

# Auto-eduDV

岡山理科大学 理学部 化学科 坂根弦太

gsakane@chem.ous.ac.jp

## 1. はじめに

教育用分子軌道計算システム eduDV を開発[1], 整備し[2], GUI での動作を実現[3-4], さらに開発を続け[5-7], 最新版のプログラム一式[8]とマニュアル[9], および論文[10]を一般公開している. eduDV, および結晶構造, 電子・核密度等の三次元データ可視化プログラム VESTA を含んだ“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”[4]は, eduDV[1-10], DV- $X\alpha$ 法[11-21], 秀丸エディタ[22], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[23], VESTA[24-25]から構成されており, 教育・研究目的では無償で(秀丸エディタのみシェアウェア, ただし金銭的に難儀している学生の方(学校内設置のパソコンで学生の方が使用する場合も OK)には秀丸エディタフリー制度(アカデミックフリー個人・アカデミックフリー団体)がある)全ての環境を構築することができる. 岡山理科大学情報処理センターの学生実習用パソコンの全てに eduDV, DV- $X\alpha$ 法, 秀丸エディタ, DV- $X\alpha$ 法計算支援環境, VESTA がインストールされており, 基礎化学, 物理化学, 無機化学, 有機化学, 量子化学などの講義・実習で活用できる.

インストールに必要なプログラムや文書は, 以下のように全てインターネットを経由してダウンロードして入手できる. 全国の高等専門学校や大学での教育・研究に, この“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”が利用されている.

1. DV- $X\alpha$ 法プログラム本体 dvxa\_v1\_04.zip (2007/09/04, 17.9 MB)  
書籍「はじめての電子状態計算」のサポート Web サイトのダウンロードページ  
<http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html>
2. 教育用分子軌道計算システム eduDV eduDV.zip (2013/11/19, 12.5 MB)  
「坂根弦太の楽しい電子状態計算」Web サイト  
<http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/fun/index.html#edudv>
3. DV- $X\alpha$ 法計算支援環境 DV-Xa.zip (2013/10/17, 835 KB)  
「泉富士夫の粉末回折情報館」Web サイト  
[http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance\\_environment](http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance_environment)
4. 三次元可視化システム VESTA Ver. 3.1.7 VESTA.zip (2013/10/19, 10.8 MB)  
「JP-Minerals」Web サイト VESTA-win64.zip (2013/10/19, 12.9 MB)  
<http://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html>
5. 秀丸エディタ Ver. 8.32 hm832\_signed.exe (2013/09/03, 2.58 MB)  
「秀まるおのホームページ(サイト—企画)」Web サイト  
<http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>

## 6. Open Babel Ver. 2.3.2                      OpenBabel2.3.2a\_Windows\_Installer.exe (2012/11/09, 11.7 MB)

「構造ファイル変換ユーティリティ Open Babel」 Web サイト

[http://openbabel.org/wiki/Get\\_Open\\_Babel](http://openbabel.org/wiki/Get_Open_Babel)7. DV- $X\alpha$ 法計算支援環境 利用の手引き              HidemaruDV.pdf (2013/11/19, 17.3 MB)

「岡山理科大学の坂根弦太」 Web サイト

<http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>

岡山理科大学では、理学部化学科の 1 年次前期必修科目“コンピュータ入門 I”（担当：坂根，畠山），大学院理学研究科化学専攻の後期選択科目“錯体化学 II”（担当：坂根）でこの eduDV，VESTA を含んだ GUI ベースの“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”を利用している。

これまで、この“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”で eduDV を使うとき、分子軌道を計算しようとする分子の形（点群）を選び、必要最低限の情報（分子を構成する原子の原子番号，原子間距離，原子間角度，酸化数など）をコマンドプロンプト画面で会話形式にて入力する必要があった。この場合，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ることが推察される。

- 「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 (Character User Interface) 操作に敷居を感じる。できれば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った。

- 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，以下のようなことがある。

- 結晶学（粉末・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。

そこで今年度は、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ある。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- $X\alpha$ 計算、CONTRD などが全自動で実行される。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ある。

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 の世界である。

1. 秀丸エディタ（DV- $X\alpha$ 法計算支援環境）を起動
2. DV- $X\alpha$ 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- $X\alpha$ 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- $X\alpha$ 法については特に何の知識も要求されず、DV- $X\alpha$ 法の操作については全く意識する必要がない。ユーザの（情報リテラシーや量子化学や DV- $X\alpha$ 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」の教育システムである。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 の世界に入ることができる。

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、イオンは計算できない。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）が利用できるし、CIF や Mol ファイルなどの座標データがあれば、DV- $X\alpha$ 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る。

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 である。

## 2. 開発環境

岡山理科大学情報処理センターより貸与されたノートパソコン（東芝 Dynabook SS 2010 DS86P/2, CPU: Mobile Intel Pentium III 866 MHz, RAM: 256 MB, OS: Windows 2000 Service Pack 4）に Open Watcom Fortran77 compiler (Version 1.9)[26]をインストールした環境を用いた.

## 3. 開発プログラム・ファイル

Auto-eduDV 機能を実装するにあたり，開発したプログラム・ファイルは以下の通りである.

### 3-1. C:\¥dvxa¥data¥\*.txt（ファイル数 479）

a2b2_C2H2.txt	atom_Br.txt	atom_Na.txt	atom_Ti.txt
a2b2_Hg2I2.txt	atom_C.txt	atom_Nb.txt	atom_Tl.txt
a2_Br2.txt	atom_Ca.txt	atom_Nd.txt	atom_Tm.txt
a2_Cl2.txt	atom_Cd.txt	atom_Ne.txt	atom_U.txt
a2_F2.txt	atom_Ce.txt	atom_Ni.txt	atom_V.txt
a2_H2.txt	atom_Cl.txt	atom_Np.txt	atom_W.txt
a2_I2.txt	atom_Co.txt	atom_O.txt	atom_Xe.txt
a2_N2.txt	atom_Cr.txt	atom_Os.txt	atom_Y.txt
a2_O2.txt	atom_Cs.txt	atom_P.txt	atom_Yb.txt
ab2_CO2.txt	atom_Cu.txt	atom_Pa.txt	atom_Zn.txt
ab2_CS2.txt	atom_Dy.txt	atom_Pb.txt	atom_Zr.txt
ab2_HgCl2.txt	atom_Er.txt	atom_Pd.txt	c2v12_Cl2O.txt
ab2_KrF2.txt	atom_Eu.txt	atom_Pm.txt	c2v12_ClO2.txt
ab2_XeF2.txt	atom_F.txt	atom_Po.txt	c2v12_GeCl2.txt
abcd_HCNO.txt	atom_Fe.txt	atom_Pr.txt	c2v12_GeF2.txt
abc_BrCN.txt	atom_Fr.txt	atom_Pt.txt	c2v12_H2O.txt
abc_ClCN.txt	atom_Ga.txt	atom_Pu.txt	c2v12_H2S.txt
abc_FCN.txt	atom_Gd.txt	atom_Ra.txt	c2v12_NO2.txt
abc_HCN.txt	atom_Ge.txt	atom_Rb.txt	c2v12_O3.txt
ab_CO.txt	atom_H.txt	atom_Re.txt	c2v12_OF2.txt
ab_HBr.txt	atom_He.txt	atom_Rh.txt	c2v12_SCl2.txt
ab_HCl.txt	atom_Hf.txt	atom_Rn.txt	c2v12_SeO2.txt
ab_HF.txt	atom_Hg.txt	atom_Ru.txt	c2v12_SF2.txt
ab_HI.txt	atom_Ho.txt	atom_S.txt	c2v12_SiF2.txt
ab_NO.txt	atom_I.txt	atom_Sb.txt	c2v12_SO2.txt
atom_Ac.txt	atom_In.txt	atom_Sc.txt	c3v13_AsBr3.txt
atom_Ag.txt	atom_Ir.txt	atom_Se.txt	c3v13_AsCl3.txt
atom_Al.txt	atom_K.txt	atom_Si.txt	c3v13_AsF3.txt
atom_Ar.txt	atom_Kr.txt	atom_Sm.txt	c3v13_AsH3.txt
atom_As.txt	atom_La.txt	atom_Sn.txt	c3v13_AsI3.txt
atom_At.txt	atom_Li.txt	atom_Sr.txt	c3v13_BiBr3.txt
atom_Au.txt	atom_Lu.txt	atom-Ta.txt	c3v13_BiCl3.txt
atom_B.txt	atom_Mg.txt	atom_Tb.txt	c3v13_GdI3.txt
atom_Ba.txt	atom_Mn.txt	atom_Tc.txt	c3v13_LuCl3.txt
atom_Be.txt	atom_Mo.txt	atom_Te.txt	c3v13_NCl3.txt
atom_Bi.txt	atom_N.txt	atom_Th.txt	c3v13_NF3.txt

c3v13_NH3.txt	ion_Brp1.txt	ion_Hgp2.txt	ion_Npp4.txt
c3v13_PBr3.txt	ion_Brp3.txt	ion_Hm1.txt	ion_Npp5.txt
c3v13_PCl3.txt	ion_Brp5.txt	ion_Hop3.txt	ion_Npp6.txt
c3v13_PF3.txt	ion_Brp7.txt	ion_Im1.txt	ion_Npp7.txt
c3v13_PH3.txt	ion_Cap2.txt	ion_Inp2.txt	ion_Om2.txt
c3v13_PrI3.txt	ion_Cdp2.txt	ion_Inp3.txt	ion_Osp2.txt
c3v13_SbCl3.txt	ion_Cep3.txt	ion_Ip1.txt	ion_Osp3.txt
c3v13_SbH3.txt	ion_Cep4.txt	ion_Ip3.txt	ion_Osp4.txt
d2h24_C2Cl4.txt	ion_Clm1.txt	ion_Ip5.txt	ion_Osp5.txt
d2h24_C2F4.txt	ion_Clp1.txt	ion_Ip7.txt	ion_Osp6.txt
d2h24_C2H4.txt	ion_Clp3.txt	ion_Irp1.txt	ion_Osp7.txt
d2h24_N2O4s.txt	ion_Clp4.txt	ion_Irp2.txt	ion_Osp8.txt
d2h24_N2O4v.txt	ion_Clp5.txt	ion_Irp3.txt	ion_Pap3.txt
d3d26_C2F6.txt	ion_Clp6.txt	ion_Irp4.txt	ion_Pap4.txt
d3d26_C2H6.txt	ion_Clp7.txt	ion_Kp1.txt	ion_Pap5.txt
d3h13_BBr3.txt	ion_Cop1.txt	ion_Lap3.txt	ion_Pbp2.txt
d3h13_BCl3.txt	ion_Cop2.txt	ion_Lip1.txt	ion_Pbp4.txt
d3h13_BF3.txt	ion_Cop3.txt	ion_Lup3.txt	ion_Pdp2.txt
d3h13_BI3.txt	ion_Cop4.txt	ion_Mgp2.txt	ion_Pdp3.txt
d4h14_AuCl4.txt	ion_Cp2.txt	ion_Mnp2.txt	ion_Pdp4.txt
d4h14_PdCl4.txt	ion_Cp4.txt	ion_Mnp3.txt	ion_Pm3.txt
d4h14_PtCl4.txt	ion_Crp2.txt	ion_Mnp4.txt	ion_Pmp3.txt
d6h66_C6Br6.txt	ion_Crp3.txt	ion_Mnp5.txt	ion_Pom2.txt
d6h66_C6Cl6.txt	ion_Crp4.txt	ion_Mnp6.txt	ion_Pop2.txt
d6h66_C6F6.txt	ion_Crp5.txt	ion_Mnp7.txt	ion_Pop4.txt
d6h66_C6H6.txt	ion_Crp6.txt	ion_Mop1.txt	ion_Pop6.txt
d6h66_C6I6.txt	ion_Csp1.txt	ion_Mop2.txt	ion_Pp3.txt
ion_Acp3.txt	ion_Cup1.txt	ion_Mop3.txt	ion_Pp5.txt
ion_Agp1.txt	ion_Cup2.txt	ion_Mop4.txt	ion_Pr3.txt
ion_Agp2.txt	ion_Cup3.txt	ion_Mop5.txt	ion_Pr4.txt
ion_Agp3.txt	ion_Dyp3.txt	ion_Mop6.txt	ion_Ptp2.txt
ion_Alp3.txt	ion_Erp3.txt	ion_Nap1.txt	ion_Ptp3.txt
ion_Asm3.txt	ion_Eup2.txt	ion_Nbp2.txt	ion_Ptp4.txt
ion_Asp3.txt	ion_Eup3.txt	ion_Nbp3.txt	ion_Ptp5.txt
ion_Asp5.txt	ion_Fep2.txt	ion_Nbp4.txt	ion_Ptp6.txt
ion_Atm1.txt	ion_Fep3.txt	ion_Nbp5.txt	ion_Pup2.txt
ion_Atp1.txt	ion_Fep4.txt	ion_Ndp3.txt	ion_Pup3.txt
ion_Atp3.txt	ion_Fep6.txt	ion_Nip1.txt	ion_Pup4.txt
ion_Atp5.txt	ion_Fm1.txt	ion_Nip2.txt	ion_Pup5.txt
ion_Atp7.txt	ion_Frp1.txt	ion_Nip3.txt	ion_Pup6.txt
ion_Aup1.txt	ion_Gap2.txt	ion_Nip4.txt	ion_Pup7.txt
ion_Aup2.txt	ion_Gap3.txt	ion_Nm3.txt	ion_Rap2.txt
ion_Aup3.txt	ion_Gdp3.txt	ion_Np1.txt	ion_Rbp1.txt
ion_Bap2.txt	ion_Gep2.txt	ion_Np2.txt	ion_Rep1.txt
ion_Bep2.txt	ion_Gep4.txt	ion_Np3.txt	ion_Rep2.txt
ion_Bip3.txt	ion_Hfp2.txt	ion_Np4.txt	ion_Rep3.txt
ion_Bip5.txt	ion_Hfp3.txt	ion_Np5.txt	ion_Rep4.txt
ion_Bp3.txt	ion_Hfp4.txt	ion_Npp2.txt	ion_Rep5.txt
ion_Brm1.txt	ion_Hgp1.txt	ion_Npp3.txt	ion_Rep6.txt



ion_Rep7.txt	ion_Tcp2.txt	ion_Xep6.txt	oh16_MoF6.txt
ion_Rhp1.txt	ion_Tcp3.txt	ion_Xep8.txt	oh16_NpF6.txt
ion_Rhp2.txt	ion_Tcp4.txt	ion_Ybp2.txt	oh16_OsF6.txt
ion_Rhp3.txt	ion_Tcp5.txt	ion_Ybp3.txt	oh16_PuF6.txt
ion_Rhp4.txt	ion_Tcp6.txt	ion_Yp3.txt	oh16_ReF6.txt
ion_Rhp6.txt	ion_Tcp7.txt	ion_Znp2.txt	oh16_SeF6.txt
ion_Rup2.txt	ion_Tem2.txt	ion_Zrp2.txt	oh16_SF6.txt
ion_Rup3.txt	ion_Tep4.txt	ion_Zrp3.txt	oh16_TeF6.txt
ion_Rup4.txt	ion_Tep6.txt	ion_Zrp4.txt	oh16_UF6.txt
ion_Rup5.txt	ion_Thp2.txt	mh2o6_CoH2O62p.txt	oh16_WF6.txt
ion_Rup6.txt	ion_Thp3.txt	mh2o6_CoH2O63p.txt	td144_NiCO4.txt
ion_Rup7.txt	ion_Thp4.txt	mh2o6_CrH2O62p.txt	td14_CBr4.txt
ion_Rup8.txt	ion_Tip2.txt	mh2o6_CrH2O63p.txt	td14_CCl4.txt
ion_Sbm3.txt	ion_Tip3.txt	mh2o6_FeH2O62p.txt	td14_CF4.txt
ion_Sbp3.txt	ion_Tip4.txt	mh2o6_FeH2O63p.txt	td14_CH4.txt
ion_Sbp5.txt	ion_Tlp1.txt	mh2o6_MnH2O62p.txt	td14_GeBr4.txt
ion_Scp3.txt	ion_Tlp3.txt	mh2o6_NiH2O62p.txt	td14_GeCl4.txt
ion_Sem2.txt	ion_Tmp3.txt	mh2o6_RuH2O63p.txt	td14_GeH4.txt
ion_Sep4.txt	ion_Up2.txt	mh2o6_TiH2O63p.txt	td14_HfCl4.txt
ion_Sep6.txt	ion_Up3.txt	mh2o6_TiH2O64p.txt	td14_OsO4.txt
ion_Sip4.txt	ion_Up4.txt	mh2o6_VH2O62p.txt	td14_RuO4.txt
ion_Sm2.txt	ion_Up5.txt	mh2o6_VH2O63p.txt	td14_SiCl4.txt
ion_Smp2.txt	ion_Up6.txt	mh2o6_ZnH2O62p.txt	td14_SiF4.txt
ion_Smp3.txt	ion_Vp2.txt	ml4_CoBr42m.txt	td14_SiH4.txt
ion_Snp2.txt	ion_Vp3.txt	ml4_CoCl42m.txt	td14_SnCl4.txt
ion_Snp4.txt	ion_Vp4.txt	ml4_CoI42m.txt	td14_SnH4.txt
ion_Sp4.txt	ion_Vp5.txt	ml6_CrBr63m.txt	td14_ThCl4.txt
ion_Sp6.txt	ion_Wp1.txt	ml6_CrCl63m.txt	td14_ThF4.txt
ion_Srp2.txt	ion_Wp2.txt	ml6_CrF63m.txt	td14_TiBr4.txt
ion_Tap2.txt	ion_Wp3.txt	ml6_CrI63m.txt	td14_TiCl4.txt
ion_Tap3.txt	ion_Wp4.txt	oh166_CrCO6.txt	td14_VCl4.txt
ion_Tap4.txt	ion_Wp5.txt	oh166_MoCO6.txt	td14_XeO4.txt
ion_Tap5.txt	ion_Wp6.txt	oh166_VCO6.txt	td14_ZrCl4.txt
ion_Tbp3.txt	ion_Xep2.txt	oh166_WCO6.txt	td14_ZrF4.txt
ion_Tbp4.txt	ion_Xep4.txt	oh16_IrF6.txt	

3-2. C:\¥dva¥exec¥\*.bat (ファイル数 : 42)

a2b2n_AUTO.bat	abs_AUTO.bat	d3h13s_AUTO.bat	ml6s_AUTO.bat
a2b2s_AUTO.bat	atomn_AUTO.bat	d4h14n_AUTO.bat	oh166n_AUTO.bat
a2n_AUTO.bat	c2v12n_AUTO.bat	d4h14s_AUTO.bat	oh166s_AUTO.bat
a2s_AUTO.bat	c2v12s_AUTO.bat	d6h66n_AUTO.bat	oh16n_AUTO.bat
ab2n_AUTO.bat	c3v13n_AUTO.bat	d6h66s_AUTO.bat	oh16s_AUTO.bat
ab2s_AUTO.bat	c3v13s_AUTO.bat	ionn_AUTO.bat	td144n_AUTO.bat
abcdn_AUTO.bat	d2h24n_AUTO.bat	mh2o6n_AUTO.bat	td144s_AUTO.bat
abcds_AUTO.bat	d2h24s_AUTO.bat	mh2o6s_AUTO.bat	td14n_AUTO.bat
abcn_AUTO.bat	d3d26n_AUTO.bat	ml4n_AUTO.bat	td14s_AUTO.bat
abcs_AUTO.bat	d3d26s_AUTO.bat	ml4s_AUTO.bat	
abn_AUTO.bat	d3h13n_AUTO.bat	ml6n_AUTO.bat	

## 3-3. C:\dvxa\Macros\eduDV\*.mac (ファイル数 : 783)

a2b2n_C2H2.mac	abcs_menu.mac	atomn_Ga.mac	atomn_Si.mac
a2b2n_Hg2I2.mac	abn_CO.mac	atomn_Gd.mac	atomn_Sm.mac
a2b2n_menu.mac	abn_HBr.mac	atomn_Ge.mac	atomn_Sn.mac
a2b2s_C2H2.mac	abn_HCl.mac	atomn_H.mac	atomn_Sr.mac
a2b2s_Hg2I2.mac	abn_HF.mac	atomn_He.mac	atomn-Ta.mac
a2b2s_menu.mac	abn_HI.mac	atomn_Hf.mac	atomn_Tb.mac
a2n_Br2.mac	abn_menu.mac	atomn_Hg.mac	atomn_Tc.mac
a2n_Cl2.mac	abn_NO.mac	atomn_Ho.mac	atomn_Te.mac
a2n_F2.mac	abs_CO.mac	atomn_I.mac	atomn_Th.mac
a2n_H2.mac	abs_HBr.mac	atomn_In.mac	atomn_Ti.mac
a2n_I2.mac	abs_HCl.mac	atomn_Ir.mac	atomn_Tl.mac
a2n_menu.mac	abs_HF.mac	atomn_K.mac	atomn_Tm.mac
a2n_N2.mac	abs_HI.mac	atomn_Kr.mac	atomn_U.mac
a2n_O2.mac	abs_menu.mac	atomn_La.mac	atomn_V.mac
a2s_Br2.mac	abs_NO.mac	atomn_Li.mac	atomn_W.mac
a2s_Cl2.mac	atom1_menu.mac	atomn_Lu.mac	atomn_Xe.mac
a2s_F2.mac	atom2_menu.mac	atomn_Mg.mac	atomn_Y.mac
a2s_H2.mac	atom3_menu.mac	atomn_Mn.mac	atomn_Yb.mac
a2s_I2.mac	atom4_menu.mac	atomn_Mo.mac	atomn_Zn.mac
a2s_menu.mac	atom5_menu.mac	atomn_N.mac	atomn_Zr.mac
a2s_N2.mac	atomn_Ac.mac	atomn_Na.mac	AUTOa2.mac
a2s_O2.mac	atomn_Ag.mac	atomn_Nb.mac	AUTOa2b2.mac
ab2n_CO2.mac	atomn_Al.mac	atomn_Nd.mac	AUTOab.mac
ab2n_CS2.mac	atomn_Ar.mac	atomn_Ne.mac	AUTOab2.mac
ab2n_HgCl2.mac	atomn_As.mac	atomn_Ni.mac	AUTOabc.mac
ab2n_KrF2.mac	atomn_At.mac	atomn_Np.mac	AUTOabcd.mac
ab2n_menu.mac	atomn_Au.mac	atomn_O.mac	AUTOatom.mac
ab2n_XeF2.mac	atomn_B.mac	atomn_Os.mac	AUTOc2v12.mac
ab2s_CO2.mac	atomn_Ba.mac	atomn_P.mac	AUTOc3v13.mac
ab2s_CS2.mac	atomn_Be.mac	atomn_Pa.mac	AUTOd2h24.mac
ab2s_HgCl2.mac	atomn_Bi.mac	atomn_Pb.mac	AUTOd3d26.mac
ab2s_KrF2.mac	atomn_Br.mac	atomn_Pd.mac	AUTOd3h13.mac
ab2s_menu.mac	atomn_C.mac	atomn_Pm.mac	AUTOd4h14.mac
ab2s_XeF2.mac	atomn_Ca.mac	atomn_Po.mac	AUTOd6h66.mac
abcdn_HCNO.mac	atomn_Cd.mac	atomn_Pr.mac	AUTOion.mac
abcdn_menu.mac	atomn_Ce.mac	atomn_Pt.mac	AUTOmenu.mac
abcds_HCNO.mac	atomn_Cl.mac	atomn_Pu.mac	AUTOmh2o6.mac
abcds_menu.mac	atomn_Co.mac	atomn_Ra.mac	AUTOm14.mac
abcn_BrCN.mac	atomn_Cr.mac	atomn_Rb.mac	AUTOm16.mac
abcn_ClCN.mac	atomn-Cs.mac	atomn_Re.mac	AUTOoh16.mac
abcn_FCN.mac	atomn_Cu.mac	atomn_Rh.mac	AUTOoh166.mac
abcn_HCN.mac	atomn_Dy.mac	atomn_Rn.mac	AUTOt14.mac
abcn_menu.mac	atomn_Er.mac	atomn_Ru.mac	AUTOt144.mac
abcs_BrCN.mac	atomn_Eu.mac	atomn_S.mac	c2v12n_Cl2O.mac
abcs_ClCN.mac	atomn_F.mac	atomn_Sb.mac	c2v12n_ClO2.mac
abcs_FCN.mac	atomn_Fe.mac	atomn_Sc.mac	c2v12n_GeCl2.mac
abcs_HCN.mac	atomn_Fr.mac	atomn_Se.mac	c2v12n_GeF2.mac

c2v12n_H2O.mac	c3v13s_AsH3.mac	d4h14s_AuCl4.mac	ionn_Bip5.mac
c2v12n_H2S.mac	c3v13s_AsI3.mac	d4h14s_menu.mac	ionn_Bi_menu.mac
c2v12n_menu.mac	c3v13s_BiBr3.mac	d4h14s_PdCl4.mac	ionn_Bp3.mac
c2v12n_NO2.mac	c3v13s_BiCl3.mac	d4h14s_PtCl4.mac	ionn_Brm1.mac
c2v12n_O3.mac	c3v13s_GdI3.mac	d6h66n_C6Br6.mac	ionn_Brp1.mac
c2v12n_OF2.mac	c3v13s_LuCl3.mac	d6h66n_C6Cl6.mac	ionn_Brp3.mac
c2v12n_SCl2.mac	c3v13s_menu.mac	d6h66n_C6F6.mac	ionn_Brp5.mac
c2v12n_SeO2.mac	c3v13s_NCl3.mac	d6h66n_C6H6.mac	ionn_Brp7.mac
c2v12n_SF2.mac	c3v13s_NF3.mac	d6h66n_C6I6.mac	ionn_Br_menu.mac
c2v12n_SiF2.mac	c3v13s_NH3.mac	d6h66n_menu.mac	ionn_B_menu.mac
c2v12n_SO2.mac	c3v13s_PBr3.mac	d6h66s_C6Br6.mac	ionn_Cap2.mac
c2v12s_Cl2O.mac	c3v13s_PCl3.mac	d6h66s_C6Cl6.mac	ionn_Ca_menu.mac
c2v12s_ClO2.mac	c3v13s_PF3.mac	d6h66s_C6F6.mac	ionn_Cdp2.mac
c2v12s_GeCl2.mac	c3v13s_PH3.mac	d6h66s_C6H6.mac	ionn_Cd_menu.mac
c2v12s_GeF2.mac	c3v13s_PrI3.mac	d6h66s_C6I6.mac	ionn_Cep3.mac
c2v12s_H2O.mac	c3v13s_SbCl3.mac	d6h66s_menu.mac	ionn_Cep4.mac
c2v12s_H2S.mac	c3v13s_SbH3.mac	ion1_menu.mac	ionn_Ce_menu.mac
c2v12s_menu.mac	d2h24n_C2Cl4.mac	ion2_menu.mac	ionn_Clm1.mac
c2v12s_NO2.mac	d2h24n_C2F4.mac	ion3_menu.mac	ionn_Clp1.mac
c2v12s_O3.mac	d2h24n_C2H4.mac	ion4_menu.mac	ionn_Clp3.mac
c2v12s_OF2.mac	d2h24n_menu.mac	ion5_menu.mac	ionn_Clp4.mac
c2v12s_SCl2.mac	d2h24n_N2O4s.mac	ionn_Acp3.mac	ionn_Clp5.mac
c2v12s_SeO2.mac	d2h24n_N2O4v.mac	ionn_Ac_menu.mac	ionn_Clp6.mac
c2v12s_SF2.mac	d2h24s_C2Cl4.mac	ionn_Agp1.mac	ionn_Clp7.mac
c2v12s_SiF2.mac	d2h24s_C2F4.mac	ionn_Agp2.mac	ionn_Cl_menu.mac
c2v12s_SO2.mac	d2h24s_C2H4.mac	ionn_Agp3.mac	ionn_Cop1.mac
c3v13n_AsBr3.mac	d2h24s_menu.mac	ionn_Ag_menu.mac	ionn_Cop2.mac
c3v13n_AsCl3.mac	d2h24s_N2O4s.mac	ionn_Alp3.mac	ionn_Cop3.mac
c3v13n_AsF3.mac	d2h24s_N2O4v.mac	ionn_Al_menu.mac	ionn_Cop4.mac
c3v13n_AsH3.mac	d3d26n_C2F6.mac	ionn_Ar_menu.mac	ionn_Co_menu.mac
c3v13n_AsI3.mac	d3d26n_C2H6.mac	ionn_Asm3.mac	ionn_Cp2.mac
c3v13n_BiBr3.mac	d3d26n_menu.mac	ionn_Asp3.mac	ionn_Cp4.mac
c3v13n_BiCl3.mac	d3d26s_C2F6.mac	ionn_Asp5.mac	ionn_Crp2.mac
c3v13n_GdI3.mac	d3d26s_C2H6.mac	ionn_As_menu.mac	ionn_Crp3.mac
c3v13n_LuCl3.mac	d3d26s_menu.mac	ionn_Atm1.mac	ionn_Crp4.mac
c3v13n_menu.mac	d3h13n_BBr3.mac	ionn_Atp1.mac	ionn_Crp5.mac
c3v13n_NCl3.mac	d3h13n_BCl3.mac	ionn_Atp3.mac	ionn_Crp6.mac
c3v13n_NF3.mac	d3h13n_BF3.mac	ionn_Atp5.mac	ionn_Cr_menu.mac
c3v13n_NH3.mac	d3h13n_BI3.mac	ionn_Atp7.mac	ionn_Csp1.mac
c3v13n_PBr3.mac	d3h13n_menu.mac	ionn_At_menu.mac	ionn_Cs_menu.mac
c3v13n_PCl3.mac	d3h13s_BBr3.mac	ionn_Aup1.mac	ionn_Cup1.mac
c3v13n_PF3.mac	d3h13s_BCl3.mac	ionn_Aup2.mac	ionn_Cup2.mac
c3v13n_PH3.mac	d3h13s_BF3.mac	ionn_Aup3.mac	ionn_Cup3.mac
c3v13n_PrI3.mac	d3h13s_BI3.mac	ionn_Au_menu.mac	ionn_Cu_menu.mac
c3v13n_SbCl3.mac	d3h13s_menu.mac	ionn_Bap2.mac	ionn_C_menu.mac
c3v13n_SbH3.mac	d4h14n_AuCl4.mac	ionn_Ba_menu.mac	ionn_Dyp3.mac
c3v13s_AsBr3.mac	d4h14n_menu.mac	ionn_Bep2.mac	ionn_Dy_menu.mac
c3v13s_AsCl3.mac	d4h14n_PdCl4.mac	ionn_Be_menu.mac	ionn_Erp3.mac
c3v13s_AsF3.mac	d4h14n_PtCl4.mac	ionn_Bip3.mac	ionn_Er_menu.mac



ionn_Eup2.mac	ionn_Lap3.mac	ionn_Np_menu.mac	ionn_P_menu.mac
ionn_Eup3.mac	ionn_La_menu.mac	ionn_N_menu.mac	ionn_Rap2.mac
ionn_Eu_menu.mac	ionn_Lip1.mac	ionn_Om2.mac	ionn_Ra_menu.mac
ionn_Fep2.mac	ionn_Li_menu.mac	ionn_Osp2.mac	ionn_Rbp1.mac
ionn_Fep3.mac	ionn_Lup3.mac	ionn_Osp3.mac	ionn_Rb_menu.mac
ionn_Fep4.mac	ionn_Lu_menu.mac	ionn_Osp4.mac	ionn_Rep1.mac
ionn_Fep6.mac	ionn_Mgp2.mac	ionn_Osp5.mac	ionn_Rep2.mac
ionn_Fe_menu.mac	ionn_Mg_menu.mac	ionn_Osp6.mac	ionn_Rep3.mac
ionn_Fm1.mac	ionn_Mnp2.mac	ionn_Osp7.mac	ionn_Rep4.mac
ionn_Frp1.mac	ionn_Mnp3.mac	ionn_Osp8.mac	ionn_Rep5.mac
ionn_Fr_menu.mac	ionn_Mnp4.mac	ionn_Os_menu.mac	ionn_Rep6.mac
ionn_F_menu.mac	ionn_Mnp5.mac	ionn_O_menu.mac	ionn_Rep7.mac
ionn_Gap2.mac	ionn_Mnp6.mac	ionn_Pap3.mac	ionn_Re_menu.mac
ionn_Gap3.mac	ionn_Mnp7.mac	ionn_Pap4.mac	ionn_Rhp1.mac
ionn_Ga_menu.mac	ionn_Mn_menu.mac	ionn_Pap5.mac	ionn_Rhp2.mac
ionn_Gdp3.mac	ionn_Mop1.mac	ionn_Pa_menu.mac	ionn_Rhp3.mac
ionn_Gd_menu.mac	ionn_Mop2.mac	ionn_Pbp2.mac	ionn_Rhp4.mac
ionn_Gep2.mac	ionn_Mop3.mac	ionn_Pbp4.mac	ionn_Rhp6.mac
ionn_Gep4.mac	ionn_Mop4.mac	ionn_Pb_menu.mac	ionn_Rh_menu.mac
ionn_Ge_menu.mac	ionn_Mop5.mac	ionn_Pdp2.mac	ionn_Rn_menu.mac
ionn_He_menu.mac	ionn_Mop6.mac	ionn_Pdp3.mac	ionn_Rup2.mac
ionn_Hfp2.mac	ionn_Mo_menu.mac	ionn_Pdp4.mac	ionn_Rup3.mac
ionn_Hfp3.mac	ionn_Nap1.mac	ionn_Pd_menu.mac	ionn_Rup4.mac
ionn_Hfp4.mac	ionn_Na_menu.mac	ionn_Pm3.mac	ionn_Rup5.mac
ionn_Hf_menu.mac	ionn_Nbp2.mac	ionn_Pmp3.mac	ionn_Rup6.mac
ionn_Hgp1.mac	ionn_Nbp3.mac	ionn_Pm_menu.mac	ionn_Rup7.mac
ionn_Hgp2.mac	ionn_Nbp4.mac	ionn_Pom2.mac	ionn_Rup8.mac
ionn_Hg_menu.mac	ionn_Nbp5.mac	ionn_Pop2.mac	ionn_Ru_menu.mac
ionn_Hm1.mac	ionn_Nb_menu.mac	ionn_Pop4.mac	ionn_Sbm3.mac
ionn_Hop3.mac	ionn_Ndp3.mac	ionn_Pop6.mac	ionn_Sbp3.mac
ionn_Ho_menu.mac	ionn_Nd_menu.mac	ionn_Po_menu.mac	ionn_Sbp5.mac
ionn_H_menu.mac	ionn_Ne_menu.mac	ionn_Pp3.mac	ionn_Sb_menu.mac
ionn_Im1.mac	ionn_Nip1.mac	ionn_Pp5.mac	ionn_Scp3.mac
ionn_Inp2.mac	ionn_Nip2.mac	ionn_Prp3.mac	ionn_Sc_menu.mac
ionn_Inp3.mac	ionn_Nip3.mac	ionn_Prp4.mac	ionn_Sem2.mac
ionn_In_menu.mac	ionn_Nip4.mac	ionn_Pr_menu.mac	ionn_Sep4.mac
ionn_Ip1.mac	ionn_Ni_menu.mac	ionn_Ptp2.mac	ionn_Sep6.mac
ionn_Ip3.mac	ionn_Nm3.mac	ionn_Ptp3.mac	ionn_Se_menu.mac
ionn_Ip5.mac	ionn_Np1.mac	ionn_Ptp4.mac	ionn_Sip4.mac
ionn_Ip7.mac	ionn_Np2.mac	ionn_Ptp5.mac	ionn_Si_menu.mac
ionn_Irp1.mac	ionn_Np3.mac	ionn_Ptp6.mac	ionn_Sm2.mac
ionn_Irp2.mac	ionn_Np4.mac	ionn_Pt_menu.mac	ionn_Smp2.mac
ionn_Irp3.mac	ionn_Np5.mac	ionn_Pup2.mac	ionn_Smp3.mac
ionn_Irp4.mac	ionn_Npp2.mac	ionn_Pup3.mac	ionn_Sm_menu.mac
ionn_Ir_menu.mac	ionn_Npp3.mac	ionn_Pup4.mac	ionn_Snp2.mac
ionn_I_menu.mac	ionn_Npp4.mac	ionn_Pup5.mac	ionn_Snp4.mac
ionn_Kp1.mac	ionn_Npp5.mac	ionn_Pup6.mac	ionn_Sn_menu.mac
ionn_Kr_menu.mac	ionn_Npp6.mac	ionn_Pup7.mac	ionn_Sp4.mac
ionn_K_menu.mac	ionn_Npp7.mac	ionn_Pu_menu.mac	ionn_Sp6.mac

ionn_Srp2.mac	ionn_Wp4.mac	mh2o6s_ZnH2O62p.mac	oh16s_SF6.mac
ionn_Sr_menu.mac	ionn_Wp5.mac	ml4n_CoBr42m.mac	oh16s_TeF6.mac
ionn_S_menu.mac	ionn_Wp6.mac	ml4n_CoCl42m.mac	oh16s_UF6.mac
ionn_Tap2.mac	ionn_W_menu.mac	ml4n_CoI42m.mac	oh16s_WF6.mac
ionn_Tap3.mac	ionn_Xep2.mac	ml4n_menu.mac	td144n_menu.mac
ionn_Tap4.mac	ionn_Xep4.mac	ml4s_CoBr42m.mac	td144n_NiCO4.mac
ionn_Tap5.mac	ionn_Xep6.mac	ml4s_CoCl42m.mac	td144s_menu.mac
ionn-Ta_menu.mac	ionn_Xep8.mac	ml4s_CoI42m.mac	td144s_NiCO4.mac
ionn_Tbp3.mac	ionn_Xe_menu.mac	ml4s_menu.mac	td14n_CBr4.mac
ionn_Tbp4.mac	ionn_Ybp2.mac	ml6n_CrBr63m.mac	td14n_CCl4.mac
ionn_Tb_menu.mac	ionn_Ybp3.mac	ml6n_CrCl63m.mac	td14n_CF4.mac
ionn_Tcp2.mac	ionn_Yb_menu.mac	ml6n_CrF63m.mac	td14n_CH4.mac
ionn_Tcp3.mac	ionn_Yp3.mac	ml6n_CrI63m.mac	td14n_GeBr4.mac
ionn_Tcp4.mac	ionn_Y_menu.mac	ml6n_menu.mac	td14n_GeCl4.mac
ionn_Tcp5.mac	ionn_Znp2.mac	ml6s_CrBr63m.mac	td14n_GeH4.mac
ionn_Tcp6.mac	ionn_Zn_menu.mac	ml6s_CrCl63m.mac	td14n_HfCl4.mac
ionn_Tcp7.mac	ionn_Zrp2.mac	ml6s_CrF63m.mac	td14n_menu.mac
ionn_Tc_menu.mac	ionn_Zrp3.mac	ml6s_CrI63m.mac	td14n_OsO4.mac
ionn_Tem2.mac	ionn_Zrp4.mac	ml6s_menu.mac	td14n_RuO4.mac
ionn_Tep4.mac	ionn_Zr_menu.mac	oh166n_CrCO6.mac	td14n_SiCl4.mac
ionn_Tep6.mac	mh2o6n_CoH2O62p.mac	oh166n_menu.mac	td14n_SiF4.mac
ionn_Te_menu.mac	mh2o6n_CoH2O63p.mac	oh166n_MoCO6.mac	td14n_SiH4.mac
ionn_Thp2.mac	mh2o6n_CrH2O62p.mac	oh166n_VCO6.mac	td14n_SnCl4.mac
ionn_Thp3.mac	mh2o6n_CrH2O63p.mac	oh166n_WCO6.mac	td14n_SnH4.mac
ionn_Thp4.mac	mh2o6n_FeH2O62p.mac	oh166s_CrCO6.mac	td14n_ThCl4.mac
ionn_Th_menu.mac	mh2o6n_FeH2O63p.mac	oh166s_menu.mac	td14n_ThF4.mac
ionn_Tip2.mac	mh2o6n_menu.mac	oh166s_MoCO6.mac	td14n_TiBr4.mac
ionn_Tip3.mac	mh2o6n_MnH2O62p.mac	oh166s_VCO6.mac	td14n_TiCl4.mac
ionn_Tip4.mac	mh2o6n_NiH2O62p.mac	oh166s_WCO6.mac	td14n_VCl4.mac
ionn_Ti_menu.mac	mh2o6n_RuH2O63p.mac	oh16n_IrF6.mac	td14n_XeO4.mac
ionn_Tlp1.mac	mh2o6n_TiH2O63p.mac	oh16n_menu.mac	td14n_ZrCl4.mac
ionn_Tlp3.mac	mh2o6n_TiH2O64p.mac	oh16n_MoF6.mac	td14n_ZrF4.mac
ionn_Tl_menu.mac	mh2o6n_VH2O62p.mac	oh16n_NpF6.mac	td14s_CBr4.mac
ionn_Tmp3.mac	mh2o6n_VH2O63p.mac	oh16n_OsF6.mac	td14s_CCl4.mac
ionn_Tm_menu.mac	mh2o6n_ZnH2O62p.mac	oh16n_PuF6.mac	td14s_CF4.mac
ionn_Up2.mac	mh2o6s_CoH2O62p.mac	oh16n_ReF6.mac	td14s_CH4.mac
ionn_Up3.mac	mh2o6s_CoH2O63p.mac	oh16n_SeF6.mac	td14s_GeBr4.mac
ionn_Up4.mac	mh2o6s_CrH2O62p.mac	oh16n_SF6.mac	td14s_GeCl4.mac
ionn_Up5.mac	mh2o6s_CrH2O63p.mac	oh16n_TeF6.mac	td14s_GeH4.mac
ionn_Up6.mac	mh2o6s_FeH2O62p.mac	oh16n_UF6.mac	td14s_HfCl4.mac
ionn_U_menu.mac	mh2o6s_FeH2O63p.mac	oh16n_WF6.mac	td14s_menu.mac
ionn_Vp2.mac	mh2o6s_menu.mac	oh16s_IrF6.mac	td14s_OsO4.mac
ionn_Vp3.mac	mh2o6s_MnH2O62p.mac	oh16s_menu.mac	td14s_RuO4.mac
ionn_Vp4.mac	mh2o6s_NiH2O62p.mac	oh16s_MoF6.mac	td14s_SiCl4.mac
ionn_Vp5.mac	mh2o6s_RuH2O63p.mac	oh16s_NpF6.mac	td14s_SiF4.mac
ionn_V_menu.mac	mh2o6s_TiH2O63p.mac	oh16s_OsF6.mac	td14s_SiH4.mac
ionn_Wp1.mac	mh2o6s_TiH2O64p.mac	oh16s_PuF6.mac	td14s_SnCl4.mac
ionn_Wp2.mac	mh2o6s_VH2O62p.mac	oh16s_ReF6.mac	td14s_SnH4.mac
ionn_Wp3.mac	mh2o6s_VH2O63p.mac	oh16s_SeF6.mac	td14s_ThCl4.mac

td14s\_ThF4.mac  
td14s\_TiBr4.mac

td14s\_TiCl4.mac  
td14s\_VCl4.mac

td14s\_XeO4.mac  
td14s\_ZrCl4.mac

td14s\_ZrF4.mac

3-4. 例えば水(H<sub>2</sub>O)分子(C<sub>2v</sub> 対称)の電子状態をノンスピ版 DV-X $\alpha$ 法で計算する場合

3-4-1. 【c:¥dvxa¥Macros¥eduDV.mac】

```
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
menu
"00. Automatic【データ自動入力】...",
"01. D $\infty$ h 対称【等核二原子分子】A2 型分子(H2, O2, N2 など)...",
"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)...",
"03. D $\infty$ h 対称【直線 AB2 型分子】B-A-B 型分子(二酸化炭素など)...",
"04. D $\infty$ h 対称【直線 A2B2 型分子】B-A-A-B 型分子(アセチレンなど)...",
"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)...",
"06. C $\infty$ v 対称【直線 ABCD 型分子】A-B-C-D 型分子(HCNO など)...",
"07. C2v 対称【折れ線 AB2 型分子】AB2 型分子(水や硫化水素など)...",
"08. C3v 対称【三角錐 AB3 型分子】AB3 型分子(アンモニアなど)...",
"09. D2h 対称【エチレン型(平面)分子】A2B4 型分子(エチレンなど)...",
"10. D3d 対称【エタン型(ねじれ形)分子】A2B6 型分子(エタンなど)...",
"11. D3h 対称【平面正三角形型分子】AB3 型分子(三フッ化ホウ素など)...",
"12. D4h 対称【平面正四角形型イオン】AB4 型錯イオン([PtCl4]2-など)...",
"13. D6h 対称【平面正六角形型分子】A6B6 型分子(ベンゼンなど)...",
"14. Td 対称【正四面体型分子】AB4 型分子(メタンや四塩化炭素など)...",
"15. Oh 対称【正八面体型分子】AB6 型分子(六フッ化硫黄など)...",
"16. Td 対称【正四面体型分子】[A(BC)4]型錯体([Ni(CO)4]など)...",
"17. Oh 対称【正八面体型分子】[A(BC)6]型錯体([Cr(CO)6]など)...",
"18. D2h 対称【正八面体型イオン】[M(H2O)6]n+アクア錯イオン...",
"19. Td 対称【正四面体型イオン】[M(L)4]n+ or [M(L)4]n- 錯イオン...",
"20. Oh 対称【正八面体型イオン】[M(L)6]n+ or [M(L)6]n- 錯イオン...",
"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...",
"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...",
;
if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0menu.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥a2menu.mac";
else if(result==3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abmenu.mac";
else if(result==4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ab2menu.mac";
else if(result==5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥a2b2menu.mac";
else if(result==6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abcmenu.mac";
else if(result==7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abcdmenu.mac";
else if(result==8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c2v12menu.mac";
else if(result==9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c3v13menu.mac";
else if(result==10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d2h24menu.mac";
else if(result==11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d3d26menu.mac";
else if(result==12)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d3h13menu.mac";
else if(result==13)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d4h14menu.mac";
else if(result==14)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d6h66menu.mac";
else if(result==15)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥td14menu.mac";
else if(result==16)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥oh16menu.mac";
else if(result==17)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥td144menu.mac";
else if(result==18)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥oh166menu.mac";
else if(result==19)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥mh2o6menu.mac";
else if(result==20)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ml4menu.mac";
else if(result==21)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ml6menu.mac";
else if(result==22)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥atommenu.mac";
else if(result==23)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ionmenu.mac";
;
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
```

## 3-4-2. 【c:\dvxa\Macros\eduDV\AUTOMenu.mac】

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
menu
"AUTO 01. D∞h 対称 【等核二原子分子】 A2 型分子 (H2, O2, N2 など)...",
"AUTO 02. C∞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)...",
"AUTO 03. D∞h 対称 【直線 AB2 型分子】 B-A-B 型分子 (二酸化炭素など)...",
"AUTO 04. D∞h 対称 【直線 A2B2 型分子】 B-A-A-B 型分子 (アセチレンなど)...",
"AUTO 05. C∞v 対称 【直線 ABC 型分子】 A-B-C 型分子 (シアン化水素など)...",
"AUTO 06. C∞v 対称 【直線 ABCD 型分子】 A-B-C-D 型分子 (HCNO など)...",
"AUTO 07. C2v 対称 【折れ線 AB2 型分子】 AB2 型分子 (水や硫化水素など)...",
"AUTO 08. C3v 対称 【三角錐 AB3 型分子】 AB3 型分子 (アンモニアなど)...",
"AUTO 09. D2h 対称 【エチレン型 (平面) 分子】 A2B4 型分子 (エチレンなど)...",
"AUTO 10. D3d 対称 【エタン型 (ねじれ形) 分子】 A2B6 型分子 (エタンなど)...",
"AUTO 11. D3h 対称 【平面正三角形型分子】 AB3 型分子 (三フッ化ホウ素など)...",
"AUTO 12. D4h 対称 【平面正四角形型イオン】 AB4 型錯イオン ([PtCl4]2- など)...",
"AUTO 13. D6h 対称 【平面正六角形型分子】 A6B6 型分子 (ベンゼンなど)...",
"AUTO 14. Td 対称 【正四面体型分子】 AB4 型分子 (メタンや四塩化炭素など)...",
"AUTO 15. Oh 対称 【正八面体型分子】 AB6 型分子 (六フッ化硫黄など)...",
"AUTO 16. Td 対称 【正四面体型分子】 [A(BC)4] 型錯体 ([Ni(CO)4] など)...",
"AUTO 17. Oh 対称 【正八面体型分子】 [A(BC)6] 型錯体 ([Cr(CO)6] など)...",
"AUTO 18. D2h 対称 【正八面体型イオン】 [M(H2O)6]n+ アクア錯イオン...",
"AUTO 19. Td 対称 【正四面体型イオン】 [M(L)4]n+ or [M(L)4]n- 錯イオン...",
"AUTO 20. Oh 対称 【正八面体型イオン】 [M(L)6]n+ or [M(L)6]n- 錯イオン...",
"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...",
"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...",
;
if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0a2.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0ab.mac";
else if(result==3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0ab2.mac";
else if(result==4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0a2b2.mac";
else if(result==5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0abc.mac";
else if(result==6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0abcd.mac";
else if(result==7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0c2v12.mac";
else if(result==8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0c3v13.mac";
else if(result==9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0d2h24.mac";
else if(result==10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0d3d26.mac";
else if(result==11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0d3h13.mac";
else if(result==12)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0d4h14.mac";
else if(result==13)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0d6h66.mac";
else if(result==14)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0td14.mac";
else if(result==15)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0oh16.mac";
else if(result==16)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0td144.mac";
else if(result==17)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0oh166.mac";
else if(result==18)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0mh2o6.mac";
else if(result==19)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0ml4.mac";
else if(result==20)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0ml6.mac";
else if(result==21)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0atom.mac";
else if(result==22)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥AUT0ion.mac";
;
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

## 3-4-3. 【c:\dvxa\Macros\eduDV\AUT0c2v12.mac】

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
menu "c2v12n (ノンスピ版・全自動実行)...",
      "c2v12s (スピ版・全自動実行)...";
if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c2v12n_menu.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c2v12s_menu.mac";
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

## 3-4-4. 【c:\dvxa\Macros\eduDV\c2v12n\_menu.mac】

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
menu
"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",
"S02 二酸化硫黄分子 ノンスピン版",
"N02 二酸化窒素分子 ノンスピン版",
"SF2 ニフッ化硫黄分子 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 ニフッ化酸素分子 ノンスピン版",
"SeO2 二酸化セレン分子 ノンスピン版",
"SiF2 ニフッ化ケイ素分子 ノンスピン版",
;
if(result==1)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_H2O.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_H2S.mac";
else if(result==3)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_O3.mac";
else if(result==4)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_S02.mac";
else if(result==5)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_N02.mac";
else if(result==6)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_SF2.mac";
else if(result==7)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_SCl2.mac";
else if(result==8)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_ClO2.mac";
else if(result==9)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_Cl2O.mac";
else if(result==10)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_GeCl2.mac";
else if(result==11)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_GeF2.mac";
else if(result==12)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_OF2.mac";
else if(result==13)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_SeO2.mac";
else if(result==14)execmacro macrodir + "%eduDV%c2v12n_SiF2.mac";
;
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--

```

## 3-4-5. 【c:\dvxa\Macros\eduDV\c2v12n\_H2O.mac】

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
loadll hidemarudir + "%DengakuDLL.dll"; // 田楽 DLL のロード
if (!result) {
    message "DengakuDLL.dll をロードできませんでした。";
    endmacro;
}
$path_dvdir = getenv("dvdir");
$dirname = "c2v12n_H2O_" + year + month + day + hour + minute + second;
if (!dllfunc("MKDIR", "/p " + $path_dvdir + "%CALC%" + $dirname)) {
    message "新規フォルダの作成に失敗しました。";
    endmacro;
}
if (!dllfunc("SETCURDIR", $path_dvdir + "%CALC%" + $dirname)) {
    message "新規フォルダに移動できませんでした。";
    endmacro;
}
runsync2 $path_dvdir + "%EXEC%C2V12N_AUTO.BAT H2O"; // c2v12 n H2O の実行
readonlyopenfile "c2v12n_H2O_time.txt";
openfile "f06z";
openfile "f26";
readonlyopenfile "bllist.out";
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--

```



```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
readonlyopenfile "f08e";
readonlyopenfile "F08E.hlgap";
readonlyopenfile "F08E.hlgaps";
readonlyopenfile "f08p";
readonlyopenfile "F08P_S";
readonlyopenfile "i08";
readonlyopenfile "bn8";
openfile "f01";
endmacro;
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

3-4-6. 【c:¥dvxa¥exec¥c2v12n\_AUTO.bat】

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
@echo off
if exist f01 goto err1
if exist f25 goto err2
%dvdir%¥object¥c2v12n.exe <%dvdir%¥data¥c2v12_%1.txt
copy %dvdir%¥data¥c2v12 f25
call %dvdir%¥exec¥makef05scfs
call %dvdir%¥exec¥existf05
if exist F05exist.txt goto fexist
goto err3
:fexist
del F05exist.txt
echo *****
echo          d          DDDD  V  V
echo          d          D  D  V  V
echo   eee    dddd    u  u  D  D  V  V
echo  e  e  d  d    u  u  D  D  V  V
echo  eeee  d  d    u  u  D  D  V  V
echo  e    d  d    u  u  D  D  V  V
echo  eeee  dddd    uuu  DDDD  V
echo *****
echo  CCC    222          11    222
echo  C  C  2  2  v  v  111    2  2
echo  C      2  v  v    1      2
echo  C      2  v  v    1      2
echo  C  C  2  v  v    1      2
echo  C  C  2  v    1      2
echo  CCC  22222  v    11111  22222
echo *****
echo  NN  N          SSS          i
echo  NN  N  ooo  nnnn  S  S  pppp          nnnn
echo  N  N  N  o  o  n  n  S  p  p  i  i  n  n
echo  N  N  N  o  o  n  n  S  p  p  i  i  n  n
echo  N  NN  o  o  n  n  S  pppp  i  i  n  n
echo  N  NN  o  o  n  n  S  S  p  i  i  n  n
echo  N  N  ooo  n  n  SSS  p  i  i  i  n  n
echo *****
echo  SSS  CCC  A  TTTT
echo  S  S  C  C  A  A  T  sss  t  aaaa  r  rr  t
echo  S  C  A  A  T  s  s  tttt  a  rr  r  tttt
echo  S  C  A  A  T  s  t  aaaa  r  t
echo  S  C  C  AAAAA  T  s  t  a  a  r  t
echo  S  S  C  C  A  A  T  s  s  t  t  a  aa  r  t  t
echo  SSS  CCC  A  A  T  sss  t  aa  a  r  t
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
echo *****
echo [c2v12n_%1 DV-Xalpha(SCAT) start] > c2v12n_%1_time.txt
time < %dmdir%\data\return.key | find "." >> c2v12n_%1_time.txt
goto scatrun
:scatrun
call %dmdir%\exec\dvscat
if exist converge.bat goto del1
goto cont1
:del1
del converge.bat
goto cont1
:cont1
if exist convd.txt goto del2
goto cont2
:del2
del convd.txt
goto cont2
:cont2
if exist notconv.txt goto del3
goto cont3
:del3
del notconv.txt
goto cont3
:cont3
call %dmdir%\exec\cnvchk150
call converge.bat
if exist convd.txt goto cont4
if exist notconv.txt goto cont4
del converge.bat
goto scatrun
:cont4
echo [c2v12n_%1 DV-Xalpha(SCAT) end] >> c2v12n_%1_time.txt
time < %dmdir%\data\return.key | find "." >> c2v12n_%1_time.txt
echo *****
echo SSS      CCC      A      TTTT      d
echo S  S  C  C  A  A  T              nnnn      d
echo S      C      A  A  T              eee  n  n  dddd
echo S      C      A  A  T              e  e  n  n  d  d
echo S      C  C  AAAAA  T              eeee  n  n  d  d
echo S  S  C  C  A  A  T              e      n  n  d  d
echo SSS      CCC  A  A  T              eeee  n  n  dddd
echo *****
del converge.bat
echo *****
echo CCC      000      NN  N  TTTT  RRRR  DDDD      A  L      L
echo C  C  O  O  NN  N  T  R  R  D  D  A  A  L      L
echo C      O  O  N  N  N  T  R  R  D  D  A  A  L      L
echo C      O  O  N  N  N  T  RRRR  D  D  A  A  L      L
echo C  C  O  O  N  NN  T  R  R  D  D  AAAAA  L      L
echo C  C  O  O  N  NN  T  R  R  D  D  A  A  L      L
echo CCC      000  N  N  T  R  R  DDDD  A  A  LLLLL  LLLLL
echo *****
call %dmdir%\exec\contrdall
dir/w *.sca
echo *****
echo NN  N  EEEEE  TTTT  CCC
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
echo NN  N  E          T    C    C
echo N  N  N  E          T    C
echo N  N  N  EEEE      T    C
echo N  NN  E          T    C    C
echo N  NN  E          T    C    C
echo N  N  EEEEE      T    CCC
echo *****
call %dmdir%¥exec¥netc
echo *****
echo BBBB  NN  N  DDDD    000    DDDD  RRRR
echo B  B  NN  N  D  D  O  O  D  D  R  R
echo B  B  NN  N  D  D  O  O  D  D  R  R
echo BBBB  NN  N  D  D  O  O  D  D  RRRR
echo B  B  N  NN  D  D  O  O  D  D  R  R
echo B  B  N  NN  D  D  O  O  D  D  R  R
echo BBBB  N  N  DDDD    000    DDDD  R  R
echo *****
call %dmdir%¥exec¥bndodr
echo *****
echo PPPP    000    PPPP    A    NN  N  L      SSS
echo P  P  O  O  P  P  A  A  NN  N  L      S  S
echo P  P  O  O  P  P  A  A  NN  N  L      S
echo PPPP    O  O  PPPP    A  A  NN  N  L      S
echo P      O  O  P      AAAAA  N  NN  L      S
echo P      O  O  P      A  A  N  NN  L      S  S
echo P      000  P      A  A  N  N  LLLLL  SSS
echo *****
call %dmdir%¥exec¥popanls
rename F08P F08P_S
echo *****
echo PPPP    000    PPPP    A    NN  N  L
echo P  P  O  O  P  P  A  A  NN  N  L
echo P  P  O  O  P  P  A  A  NN  N  L
echo PPPP    O  O  PPPP    A  A  NN  N  L
echo P      O  O  P      AAAAA  N  NN  L
echo P      O  O  P      A  A  N  NN  L
echo P      000  P      A  A  N  N  LLLLL
echo *****
call %dmdir%¥exec¥popanl
echo *****
echo A      TTTT  L      I I I I  SSS  TTTT
echo A  A      T  L      I  S  S  T
echo A  A      T  L      I  S      T
echo A  A      T  L      I      S  T
echo AAAAA  T  L      I      S  T
echo A  A      T  L      I  S  S  T
echo A  A      T  LLLLL  I I I I  SSS  T
echo *****
call %dmdir%¥exec¥atlist >atlist.out
echo *****
echo BBBB  L      L      I I I I  SSS  TTTT
echo B  B  L      L      I  S  S  T
echo B  B  L      L      I  S      T
echo BBBB  L      L      I      S  T
echo B  B  L      L      I      S  T
echo B  B  L      L      I  S  S  T
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
echo BBBB  LLLLL LLLLL IIIII  SSS  T
echo *****
call %dmdir%¥exec¥bllist >bllist.out
echo *****
echo PPPP  RRRR  EEEEE  SSS  TTTT  SSS
echo P  P  R  R  E      S  S  T  S  S
echo P  P  R  R  E      S      T  S
echo PPPP  RRRR  EEEE  S      T  S
echo P      R  R  E      S  T  S
echo P      R  R  E      S  S  T  S  S
echo P      R  R  EEEEE  SSS  T  SSS
echo *****
call %dmdir%¥exec¥prests
echo *****
echo W  W  A  V  V  NN  N  U  U  M  M
echo W  W  A A  V  V  NN  N  U  U  MM MM
echo W  W  A  A  V  V  NN  N  U  U  M M M
echo W W W  A  A  V  V  NN  N  U  U  M M M
echo W W W  AAAAA V  V  N  NN  U  U  M  M
echo WW WW  A  A  V  V  N  NN  U  U  M  M
echo W  W  A  A  V  N  N  UUU  M  M
echo *****
call %dmdir%¥exec¥wavnum <%dmdir%¥data¥zero
echo *****
echo M  M  A  K  K  EEEEE  L      000  4
echo MM MM  A A  K  K  E      L      0  0  44
echo M M M  A  A  K  K  E      L      0  00  4  4
echo M M M  A  A  KK      EEEE  L      0  0  0  4  4
echo M  M  AAAAA K  K  E      L      00  0  44444
echo M  M  A  A  K  K  E      L      0  0  4
echo M  M  A  A  K  K  EEEEE  LLLLL  000  4
echo *****
call %dmdir%¥exec¥make104 <%dmdir%¥data¥three
echo *****
echo L      V  V  L      SSS  H  H  M  M
echo L      V  V  L      S  S  H  H  MM MM
echo L      V  V  L      S      H  H  M M M
echo L      V  V  L      S      HHHH  M M M
echo L      V  V  L      S  H  H  M  M
echo L      V V  L      S  S  H  H  M  M
echo LLLLL  V  LLLLL  SSS  H  H  M  M
echo *****
call %dmdir%¥exec¥lvlsh
echo *****
echo H  H  L      GGG  A  PPPP
echo H  H  L      G  G  A  A  P  P
echo H  H  L      G      A  A  P  P
echo HHHHH  L      G GGG  A  A  PPPP
echo H  H  L      G  G  AAAAA P
echo H  H  L      G  G  A  A  P
echo H  H  LLLLL  GGG  A  A  P
echo *****
call %dmdir%¥exec¥hlgap
echo *****
echo H  H  L      GGG  A  PPPP  SSS
echo H  H  L      G  G  A  A  P  P  S  S
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
echo H   H   L           G       A   A   P   P   S
echo HHHHH L           G GGG   A   A   PPPP   S
echo H   H   L           G   G   AAAAA P           S
echo H   H   L           G   G   A   A   P           S   S
echo H   H   LLLLL   GGG   A   A   P           SSS
echo *****
call %dmdir%¥exec¥hlgaps
type i08
type f08e
if exist notconv.txt goto notconv
del convd.txt
goto end
:notconv
echo;
echo *****
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
echo *****
echo *** SCAT (NonSpin version) has not been converged yet. ***
echo *****
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
echo *****
del notconv.txt
goto end
:err1
echo ***ERROR*** f01 already exist
goto end
:err2
echo ***ERROR*** f25 already exist
goto end
:err3
echo ***ERROR*** F05 not exist
goto end
:end

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
3-4-7. 【c:¥dvxa¥data¥c2v12_H2O.txt】
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--
8
1
0.9579
104.50
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7--

```

#### 4. Auto-eduDV で自動入力されるデータの一覧

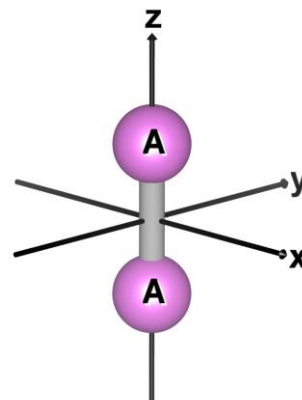
※特に引用がない限り、化学便覧基礎編改訂 5 版[27]に掲載されている値。

##### 4-1. c:¥dvxa¥data¥a2\_\*.txt

→ 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( $Cl_2$ )

入力されている情報: 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





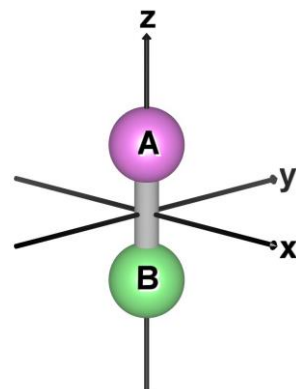
2	N <sub>2</sub>	7	1.0977
3	O <sub>2</sub>	8	1.2075
4	F <sub>2</sub>	9	1.4119
5	Cl <sub>2</sub>	17	1.9878
6	Br <sub>2</sub>	35	2.2811
7	I <sub>2</sub>	53	2.6663

## 4-2. c:\dvxa\data\ab\_\*.txt

→ 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)

入力されている情報: 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

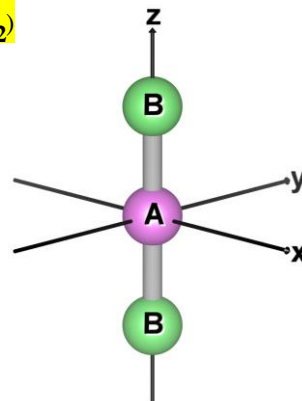


## 4-3. c:\dvxa\data\ab2\_\*.txt

→ 直線 AB<sub>2</sub>(B-A-B)型分子( $D_{\infty h}$  対称) 例: 二酸化炭素(CO<sub>2</sub>), 二硫化炭素(CS<sub>2</sub>)

入力されている情報: 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 <sub>2</sub>	A	B	A-B
1	CO <sub>2</sub>	6	8	1.1600
2	CS <sub>2</sub>	6	16	1.5525
3	KrF <sub>2</sub>	36	9	1.8769
4	XeF <sub>2</sub>	54	9	1.9744
5	HgCl <sub>2</sub>	80	17	2.252

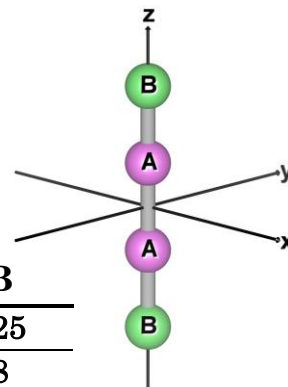


## 4-4. c:\dvxa\data\aa2b2\_\*.txt

→ 直線 A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>(B-A-A-B)型分子( $D_{\infty h}$  対称) 例: アセチレン(H-C≡C-H)

入力されている情報: 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 <sub>2</sub> B <sub>2</sub>	A	B	A-A	A-B
1	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	6	1	1.2024	1.0625
2	Hg <sub>2</sub> I <sub>2</sub>	80	53	2.69	2.68

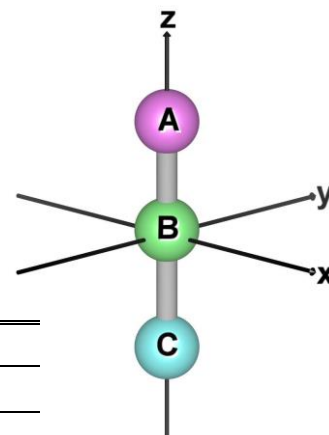


## 4-5. c:¥dvxa¥data¥abc\_\*.txt

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

入力されている情報: 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

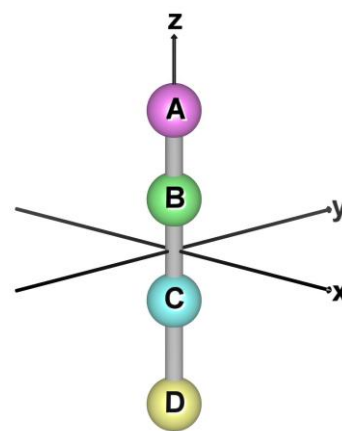


## 4-6. c:¥dvxa¥data¥abcd\_\*.txt

→ 直線 ABCD 型分子( $C_{\infty v}$  対称)

入力されている情報: 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.	ABCD	A	B	C	D	A-B	B-C	C-D
1	HCNO	1	6	7	8	1.027	1.168	1.199

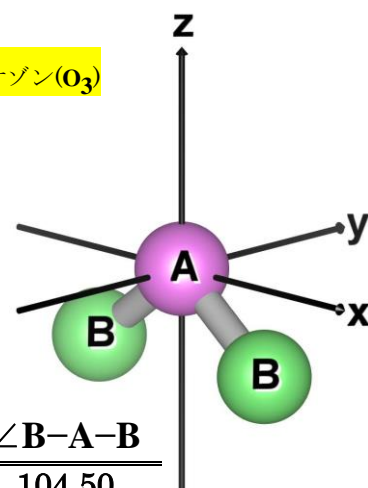


## 4-7. c:¥dvxa¥data¥c2v12\_\*.txt

→ 折れ線 AB<sub>2</sub> 型分子( $C_{2v}$  対称) 例: 水(H<sub>2</sub>O), 硫化水素(H<sub>2</sub>S), オゾン(O<sub>3</sub>)

入力されている情報: 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 <sub>2</sub>	A	B	A-B	∠B-A-B
1	H <sub>2</sub> O	8	1	0.9579	104.50
2	H <sub>2</sub> S	16	1	1.3366	87.77
3	O <sub>3</sub>	8	8	1.2716	117.79
4	SO <sub>2</sub>	16	8	1.4308	119.33
5	NO <sub>2</sub>	7	8	1.1946	133.85
6	SF <sub>2</sub>	16	9	1.5875	98.05

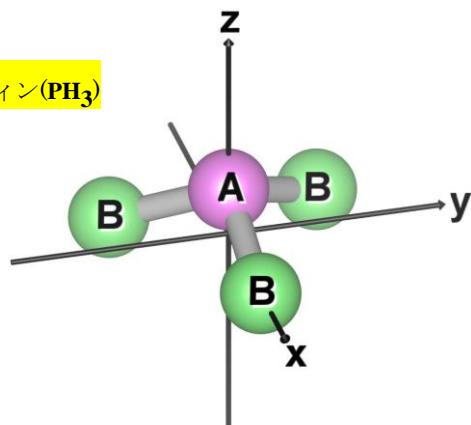


7	SCl <sub>2</sub>	16	17	2.015	102.7
8	ClO <sub>2</sub>	17	8	1.4698	117.40
9	Cl <sub>2</sub> O	8	17	1.6959	110.89
10	GeCl <sub>2</sub>	32	17	2.183	100.3
11	GeF <sub>2</sub>	32	9	1.7321	97.15
12	OF <sub>2</sub>	8	9	1.4052	103.07
13	SeO <sub>2</sub>	34	9	1.6076	113.83
14	SiF <sub>2</sub>	14	9	1.590	100.8

4-8. c:\¥dvxa¥data¥c3v13\_\*.txt

→ 三角錐 AB<sub>3</sub> 型分子(C<sub>3v</sub> 対称) 例: アンモニア(NH<sub>3</sub>), ホスフィン(PH<sub>3</sub>)

入力されている情報: 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(°)



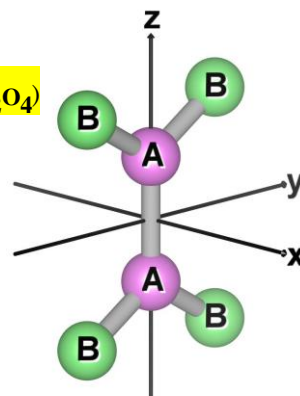
No.	AB <sub>3</sub>	A	B	A-B	∠B-A-B
1	NH <sub>3</sub>	7	1	1.012	106.7
2	PH <sub>3</sub>	15	1	1.561	97.7
3	AsH <sub>3</sub>	33	1	1.513	92.1
4	SbH <sub>3</sub>	51	1	1.704	91.6
5	NF <sub>3</sub>	7	9	1.365	102.4
6	PF <sub>3</sub>	15	9	1.561	97.7
7	AsF <sub>3</sub>	33	9	1.710	96.0
8	NCl <sub>3</sub>	7	17	1.759	107.1
9	PCl <sub>3</sub>	15	17	2.039	100.8
10	AsCl <sub>3</sub>	33	17	2.166	98.6
11	SbCl <sub>3</sub>	51	17	2.323	97.1
12	BiCl <sub>3</sub>	83	17	2.424	97.5
13	PBr <sub>3</sub>	15	35	2.216	101.0
14	AsBr <sub>3</sub>	33	35	2.324	99.6
15	BiBr <sub>3</sub>	83	35	2.63	90
16	AsI <sub>3</sub>	33	53	2.557	100.2
17	PrI <sub>3</sub>	59	53	2.901	114
18	GdI <sub>3</sub>	64	53	2.840	116
19	LuCl <sub>3</sub>	71	17	2.417	115

## 4-9. c:\¥dvxa¥data¥d2h24\_\*.txt

→ 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( $N_2O_4$ )

入力されている情報:

- 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(°)



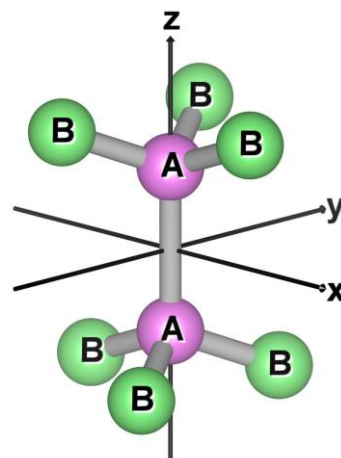
No.	$A_2B_4$	A	B	A-A	A-B	$\angle B-A-B$
1	$C_2H_4$	6	1	1.339	1.087	117.4
2	$C_2F_4$	6	9	1.31	1.319	112.4
3	$C_2Cl_4$	6	17	1.354	1.718	115.7
4	$N_2O_4$ (気相)	7	8	1.782	1.190	135.4
5	$N_2O_4$ (固相)	7	8	1.64	1.17	108

## 4-10. c:\¥dvxa¥data¥d3d26\_\*.txt

→ 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( $C_2F_6$ )

入力されている情報:

- 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	$\angle A-A-B$
1	$C_2H_6$	6	1	1.5351	1.0940	111.17
2	$C_2F_6$	6	9	1.545	1.326	109.8

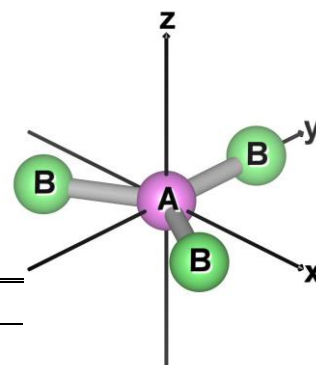
## 4-11. c:\¥dvxa¥data¥d3h13\_\*.txt

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

入力されている情報:

- ①: A の原子番号  
 ②: B の原子番号  
 ③: A-B の結合距離(Å)

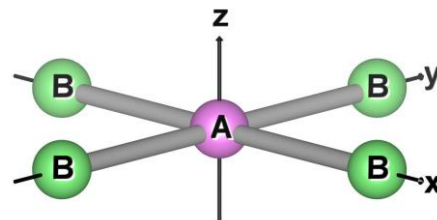
No.	$AB_3$	A	B	A-B
1	$BF_3$	5	9	1.3070
2	$BCl_3$	5	17	1.742
3	$BBr_3$	5	35	1.893
4	$BI_3$	5	53	2.118



## 4-12. c:\%dvxa\data%d4h14\_\*.txt

→ 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( $[PtCl_4]^{2-}$ )

入力されている情報: 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)



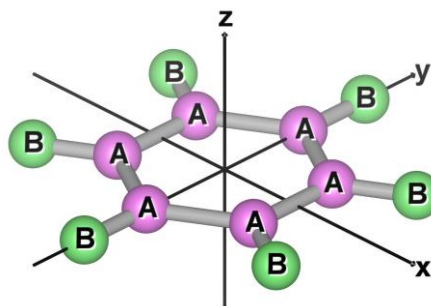
No.	$AB_4^{n+/n-}$	A	A の酸化数	B	B の酸化数	A-B	構造データ
1	$[PtCl_4]^{2-}$	78	2	17	-1	2.308	
2	$[PdCl_4]^{2-}$	46	2	17	-1	2.318	
3	$[AuCl_4]^-$	79	3	17	-1	2.282	文献 1

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

## 4-13. c:\%dvxa\data%d6h66\_\*.txt

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

入力されている情報: 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)



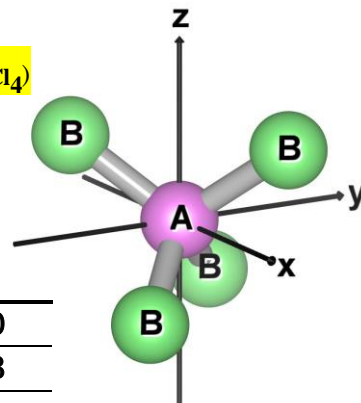
No.	$A_6B_6$	A	B	A-A	A-B	構造データ
1	$C_6H_6$	6	1	1.399	1.101	
2	$C_6F_6$	6	9	1.378	1.334	文献 1
3	$C_6Cl_6$	6	17	1.402	1.713	文献 2
4	$C_6Br_6$	6	35	1.400	1.881	文献 3
5	$C_6I_6$	6	53	1.399	2.109	文献 4

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.

## 4-14. c:\%dvxa\data%td14\_\*.txt

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

入力されている情報: 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



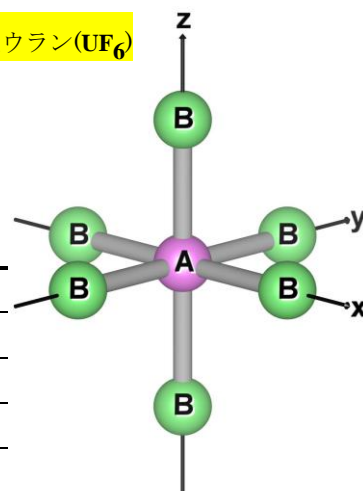
6	SiF <sub>4</sub>	14	9	1.5540
7	SiCl <sub>4</sub>	14	17	2.019
8	TiCl <sub>4</sub>	22	17	2.170
9	TiBr <sub>4</sub>	22	35	2.339
10	VCl <sub>4</sub>	23	17	2.138
11	GeH <sub>4</sub>	32	1	1.5143
12	GeCl <sub>4</sub>	32	17	2.113
13	GeBr <sub>4</sub>	32	35	2.272
14	ZrF <sub>4</sub>	40	9	1.90
15	ZrCl <sub>4</sub>	40	17	2.328
16	RuO <sub>4</sub>	44	8	1.706
17	SnH <sub>4</sub>	50	1	1.6909
18	SnCl <sub>4</sub>	50	17	2.281
19	XeO <sub>4</sub>	54	8	1.736
20	HfCl <sub>4</sub>	72	17	2.316
21	OsO <sub>4</sub>	76	8	1.712
22	ThF <sub>4</sub>	90	9	2.14
23	ThCl <sub>4</sub>	90	17	2.567

4-15. c:¥dvxa¥data¥oh16\_\*.txt

→ 正八面体 AB<sub>6</sub> 型分子(O<sub>h</sub> 対称) 例: ハフツ化硫黄(SF<sub>6</sub>), ハフツ化ウラン(UF<sub>6</sub>)

入力されている情報: ①: A の原子番号  
 ②: B の原子番号  
 ③: A-B の結合距離(Å)

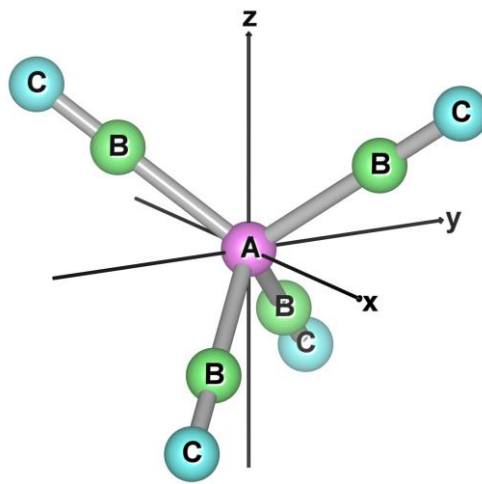
No.	AB <sub>6</sub>	A	B	A-B
1	SF <sub>6</sub>	16	9	1.5607
2	SeF <sub>6</sub>	34	9	1.685
3	MoF <sub>6</sub>	42	9	1.820
4	TeF <sub>6</sub>	52	9	1.815
5	WF <sub>6</sub>	74	9	1.832
6	ReF <sub>6</sub>	75	9	1.832
7	OsF <sub>6</sub>	76	9	1.831
8	IrF <sub>6</sub>	77	9	1.830
9	UF <sub>6</sub>	92	9	1.9962
10	NpF <sub>6</sub>	93	9	1.981
11	PuF <sub>6</sub>	94	9	1.971



## 4-16. c:\dvxa\data\td144\_\*.txt

→ 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( $[Ni(CO)_4]$ )

入力されている情報: 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)

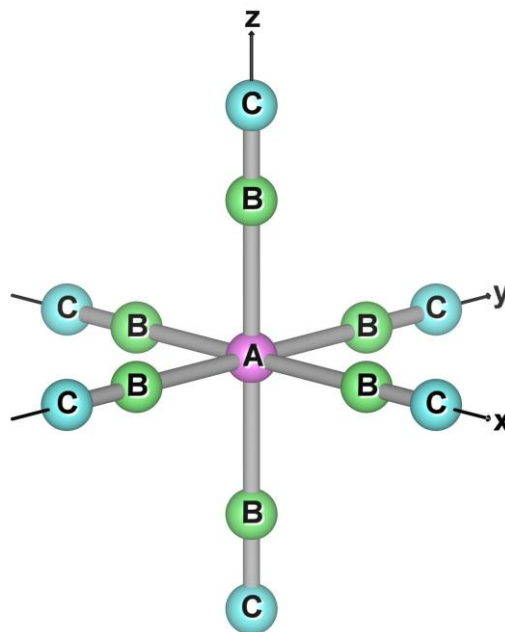


No.	$A(BC)_4$	A	B	C	A-B	B-C
1	$[Ni(CO)_4]$	28	6	8	1.838	1.141

## 4-17. c:\dvxa\data\oh166\_\*.txt

→ 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( $[Cr(CO)_6]$ )

入力されている情報: 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)



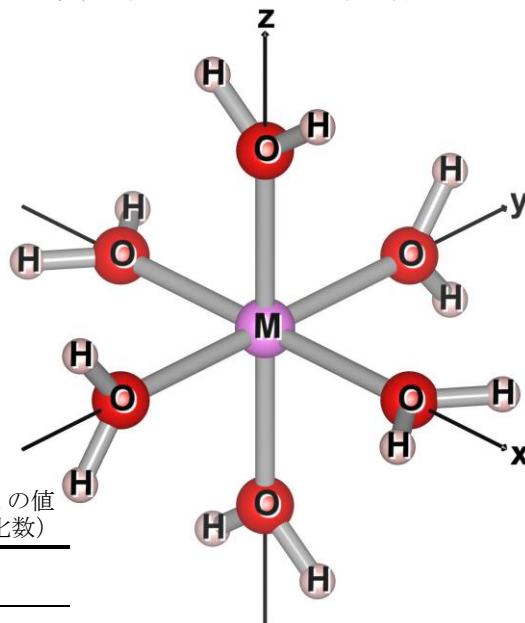
No.	$A(BC)_6$	A	B	C	A-B	B-C
1	$[Cr(CO)_6]$	24	6	8	1.92	1.16
2	$[V(CO)_6]$	23	6	8	2.015	1.138
3	$[Mo(CO)_6]$	42	6	8	2.063	1.145
4	$[W(CO)_6]$	74	6	8	2.059	1.149

## 4-18. c:\dvxa\data\mh2o6\_\*.txt

→ **M(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>** 型アクア錯イオン(**D<sub>2h</sub>** 対称) 例: ヘキサアクアコバルト(II)錯陽イオン([Co(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>2+</sup>)

※水分子を“点”と見なせば O<sub>h</sub> 対称になるが、水分子の H まで含めて考えると D<sub>2h</sub> 対称になる。水分子の O-H 距離や ∠H-O-H は固定である。ただし、実際の [M(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>n+</sup> 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<sub>2h</sub> 対称にはなっていない。この計算では、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。

入力されている情報: 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)

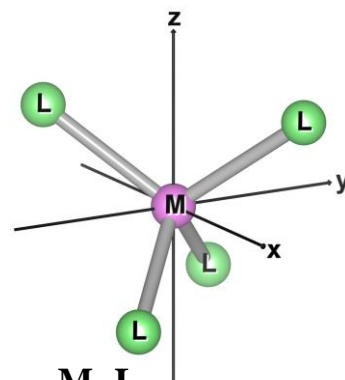


No.	[M(H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> ] <sup>n+</sup>	M	M-O	“n+” の n の値 (M の酸化数)
1	[Co(H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> ] <sup>2+</sup>	27	2.085	2
2	[Co(H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> ] <sup>3+</sup>	27	2.085	3
3	[Ni(H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> ] <sup>2+</sup>	28	2.079	2
4	[Ti(H <sub>2</sub> O) <sub>6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

## 4-19. c:¥dvxa¥data¥ml4\_\*.txt

→ 正四面体 $[\text{ML}_4]^{n+/n-}$ 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( $[\text{CoCl}_4]^{2-}$ )

入力されている情報: 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)

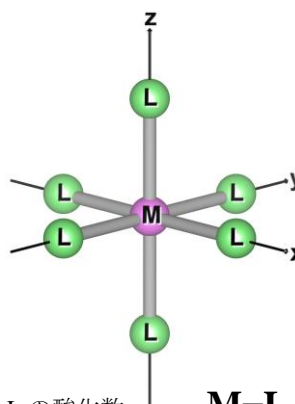


No.	$[\text{ML}_4]^{n+/n-}$	M	M の酸化数	L	L の酸化数	M-L
1	$[\text{CoCl}_4]^{2-}$	27	2	17	-1	2.254
2	$[\text{CoBr}_4]^{2-}$	27	2	35	-1	2.384
3	$[\text{CoI}_4]^{2-}$	27	2	53	-1	2.594

## 4-20. c:¥dvxa¥data¥ml6\_\*.txt

→ 正八面体 $[\text{ML}_6]^{n+/n-}$ 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( $[\text{CoF}_6]^{3-}$ )

入力されている情報: 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)



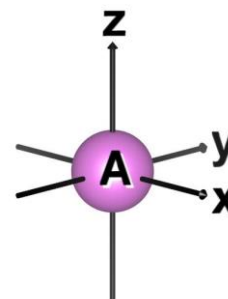
No.	$[\text{ML}_6]^{n+/n-}$	M	M の酸化数	L	L の酸化数	M-L
1	$[\text{CrF}_6]^{3-}$	24	3	9	-1	1.870
2	$[\text{CrCl}_6]^{3-}$	24	3	17	-1	2.335
3	$[\text{CrBr}_6]^{3-}$	24	3	35	-1	2.577
4	$[\text{CrI}_6]^{3-}$	24	3	53	-1	2.782

## 4-21. c:¥dvxa¥data¥atom\_\*.txt

→ 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

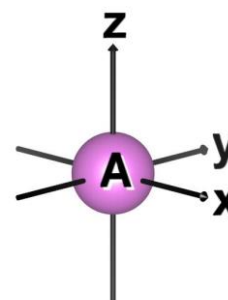
入力されている情報: ①: A の原子番号



## 4-22. c:¥dvxa¥data¥ion\_\*.txt

→ 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( $\text{Co}^{3+}$ )

入力されている情報: ①: A の原子番号  
 ②: A の酸化数 (形式電荷)



## 5. Auto-eduDV 機能の使い方

5-1. 秀丸エディタを起動する. **DV- $X\alpha$  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ある. 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**, **DVPLLOT...**, **MAKEC04D...**, **CONTRD**, **CONTRDALL**, **VESTA**, **エクスプローラ**, **コマンドプロンプト**といったボタンが表示されているはずである.

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- $X\alpha$  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- $X\alpha$** に関する様々なマクロを選択することができる.

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る. それぞれ, 登録されているマクロを起動できる.

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

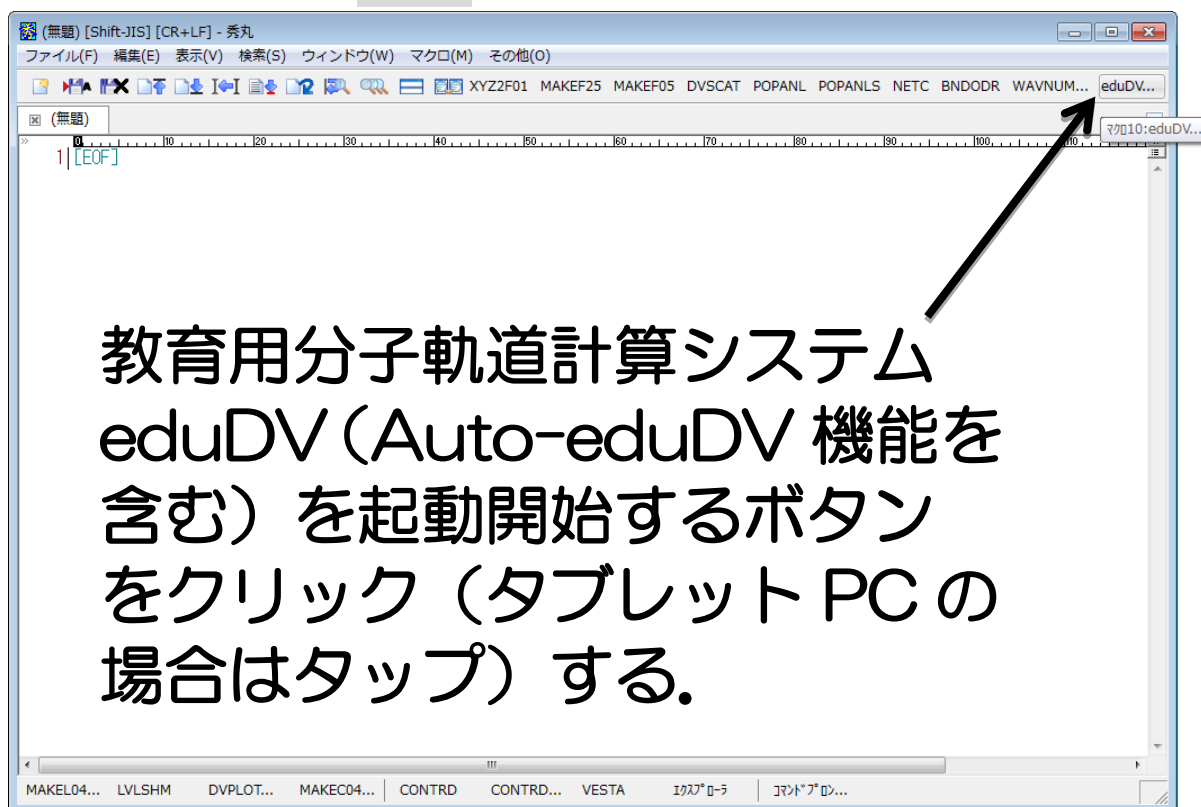
また, キーボードのファンクションキー(F1~F9)には, それぞれ以下のマクロが割り当てられている.

F1 <b>MAKEL04...</b>	F2 <b>LVLSHM</b>	F3 <b>DVPLLOT...</b>
F4 <b>MAKEC04D...</b>	F5 <b>CONTRD</b>	F6 <b>CONTRDALL</b>
F7 <b>VESTA</b>	F8 <b>エクスプローラ</b>	F9 <b>コマンドプロンプト</b>

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る (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がある).

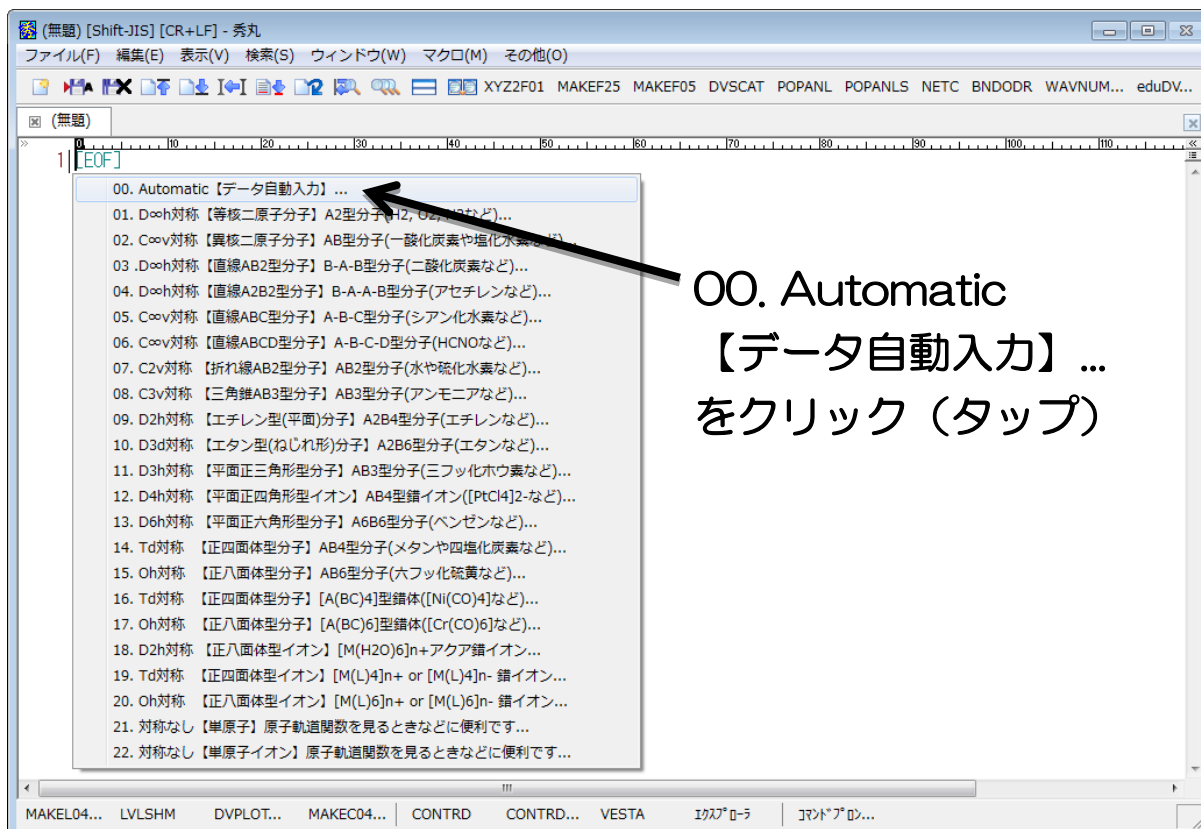
<b>XYZ2F01</b>	*.xyz を <b>F01</b> に変換
<b>MAKEF25</b>	対称軌道作成プログラム <b>MAKEF25</b> の実行
<b>MAKEF05</b>	<b>F01</b> から <b>F05</b> を作成
<b>DVSCAT</b>	<b>DV-<math>X\alpha</math></b> 法本体プログラム <b>SCAT</b> の実行
<b>POPANL</b>	マリケンボピュレーション解析
<b>POPANLS</b>	マリケンボピュレーション解析 (より詳細な情報を出力)
<b>NETC</b>	有効電荷(net charge)を求める
<b>BNDODR</b>	有効共有結合電荷を求める
<b>WAVNUM...</b>	波動関数の番号を調べる
<b>eduDV...</b>	教育用分子軌道計算システム <b>eduDV</b> の起動
クラスターモデル→	<b>MAKEUNITC...</b> , <b>MAKELAT...</b> , <b>DISPLAT...</b> , ほか7種類
グラフデータ →	<b>MAKEL04...</b> , <b>LVLSHM</b> , <b>MAKED04...</b> , ほか7種類
可視化 →	<b>DVPLLOT...</b> , <b>MAKEC04D...</b> , <b>CONTRD</b> , ほか5種類
その他 →	<b>HLGAP</b> , <b>HLGAPS</b> , <b>PRESTS</b> , ほか4種類
汎用マクロ →	<b>エクスプローラ</b> , <b>コマンドプロンプト</b> , <b>桁揃え</b>

5-2. ツールバー上の右端の **eduDV...** ボタンをクリックする (下図)。



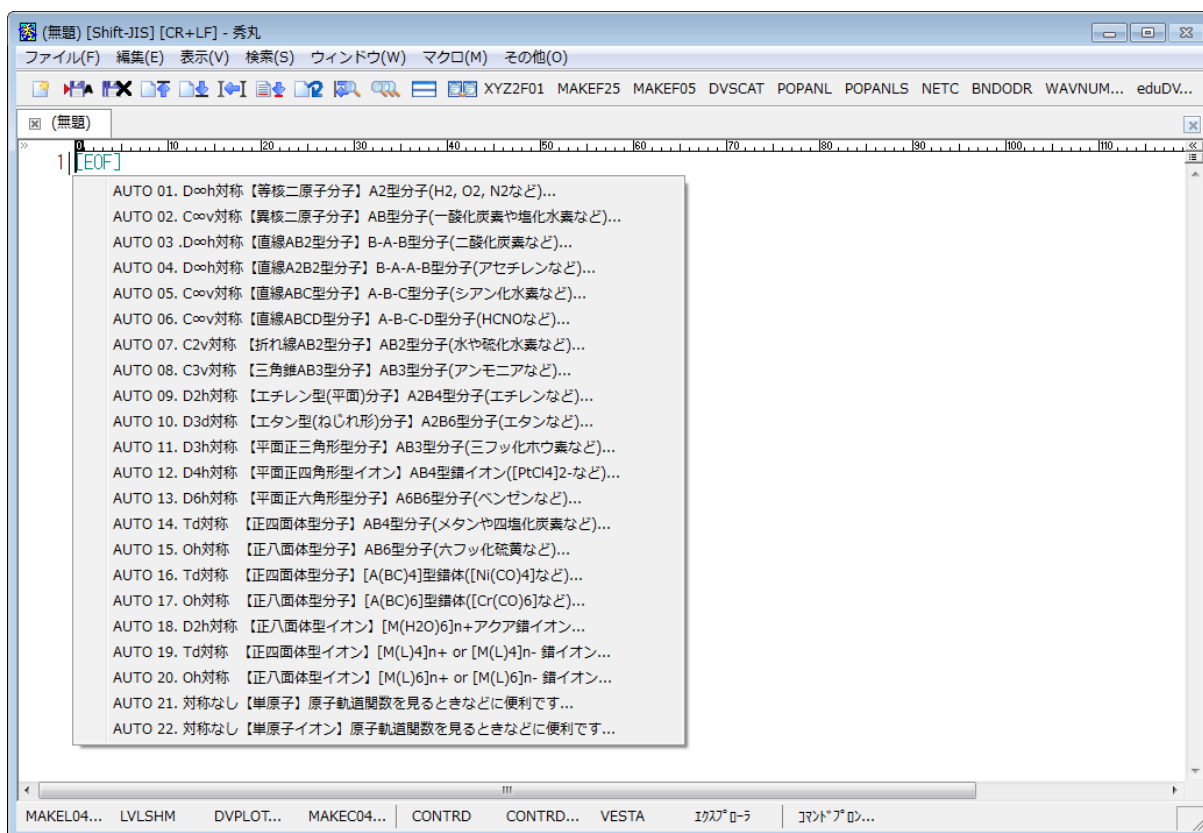
あるいは、キーボードで[Ctrl]キーを押しながら数字の[0]キーを押しても起動できる ([Ctrl]+0)。

5-3. **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】 ...** を選ぶ (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)。

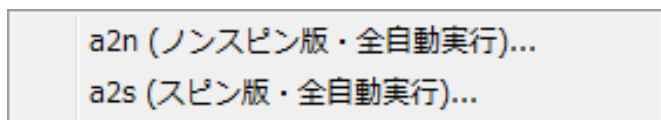




5-4. **Auto-eduDV** のプルダウンメニュー（属する点群（および分子の形）で分類された 22 種類のシステム）の中から、計算したい（**VESTA** で原子軌道、分子軌道を三次元可視化したい）原子、分子、イオンの属するシステムを選択する。



5-5. *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- $X\alpha$  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- $X\alpha$  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）のいずれかを選択する。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ある。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。



5-6. *No.* AUTO 01～20 のシステムの場合は，現れたメニューから，計算したい分子，イオンを選ぶ。それぞれの分子，イオンの **F01**（原子の原子番号と座標，さらにイオンの場合は初期電荷）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った。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蔵しており，自動的に使用されるので，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ない（キーボードに一切触れる必要がない）。次ページに示すのは，

No. AUTO 08 の  $AB_3$  型三角錐分子 ( $C_{3v}$  対称) のノンスピ版を選択した場合に現れるメニューである。例えば、アンモニア( $NH_3$ )を計算する場合は **NH3 アンモニア分子 ノンスピ版** を選べば良いし、スチビン( $SbH_3$ )を計算する場合は **SbH3 スチビン(水素化アンチモン)分子 ノンスピ版** を選べば良い。

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

5-7. No. AUTO 21 のシステム (単原子) の場合は、現れたメニューから、計算したい原子を選ぶ。これまでの **eduDV** の場合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ったが、**Auto-eduDV** では、原子番号 1 番から 94 番の元素メニューが現れるので、ユーザはメニューから計算したい元素を選ぶだけで、キーボードに一度も触れることなく、その元素の単原子の電子状態を計算し、**VESTA** で原子軌道を三次元可視化できる。

なお、このシステム (単原子) はノンスピ版のみ用意されており、スピ版は用意されていない。

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

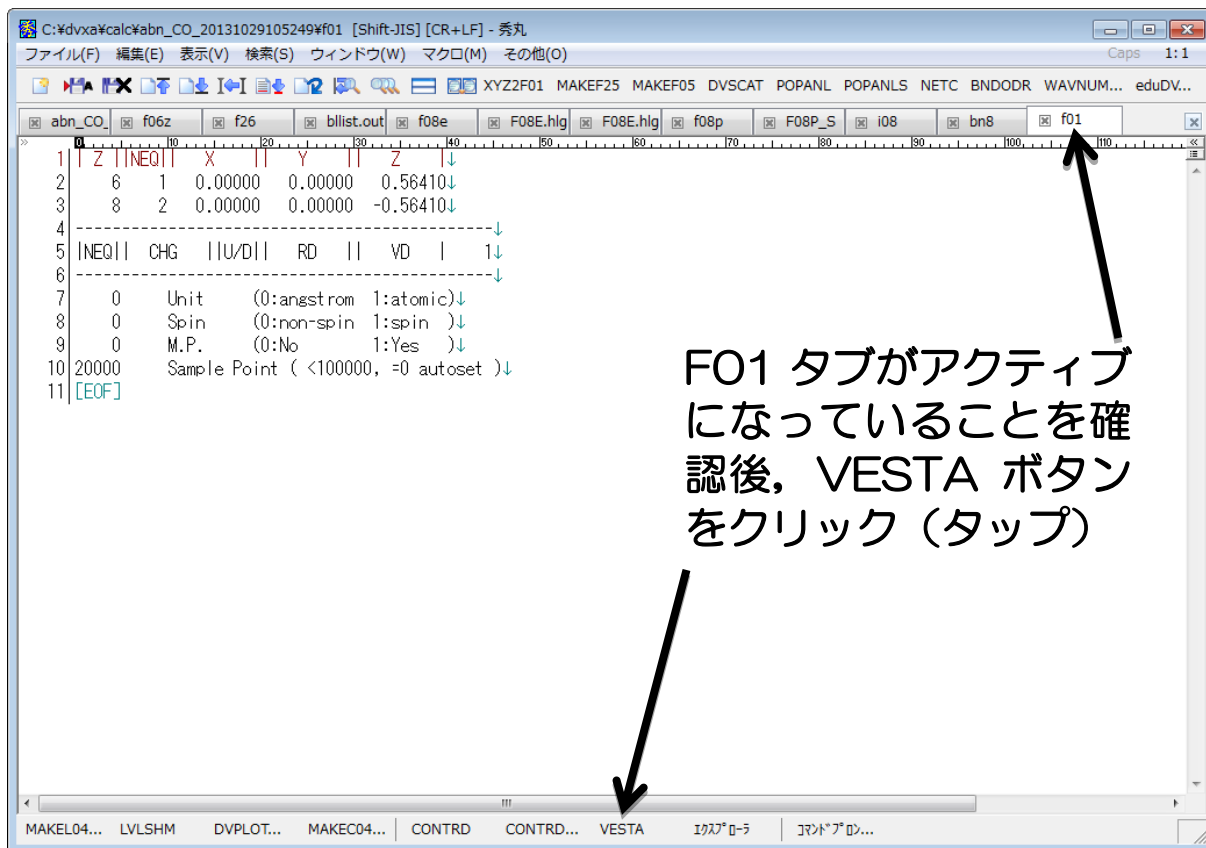
5-8. No. AUTO 22 のシステム (単原子イオン) では、まず元素を選び、次に酸化数を選ぶ。このシステム (単原子イオン) ではノンスピ版のみが用意されており、スピ版は用意されていない。

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]

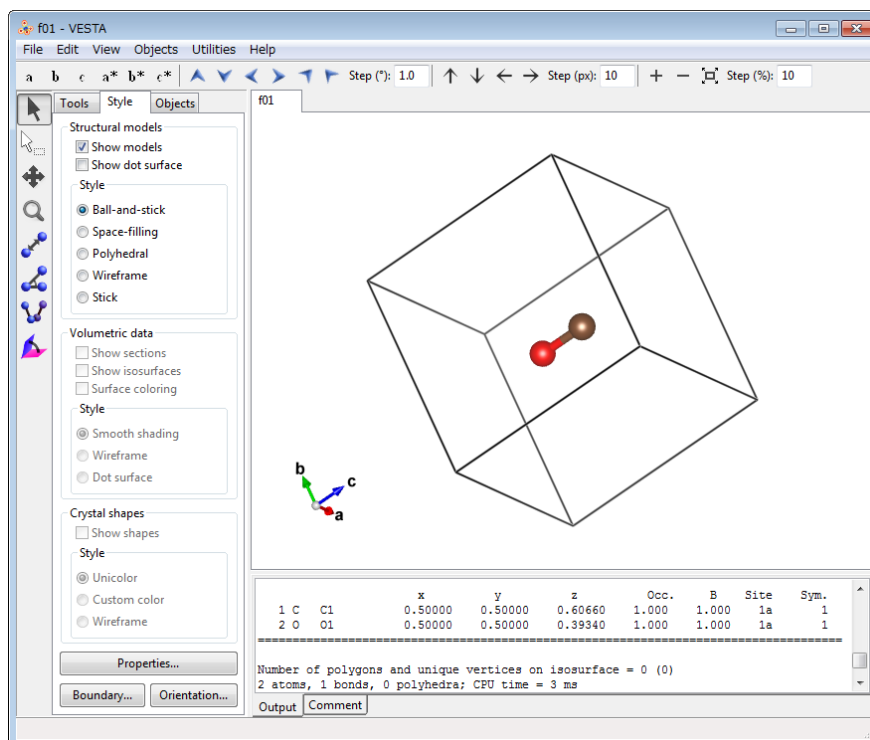
Pd (酸化数: 0) [atomn]  
 Pd 2+ (酸化数: II) [ionn]  
 Pd 3+ (酸化数: III) [ionn]  
 Pd 4+ (酸化数: IV) [ionn]

5-9. 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** が表に来ている (アクティブタブになっている). 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) する (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 (ノンスピ版) を実行した後の場面).



**VESTA** を起動した後, 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...** を選ぶ.

**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) する.



5-10. **Auto-eduDV** 実行後、秀丸エディタの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る(*No.* AUTO 02. C<sub>∞v</sub> 対称【異核二原子分子】で一酸化炭素分子(ノンスピ版)を実行した後の例)。

- ・ **abn\_CO\_time.txt**            **SCAT** の開始時刻と終了時刻が書いてある。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ある。
- ・ **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る。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、“Converged”は書かれていない。
- ・ **f26**                        **SCAT** 計算後の(最終的な)一般入力ファイル。 **SCAT** は **f05** を読んで、 **f26** を書き出す。 **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る。
- ・ **bllist.out**                主な原子間距離が出力されている。 **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る。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すれば良い。原子間距離や角度は、 **VESTA** で確認することもできる。
- ・ **f08e**                        分子軌道(または原子軌道)のエネルギー準位表。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る。
- ・ **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( $\text{cm}^{-1}$ ), 波長(nm)で出力されている。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るので、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らない。
- ・ **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( $\text{cm}^{-1}$ ), 波長(nm)で出力されている。
- ・ **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る。数字に 100 をかけるとパーセントになる。どの原子が何番かという番号(NEQ)は、 **F01** を参照すれば良い。
- ・ **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る), 原子軌道間の Overlap Population が出力されている。
- ・ **i08**                        各原子のネットチャージ(純電荷)が記されている。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、合計はゼロになる(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、イオンの電荷になる。
- ・ **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る。  
**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る。 **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ない (値がゼロになっている)。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 ( $H-C\equiv C-H$ ) 分子を計算 (ノンスピ版) 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  $1.5383 \div 2 \approx 0.769$  と **bn8** に出力されているが, 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ない。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:¥dvsxa¥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る (1, 1, 2, 2 となっているのを, 1, 2, 3, 4 に書き換える)。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る。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) として計算されたので, 炭素間の有効共有結合電荷 1.744 が出力されている。

#### ・ 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る。**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る。

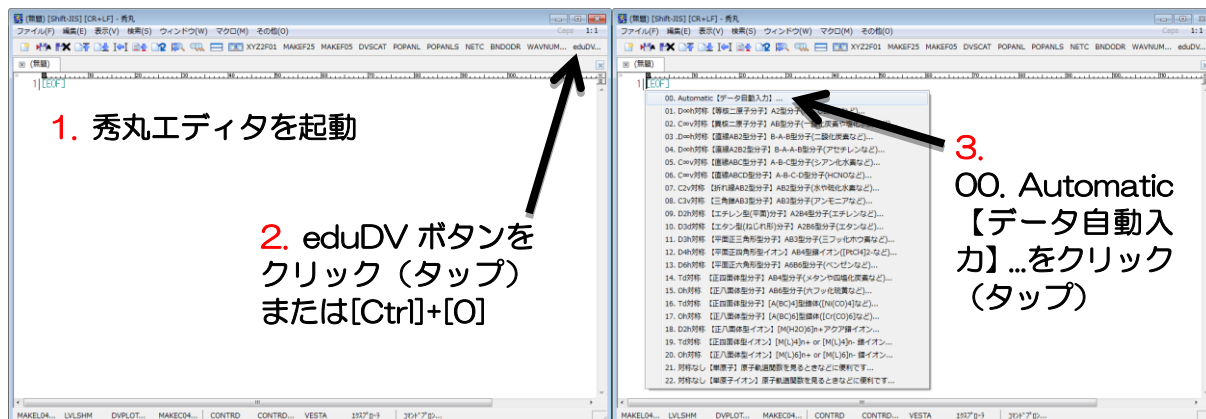
以上のファイルが秀丸エディタでオープンされており, タブをクリックすることによって切り替えて表示できる。なお, *No.* AUTO 21【単原子】および *No.* AUTO 22【単原子イオン】の場合は, 必要がないため, **bllist.out**, **F08E.hlgap**, **F08E.hlgaps**, **f08p**, **F08P\_S**, **bn8** は出力されない。

### 6. Auto-eduDV 機能の講義での使用例 (本学大学院理学研究科化学専攻後期選択科目「錯体化学 II」)

#### 槌田龍太郎の分光化学系列(spectrochemical series)

$CN^- > C_5H_5^- > NO_2^-, SO_3^{2-} > bpy, phen > trien, dien, en > NH_3, py > gly^- > edta^{4-} > acac^- > ONO^-, H_2O, NCS^- > ox^{2-} > NO_3^-, SO_4^{2-} > RCO_2^-, OH^-, CO_3^{2-} > S_2O_3^{2-}, SCN^- > F^- > (RO)_2PS_2^- > N_3^- > Cl^- > CrO_4^{2-} > Br^- > I^-$

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。





4. AUTO 20.  $O_h$  対称【正八面体型イオン】をクリック(タップ)

5. ml6n (ノンスピ版・全自動実行)...をクリック(タップ)

6.  $[CrF_6]^{3-}$  ヘキサフルオリドクロム(III)酸イオン ノンスピ版をクリック(タップ)

7. F08E.hlgap タブをクリック(タップ)

8.  $[CrF_6]^{3-}$  の HOMO が  $2t_{2g}$  軌道, LUMO が  $4e_g$  軌道, それらのエネルギー差が 2.859 eV, 波長に換算すると 433.6 nm であることが分かる。

9. ファイル(F) - 全終了 (Q)をクリック(タップ)

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, 計算結果は以下になる。

錯イオン	HOMO	LUMO	$\Delta_o$ (エネルギー)	$\Delta_o$ (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

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( $d_{xy}$ ,  $d_{yz}$ ,  $d_{zx}$ )と  $e_g$  軌道( $d_{z^2}$ ,  $d_{x^2-y^2}$ )に分裂する。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( $3d_{xy}$ ,  $3d_{yz}$ ,  $3d_{zx}$ )と  $e_g$  軌道( $3d_{z^2}$ ,  $3d_{x^2-y^2}$ )に分裂する。この結晶場分裂の大きさ  $\Delta_o$



(教科書によっては、 $10Dq$  と呼ばれる) は、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 機能を使って計算した 4 種類のクロム(III)錯体の  $\Delta_o$  の結果は、槌田の分光化学系列に従っていることが分かる。

## 7. まとめ

教育用分子軌道計算システム eduDV に、データ自動入力(Auto-eduDV)機能を組み込むことに成功し、基礎化学、無機化学、物理化学、量子化学などの講義・演習で、限られた時間内で大勢の学生に、原子、分子、イオンの原子軌道、分子軌道を各自パソコンで計算させ、三次元可視化させることが極めて容易になった。

20 年前の本学情報処理センターの計算環境 (FACOM M-380) では数時間の計算時間が必要だった無機化合物の電子状態の第一原理計算[13]は、現在の本学情報処理センターの学生実習用パソコン環境では数分で計算が終了する。波動関数の三次元可視化に至っては、20 年前は想像もできなかった高度な処理が一瞬で実現できる。

20 年前のスーパーコンピュータをはるかに凌ぐ高性能のコンピュータを、現在は講義の中で、学生が一人一台、自由に使える環境にある。高等専門学校や大学の基礎化学教育で必要な原子、分子、イオンの量子化学的な取り扱いが、Auto-eduDV 機能を実装した eduDV によって、教員にも学生にも負担をかけずに行えるようになった。環境構築に必要なソフトウェアは全て無償で教育現場に導入できるため、学校に経済的負担もかけない(教育現場に何十台～何百台もある学生実習用パソコンに、市販の(有償の)量子化学ソフトウェアを導入することは、予算上困難である)。

なお、今回開発した Auto-eduDV 機能を実装した eduDV は、Windows 2000, Windows XP, Windows Vista, Windows 7 (32-bit 環境, 64-bit 環境), Windows 8.1 (64-bit 環境)で正常に動作することを確認している。Windows 8.1 のタブレット PC (Microsoft Surface Pro)での正常動作も確認している。

## 参考文献・URL

- [1] 坂根弦太, “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 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).
- [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  $X\alpha$* , **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- $X\alpha$ 法計算支援環境の開発”, *Bulletin of the Society for Discrete Variational  $X\alpha$* , **20**(1&2), 252-253 (2007).
- [4] Genta Sakane, Koichi Momma, Fujio Izumi, “Building of an Integrated Assistance Environment for the DV- $X\alpha$  Method”, 7<sup>th</sup> Award for Distinguished Contributions, Memorial Award Lecture, *Bulletin of the Society for Discrete Variational  $X\alpha$* , **21**(1&2), 13-17 (2008).
- [5] 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, **31**, 9-17 (2010).
- [6] 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, **32**, 11-36 (2011).
- [7] 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, **33**, 1-31 (2012).
- [8] 坂根弦太, “化学が大好きな高校生・大学生のみなさんへ, 分子軌道計算を今すぐ始めよう!, 教科書に出てくる原子, 分子, 錯体の楽しい電子状態計算～パソコンで簡単に始められる周期表の全元素を

- 対象とした分子軌道計算～”, <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/fun/index.html#edudv>
- [9] 坂根弦太, “はじめての DV-X $\alpha$ 法分子軌道計算支援環境－タブエディタ (秀丸エディタ) 上で使う DV-X $\alpha$ 法計算支援環境利用の手引き－”, 1-176 (2013),  
<http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [10] 坂根弦太, “人材育成のための授業紹介, 化学, 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 (2010),  
[http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03\\_03.html](http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html)
- [11] Hirohiko Adachi, Masaru Tsukada, Chikatoshi Satoko, “Discrete variational X $\alpha$  cluster calculations. I. Application to metal clusters”, *Journal of the Physical Society of Japan*, **45**(3), 875-883 (1978).
- [12] 足立裕彦, “量子材料化学入門－DV-X $\alpha$ 法からのアプローチ”, 三共出版 1991 年.
- [13] 坂根弦太, “DV-X $\alpha$ 法による不完全キューバン型モリブデンクラスター錯体[Mo<sub>3</sub>X<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>]<sup>4+</sup> (X = O, S) の電子状態”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **14**, 65-69 (1993).
- [14] 坂根弦太, “混合金属クラスター錯体の分子軌道計算－DV-X $\alpha$ 法による[Mo<sub>3</sub>MS<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>10</sub>]<sup>4+</sup> (M = Fe, Ni) の電子状態の計算”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **15**, 51-60 (1994).
- [15] 坂根弦太, “硫黄架橋キューバン型モリブデンクラスター錯体[Mo<sub>4</sub>S<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>12</sub>]<sup>n+</sup> (n = 4, 5, 6) の電子状態”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **16**, 79-85 (1995).
- [16] 坂根弦太, “モリブデン錯体の DV-X $\alpha$ 計算におけるパラメーターの効果”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **17**, 35-38 (1996).
- [17] 早藤貴範, 今永俊治, 木村仁史編, 岩沢美佐子, 足立裕彦共著, “DV-X $\alpha$ 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 年.
- [18] 坂根弦太, “DV-X $\alpha$ 法による X 線光電子スペクトル計算”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **18**, 11-16 (1997).
- [19] 坂根弦太, “DV-X $\alpha$ 法による[MoCl<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>の電子状態計算”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **19**, 27-37 (1998).
- [20] 足立裕彦監修, 小和田善之, 田中功, 中松博英, 水野正隆共著, “はじめての電子状態計算 ■DV-X $\alpha$ 分子軌道計算への入門■”, 三共出版 1998 年.
- [21] 小和田善之, 山田善信, “はじめての電子状態計算 ■DV-X $\alpha$ 分子軌道計算への入門■”,  
ダウンロード・ページ, 次世代版 dvscat プログラム, dvxa\_v1\_04,  
<http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html>
- [22] 有限会社サイト企画, “秀まるおのホームページ”, ソフトウェア, 秀丸エディタ,  
<http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>
- [23] 泉富士夫, “泉 富士夫の粉末回折情報館”, 3D Visualization System VENUS,  
11.1.2 The assistance environment for the DV-X $\alpha$  method,  
[http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance\\_environment](http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance_environment)
- [24] Koichi Momma, Fujio Izumi, “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data”, *Journal of Applied Crystallography*, **44**(6), 1272-1276 (2011),  
<http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970>
- [25] 門馬綱一, “JP-Mineral”, Software, VENUS system, VESTA(Visualization for Electronic and Structural Analysis, [http://www.geocities.jp/kmo\\_mma/crystal/jp/vesta.html](http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html)
- [26] Open Watcom, version 1.9, <http://www.openwatcom.org/>
- [27] 日本化学会編纂, 化学便覧基礎編 改訂 5 版, 第 II 巻, 16.1 分子構造, 表 16.3 有機化合物の構造定数, p. II-802, 808, 丸善, 2004 年, 化学書資料館, <https://www.chem-reference.com/>