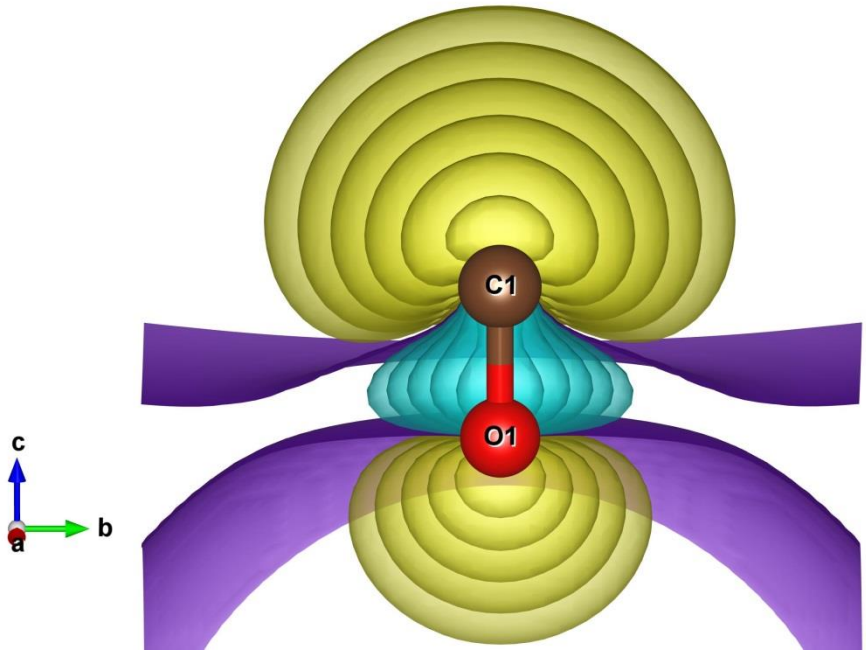

11. 007_5Sigm.sca をクリック（タップ）
12. 開く(O)をクリック（タップ）
13. OK をクリック（タップ）
14. Apply をクリック（タップ）
15. OK をクリック（タップ）
17. Zoom in ボタンを何度かクリック（タップ）またはストレッチ（ピンチアウト）で拡大
16. ドラッグ（スライド，スワイプ）で回転
18. Properties… ボタンをクリック（タップ）
20. Isosurfaces タブをクリック（タップ）
19. Unit cell の Line を Do not show に変更
22. Isosurface level の値を 0.01 に変更（キーボード入力が必要）．入力後は Tab キーを押すか，その他の数値入力できる場所をクリック（タップ）
21. No. 1 の行をクリック（タップ）
23. Opacity 1 (0-255) の値を 30 に変更
24. New ボタンをクリック(タップ)


25. Isosurface level の値を 0.02 に変更
26. New ボタンをクリック(タップ)
27. Isosurface level の値を 0.04 に変更
28. New ボタンをクリック(タップ)
29. Isosurface level の値を 0.08 に変更
30. New ボタンをクリック(タップ)
31. Isosurface level の値を 0.16 に変更
32. New ボタンをクリック(タップ)
33. Isosurface level の値を 0.32 に変更
34. New ボタンをクリック(タップ)
35. Isosurface level の値を -1e-007(-1.0×10^{-7})に変更
36. Positive and negative となっている箇所をプルダウンメニューで Negative に変更
37. Color ボタンをクリック（タップ）


38. 紫色をクリック(タップ)
39. OK ボタンをクリック(タップ)
40. New ボタンをクリック(タップ)
41. Isosurface level の値を 1e-007(1.0×10⁻⁷)に変更
42. Negative になっている箇所をプルダウンメニューで Positive に変更
43. Sections タブをクリック (タップ)
44. Opacity of drawn sections (%)の値を 100 から 0 に変更
45. OK ボタンをクリック(タップ)
46. Boundary... ボタンをクリック (タップ)
47. Ranges of fractional coordinates の x(max)を 1 から 0.5 に変更
48. Apply
49. OK


50. Objects タブをクリック（タップ）
51. C（炭素）のL（ラベル）にチェック（レ）を入れる
52. O（酸素）のL（ラベル）にチェック（レ）を入れる
53. Tools タブをクリック（タップ）
54. Rotation modes のラジオボタンで，Drag が選択されている状態を，Animation に変更
55. ラジオボタンを Drag に戻し，回転，拡大縮小，平行移動で，この波動関数の特徴が一番分かりやすい状態で固定
56. File – Export Raster Image...
57. ファイルの種類(T)のプルダウンメニューで，JPEG file (*.jpg) を選択
58. ファイル名(N)を CO-HOMO.jpg に変更（ファイル名，保存場所は任意）
59. 保存(S)ボタンをクリック（タップ）
60. Export image ダイアログボックスで，Scale x の値を 1 から 2 に変更（2 倍のサイズの jpg ファイルが保存される）
61. OK ボタンをクリック（タップ）



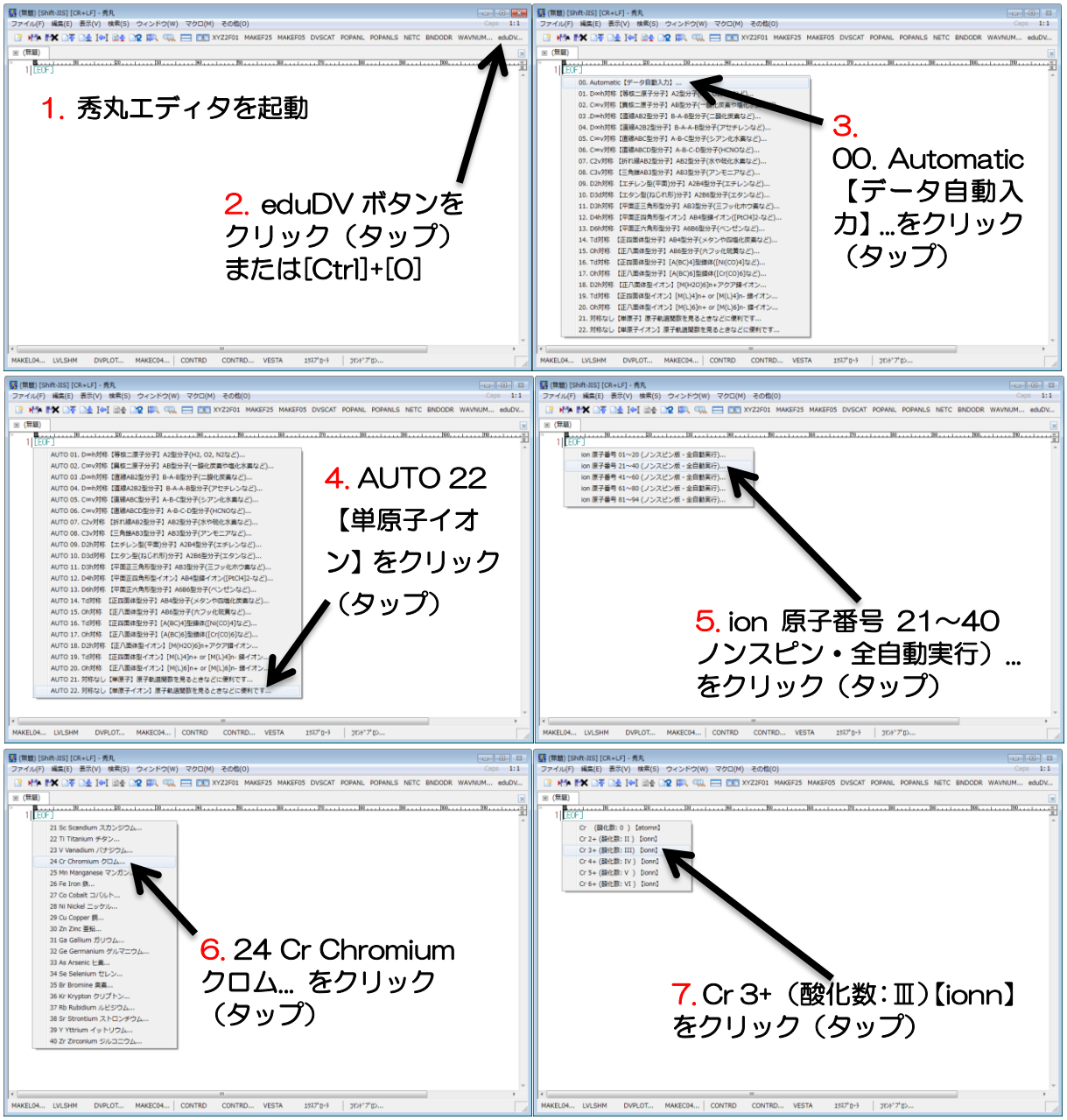


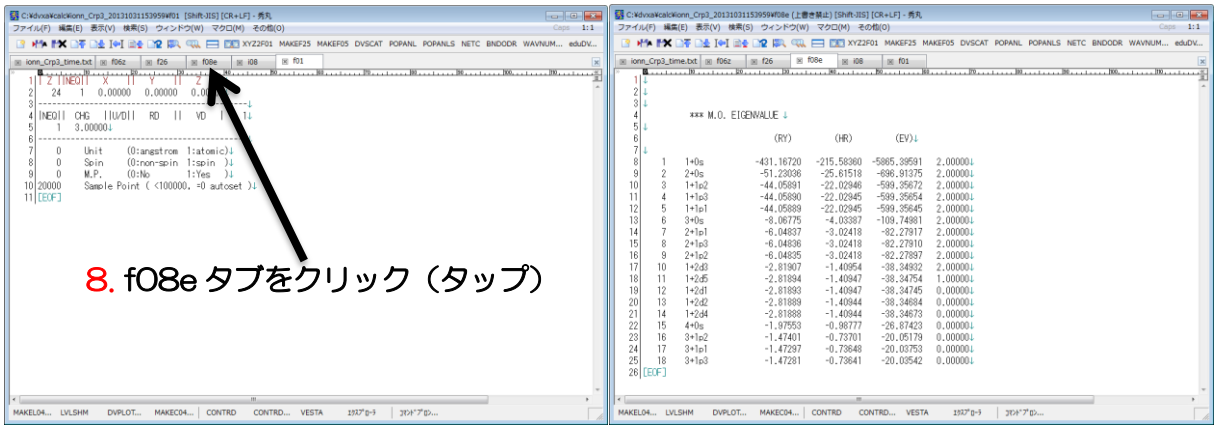
上の図が，保存した CO-HOMO.jpg です．一酸化炭素(CO)分子の電子状態を $C_{\infty v}$ の対称軌道を使って **DV−Xα 分子軌道法**で計算し，HOMO(5σ軌道)を **VESTA** で可視化しました．

本冊子 20 ページの図 3, 33 ページの W5 の図と比較して下さい．等値表面を複数枚描ける **VESTA** の機能を用いて，Isosurface level = 0.01, 0.02, 0.04, 0.08, 0.16, 0.32 の 6 種類の等値表面を描きました．また，Isosurface level = $\pm 1.0\times10^{-7}$ という 2 種類の等値表面を異なる色（上記例では紫色）で描くことにより，本来 Isosurface level = 0 である節(node)の等値表面を描くことにも成功しています（Isosurface level = 0 という等値表面は美しく描くことが困難であるため，限りな

く 0 に近いプラス側とマイナス側の小さな値で同じ色の等値表面を描いて挟み込み，近似的に節面を三次元可視化している）．節面の三次元可視化は DV−$X\alpha$ 研究協会 spd 部会で開発された技法です．三次元に分布している波動関数の異なる位相の境界面を立体的に表現しており，原子軌道，分子軌道の形状を深く理解するのに役立ちます．また，波動関数 6 種類の等値曲面および節面を描いた図を Y−Z 面で切断することにより，等値曲面図は等値曲面の内部が見えにくい（不透明度の値を小さくすれば内部は見やすくなりますが，等値曲面自身は淡くなって見えにくくなってしまいます）という問題を解決しています．切断面は二次元で描いた波動関数の等高線図と一致しており，普段よく目にする波動関数の等高線図の意味が三次元的に良く理解できます．

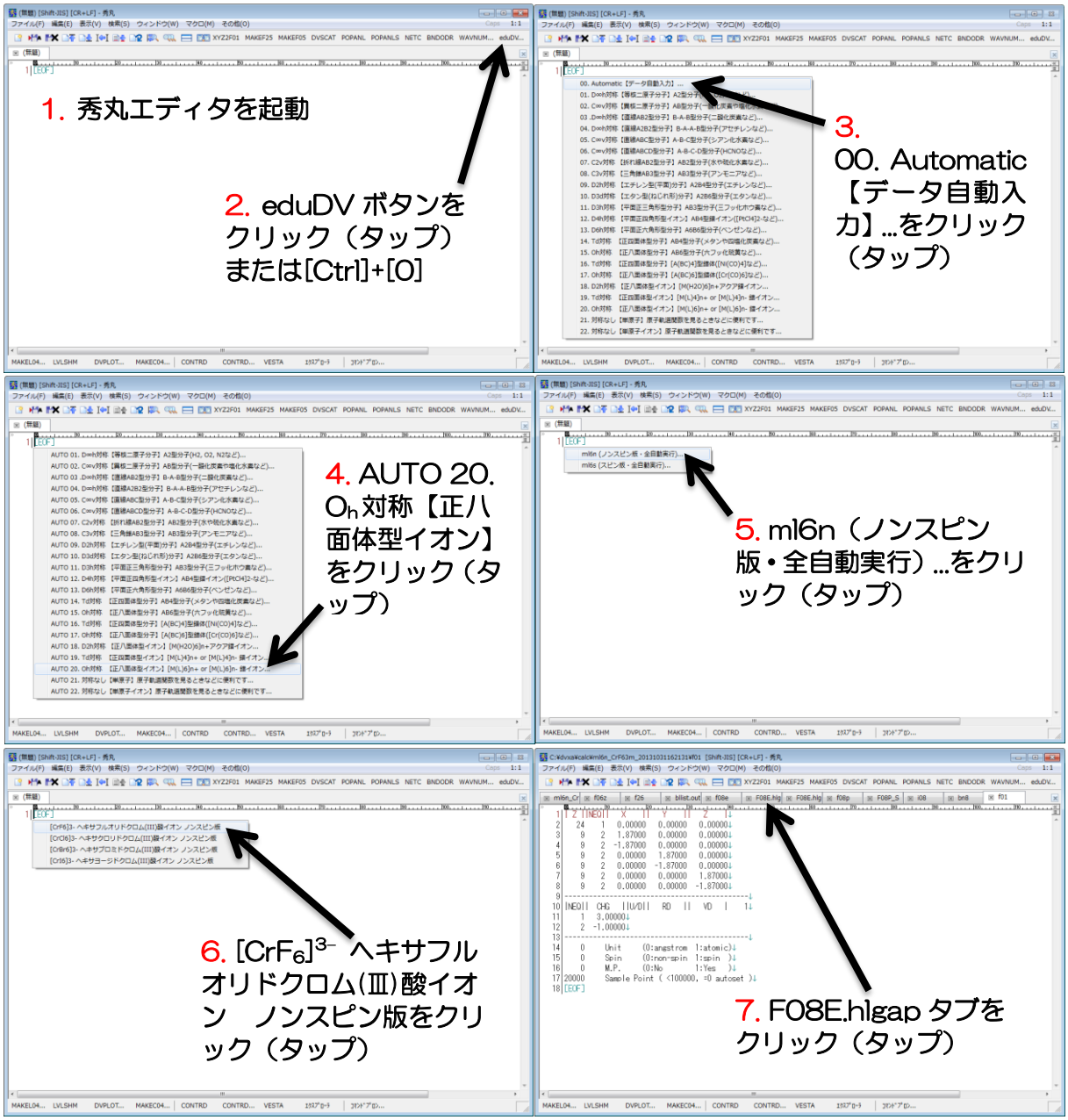
2. 「Cr^{3+}の d 電子の数はいくつか」という問いに，Auto-eduDV で答える．

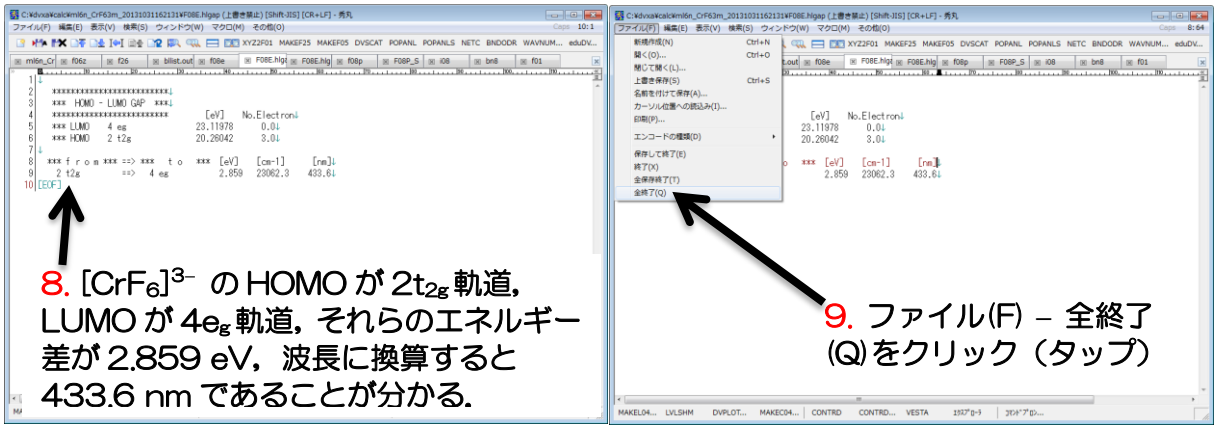




f08e を見れば，Cr^{3+}の電子配置が $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^3$ であること，すなわち Cr^{3+}の d 電子数は三つであることがすぐに分かります．それぞれの原子軌道のエネルギー固有値(単位：Ry, Hr, eV)も出力されていますので，エネルギー準位の大小関係も定量的に把握することができます．

3．６配位正八面体型錯体を **Auto-eduDV** で計算し，槌田の分光化学系列に従っているか確かめる．





同様の操作を，$[CrCl_6]^{3-}$ ヘキサクロリドクロム(Ⅲ)酸イオン，$[CrBr_6]^{3-}$ ヘキサブロミドクロム(Ⅲ)酸イオン，$[CrI_6]^{3-}$ ヘキサヨージドクロム(Ⅲ)酸イオンについても行うと，計算結果は以下のようになります.

錯イオン	HOMO	LUMO	Δ_o(エネルギー)	Δ_o(波長)
$[Cr^{III}F_6]^{3-}$	$2t_{2g}$	$4e_g$	2.859 eV	433.6 nm
$[Cr^{III}Cl_6]^{3-}$	$3t_{2g}$	$6e_g$	1.637 eV	757.5 nm
$[Cr^{III}Br_6]^{3-}$	$6t_{2g}$	$10e_g$	1.351 eV	918.0 nm
$[Cr^{III}I_6]^{3-}$	$9t_{2g}$	$14e_g$	1.234 eV	1004.7 nm

槌田龍太郎の分光化学系列(spectrochemical series)

R. Tsuchida, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **13**, 388(1938).

Y. Shimura, R. Tsuchida, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **29**, 311(1956).

$CN^- > C_5H_5^- > NO_2^-, SO_3^{2-} >$ bpy, phen $>$ trien, dien, en $> NH_3$, py $> gly^- > edta^{4-} > acac^- > ONO^-, H_2O, NCS^- > ox^{2-} > NO_3^-, SO_4^{2-} > RCO_2^-, OH^-, CO_3^{2-} > S_2O_3^{2-}, SCN^- > \mathbf{F^-} > (RO)_2PS_2^- > N_3^- > \mathbf{Cl^-} > CrO_4^{2-} > \mathbf{Br^-} > \mathbf{I^-}$

6 配位正八面体型錯イオンでは，単原子イオンの時に五重縮退していた 5 種類の d 軌道が，結晶場により t_{2g} 軌道(d_{xy}, d_{yz}, d_{xz})と e_g 軌道(d_{z^2}, $d_{x^2-y^2}$)に分裂します．今回計算した 4 種類のクロム(Ⅲ)錯体の場合は，電子が 10 個の席のうち 3 個が埋まった 3d 軌道が，6 つのハロゲンイオンの構成する正八面体型の結晶場により，t_{2g} 軌道($3d_{xy}$, $3d_{yz}$, $3d_{xz}$)と e_g 軌道($3d_{z^2}$, $3d_{x^2-y^2}$)に分裂します．この結晶場分裂の大きさΔ_O（教科書によっては，10*Dq* とも呼ばれます）は，上に示した槌田の分光化学系列によれば，$F^- > Cl^- > Br^- > I^-$ となっており，今回 **Auto-eduDV** で計算した 4 種類のクロム(III)錯体のΔ_Oの結果は，槌田の分光化学系列に従っていることが分かります.

～・～

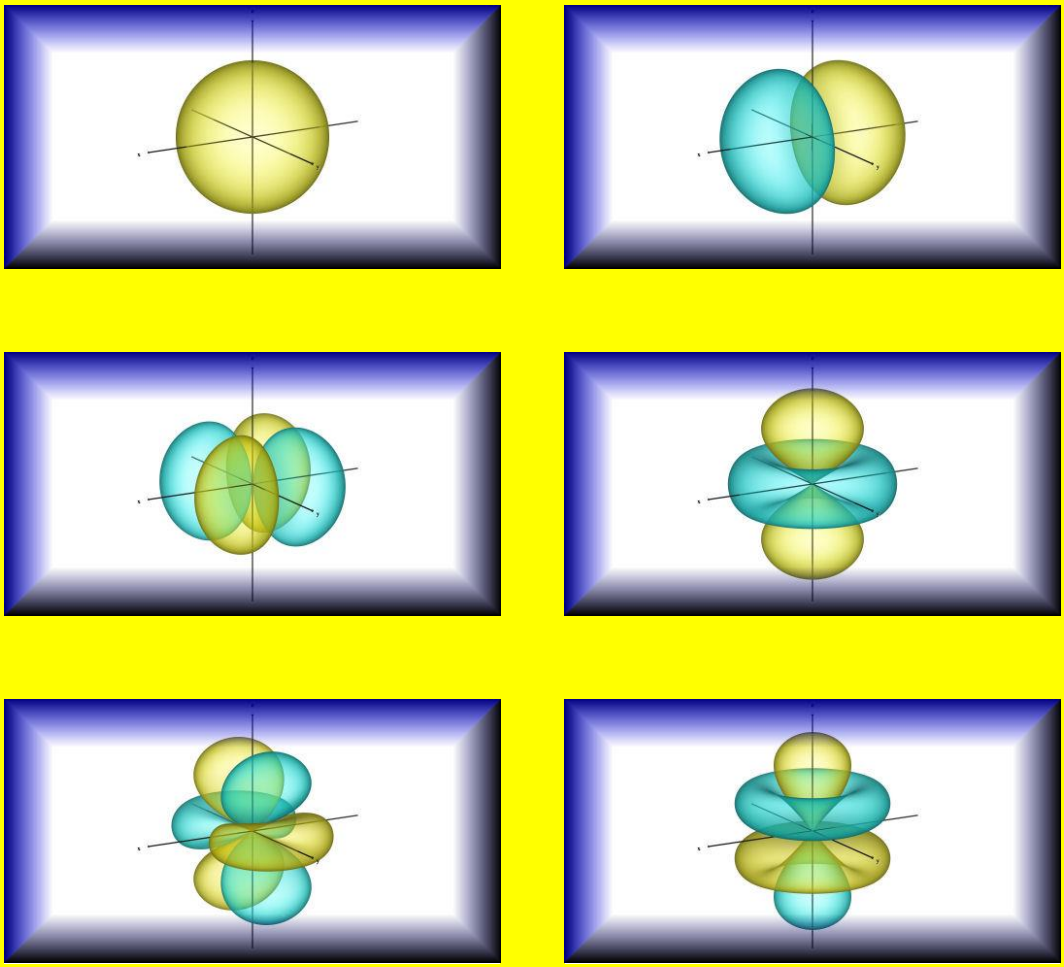
本文書は，以下の URL で一般公開されております．最新の情報に即して今後も内容を改訂していきますので，是非 表紙（１ページ）の日付をご確認の上，最新版をご参照下さい.

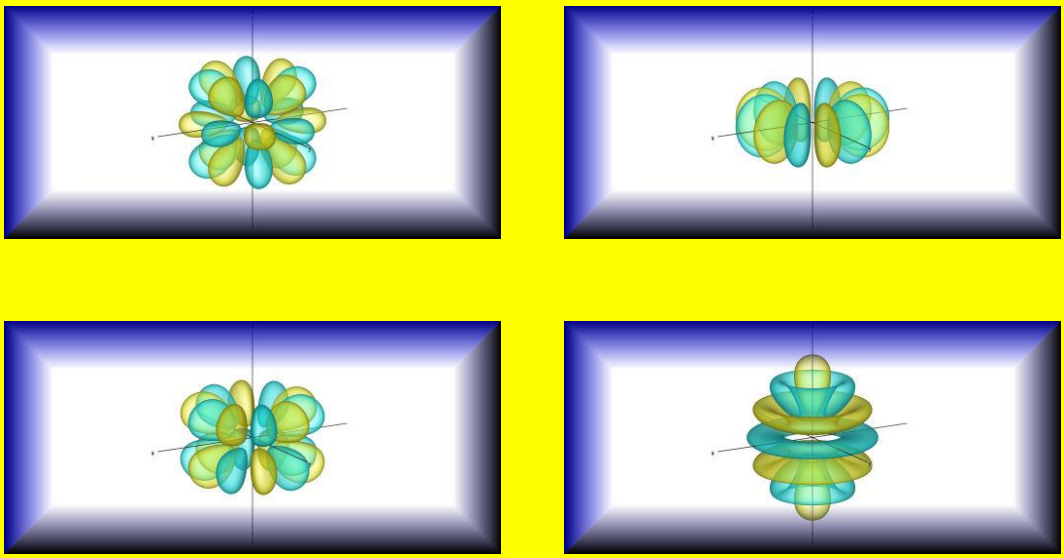
https://www.dvxa.org/hme/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf

～・～

連絡先：〒700-0005 岡山県 岡山市 北区 理大町 1－1 ※ご意見・ご感想などをお寄せ下さい.
岡山理科大学 教育推進機構 基盤教育センター
岡山理科大学大学院 理工学研究科 自然科学専攻
教授 坂 根 弦 太 (SAKANE, Genta)
e-mail: gsakane @ ous.ac.jp
http://blog.livedoor.jp/tgs0001/

謝辞：泉富士夫先生・門馬綱一先生・Dr Ruben A. Dilanian
足立裕彦先生・水野正隆先生・小和田善之先生
DV−Xα 研究協会の皆様・spd 部会メンバーの皆様・(有)サイトー企画（斉藤秀夫氏）
本間善夫先生・川端潤先生・Open Watcom・Open Babel・Microsoft



https://www.dvxa.org/hme/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf

DV-$X\alpha$ 法のための統合支援環境 (Integrated Assistance Enviroment for the DV-$X\alpha$ Method)