

# DV-X $\alpha$ 法の高等教育現場での活用

(岡山理科大学 教育推進機構 基盤教育センター 科学技術教育部門) 坂根 弦太\*  
(岡山理科大学 非常勤講師) 森 義裕

## Application of the Discrete Variational X $\alpha$ Method in Higher Education

Genta Sakane\*<sup>1</sup> and Yoshihiro Mori<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Natural Sciences Section, Center for Fundamental Education,  
Institute for the Advancement of Higher Education, Okayama University of Science,  
1-1 Ridai-cho, Okayama 700-0005, Japan

<sup>2</sup>Okayama University of Science, 1-1 Ridai-cho, Okayama 700-0005, Japan

\*E-mail: gsakane@chem.ous.ac.jp

In this paper, we present the use of the DV-X $\alpha$  method in several classes at Okayama University of Science during the 2020 corona disaster. In these online classes, the eduDV, VESTA, and DV-X $\alpha$  programs were very useful in helping students understand what an electron looks like in an atom, the size of an atom in the periodic table, the shape of a molecule, what causes matter to have color, what causes matter to have magnetism, and so on.

### 1. はじめに

原子や分子の質量のほとんどは原子核が決めているが、原子核は、原子や分子に比べて驚くほど小さい。では、化学の教科書に出てくる原子や分子の模型の大きさの正体は何なのであろうか。水分子の模型を図1に示す。

筆者らは岡山理科大学で教養教育科目(科学技術教育科目)の「身近な化学Ⅰ」, 「身近な化学Ⅱ」(全学部全学科対象)の

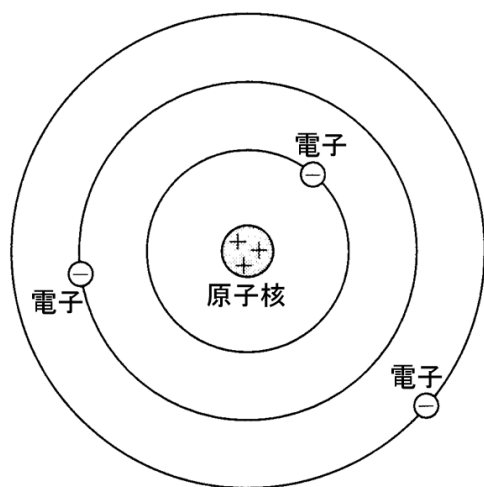


図2. 高等学校で習う原子モデル

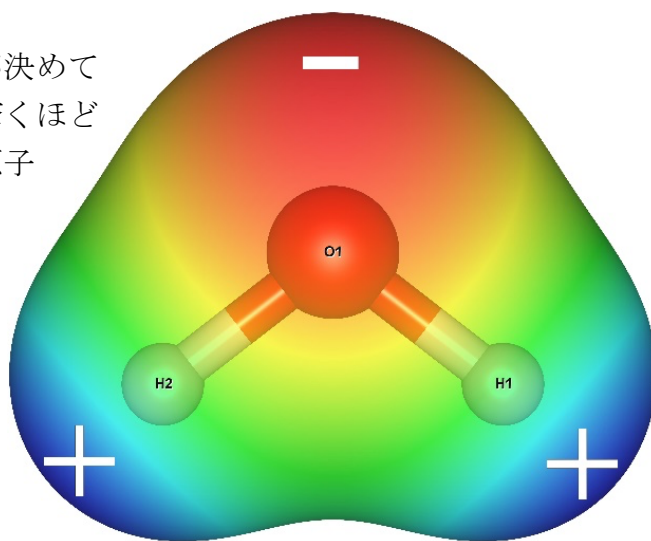


図1. DV-X $\alpha$  で計算し VESTA で描いた水分子

授業を担当しており、原子や分子の大きさは「電子」が決めていることを授業の中で学生に説明している。しかし学生が高等学校時代に化学で習った「電子」のイメージは、太陽の周りを惑星が軌道を描いて回っているように、原子核の周りを電子が軌道を描いて回っているというものである(図2)。これでは原子や分子の大きさが「電子状態」に依存しているイメージとは程遠い。

また、原子や分子の「大きさ」だけではなく、「物質の色」や「物質の磁性」なども「物質の電子状態」によって決まる。化学の本質は千姿万態の電子の世界であり、化学反応も、物質の性質も、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ない。

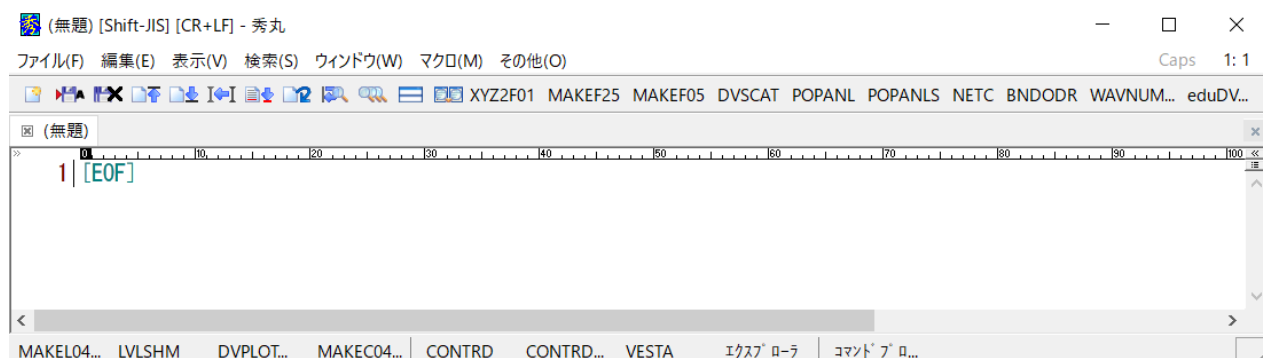
そこで2020年度、コロナ禍でオンライン授業（ビデオ・オン・デマンド形式）となった岡山理科大学の「身近な化学 I」,「身近な化学 II」では、第一原理計算である DV-X $\alpha$  法[1]で「原子や分子の電子状態」を計算し、結晶構造、電子・核密度等の三次元データ可視化プログラムである VESTA[2]で「原子や分子の電子状態」を可視化して、目に見えない電子の世界のイメージを受講生に伝えることに成功したので報告する[3]。

## 2. 計算環境

Windows パソコンに“DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境” [4]をインストールした。秀丸エディタ[5]はシェアウェアだが、金銭的に難儀している学生の方には秀丸エディタフリー制度（アカデミックフリー個人）がある[6]。また、学校内に設置されているパソコンで学生が利用する場合にも秀丸エディタフリー制度（アカデミックフリー団体）がある[6]。DV-X $\alpha$  法計算支援環境[7], VESTA[8], eduDV[9]は無償で利用できる。インストールの方法は書籍「新版 はじめての電子状態計算」の第 6 章「DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境」に書いてある[10]。

## 3. 原子の大きさ

秀丸エディタより《eduDV》（右上のボタン）をクリック（タップ）して起動し、



開いたプルダウンメニューの一番上の行の《00. Automatic【データ自動入力】...》をクリック（タップ）し、

- 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(H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>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. C<sub>2v</sub>対称【折れ線AB2型分子】AB2型分子(水や硫化水素など)...
- 08. C<sub>3v</sub>対称【三角錐AB3型分子】AB3型分子(アンモニアなど)...
- 09. D<sub>2h</sub>対称【エチレン型(平面)分子】A2B4型分子(エチレンなど)...
- 10. D<sub>3d</sub>対称【エタン型(ねじれ形)分子】A2B6型分子(エタンなど)...
- 11. D<sub>3h</sub>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. D<sub>4h</sub>対称【平面正四角型型分子】AB4型分子([PtCl<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>など)...
- 13. D<sub>6h</sub>対称【平面正六角形型分子】A<sub>6</sub>B<sub>6</sub>型分子(ベンゼンなど)...
- 14. T<sub>d</sub>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. O<sub>h</sub>対称【正八面体型分子】AB<sub>6</sub>型分子(六フッ化硫黄など)...
- 16. T<sub>d</sub>対称【正四面体型分子】[A(B<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]型錯体([Ni(CO)<sub>4</sub>]など)...
- 17. O<sub>h</sub>対称【正八面体型分子】[A(B<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]型錯体([Cr(CO)<sub>6</sub>]など)...
- 18. D<sub>2h</sub>対称【正八面体型分子】[M(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>n+</sup>アキア錯イオン...
- 19. T<sub>d</sub>対称【正四面体型分子】[M(L)<sub>4</sub>]<sup>n+</sup> or [M(L)<sub>4</sub>]<sup>n-</sup>錯イオン...
- 20. O<sub>h</sub>対称【正八面体型分子】[M(L)<sub>6</sub>]<sup>n+</sup> or [M(L)<sub>6</sub>]<sup>n-</sup>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...

開いたプルダウンメニューの  
下から 2 行目の

《**AUTO 21. 対称なし**  
**【単原子】原子軌道関数**  
見るときなどに便利です...》  
をクリック (タップ) し、

AUTO 01.  $D_{\infty h}$ 対称【等核二原子分子】A2型分子(H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>など)..  
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)..  
AUTO 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)..  
AUTO 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)..  
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)..  
AUTO 06.  $C_{\infty v}$ 対称【直線ABCD型分子】A-B-C-D型分子(HCNOなど)..  
AUTO 07. C<sub>2v</sub>対称【折れ線AB2型分子】AB2型分子(水や硫化水素など)..  
AUTO 08. C<sub>3v</sub>対称【三角錐AB3型分子】AB3型分子(アンモニアなど)..  
AUTO 09. D<sub>2h</sub>対称【エチレン型(平面)分子】A<sub>2</sub>B<sub>4</sub>型分子(エチレンなど)..  
AUTO 10. D<sub>3d</sub>対称【エタン型(ねじれ形)分子】A<sub>2</sub>B<sub>6</sub>型分子(エタンなど)..  
AUTO 11. D<sub>3h</sub>対称【平面正三角形分子】AB<sub>3</sub>型分子(三フッ化ホウ素など)..  
AUTO 12. D<sub>4h</sub>対称【平面正四角型イオン】AB<sub>4</sub>型錯イオン([PtCl<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>など)..  
AUTO 13. D<sub>6h</sub>対称【平面正六角形分子】A<sub>6</sub>B<sub>6</sub>型分子(ベンゼンなど)..  
AUTO 14. T<sub>d</sub>対称【正四面体型分子】AB<sub>4</sub>型分子(メタンや四塩化炭素など)..  
AUTO 15. O<sub>h</sub>対称【正八面体型分子】AB<sub>6</sub>型分子(六フッ化硫黄など)..  
AUTO 16. T<sub>d</sub>対称【正四面体型分子】[A(BC)<sub>4</sub>]型錯体([Ni(CO)<sub>4</sub>]など)..  
AUTO 17. O<sub>h</sub>対称【正八面体型分子】[A(BC)<sub>6</sub>]型錯体([Cr(CO)<sub>6</sub>]など)..  
AUTO 18. D<sub>2h</sub>対称【正八面体型イオン】[M(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>n+</sup>アクア錯イオン..  
AUTO 19. T<sub>d</sub>対称【正四面体型イオン】[M(L)<sub>4</sub>]<sup>n+</sup> or [M(L)<sub>4</sub>]<sup>n-</sup> 錯イオン..  
AUTO 20. O<sub>h</sub>対称【正八面体型イオン】[M(L)<sub>6</sub>]<sup>n+</sup> or [M(L)<sub>6</sub>]<sup>n-</sup> 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..

開いたプルダウンメニューの  
一番上の行の

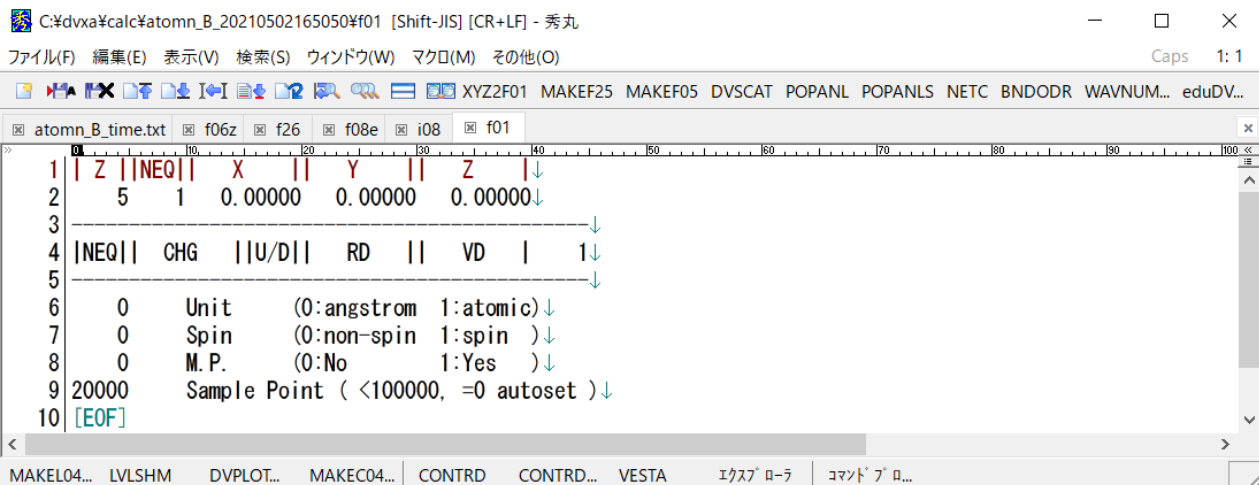
《**atom 原子番号 1~20**  
(**ノンスピンの版・全自動実行**) ...》  
をクリック (タップ) し、

atom 原子番号 1~ 20 (ノンスピンの版・全自動実行)..  
atom 原子番号 21~ 40 (ノンスピンの版・全自動実行)..  
atom 原子番号 41~ 60 (ノンスピンの版・全自動実行)..  
atom 原子番号 61~ 80 (ノンスピンの版・全自動実行)..  
atom 原子番号 81~100 (ノンスピンの版・全自動実行)..  
atom 原子番号 101~118 (ノンスピンの版・全自動実行)...

開いたプルダウンメニューの  
上から 5 行目の

《**5 B Boron ホウ素 [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>1</sup>**》  
を選択してホウ素原子の電子状態を  
計算し、

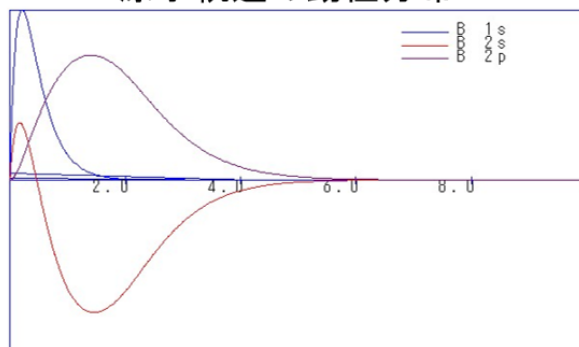
1 H Hydrogen 水素 1s<sup>1</sup>  
2 He Helium ヘリウム 1s<sup>2</sup>  
3 Li Lithium リチウム [He] 2s<sup>1</sup>  
4 Be Beryllium ベリリウム [He] 2s<sup>2</sup>  
5 B Boron ホウ素 [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>1</sup>  
6 C Carbon 炭素 [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>  
7 N Nitrogen 窒素 [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>3</sup>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



秀丸エディタ画面の左下、左から3つめの《DV PLOT...》ボタンをクリック（タップ）して DV PLOT を起動、《b07》を選択すれば、ホウ素原子の動径関数（横軸は原子核からの距離  $r$ （単位：原子単位），縦軸は動径関数  $R \times$  原子核からの距離  $r$ ）を描ける（図3）。

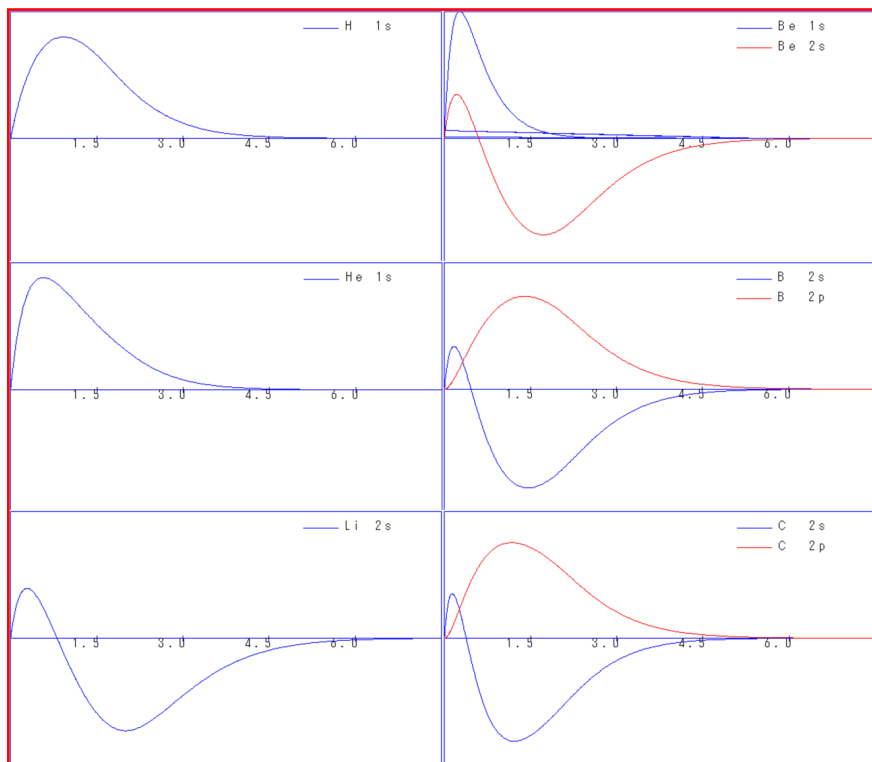
原子の大きさとは、波動関数（原子における波動関数は原子軌道と呼ばれる）としての電子の拡がり具合のことである。原子の質量は原子核が決めるが、原子の大きさは電子が決める。電子が入っている一番外側の原子軌道の動径関数の極大値（原子核位置からの距離）が、だいたい原子の大きさ（原子球の半径）のイメージである。

### 原子軌道の動径分布



→原子核位置からの距離(原子単位)

図3. ホウ素原子の大きさ



同様の操作で、水素原子から炭素原子までの大きさのイメージを計算してみた（図4）。水素原子よりヘリウム原子の方が原子の大きさは小さい。ヘリウム原子に比べてリチウム原子はかなり大きい。これは一番外側の波動関数（原子軌道）の種類が変わるからであることが理解できる。

←図4. 水素～炭素原子



窒素原子，酸素原子，フッ素原子，ネオン原子と，原子の大きさは徐々に小さくなっていく。しかし，ネオン原子に比べてナトリウム原子はかなり大きい。これはネオン原子の一番外側の波動関数（原子軌道）が  $2p$  であるのに対して，ナトリウム原子の一番外側の波動関数（原子軌道）が  $3s$  であるからである（図5）。

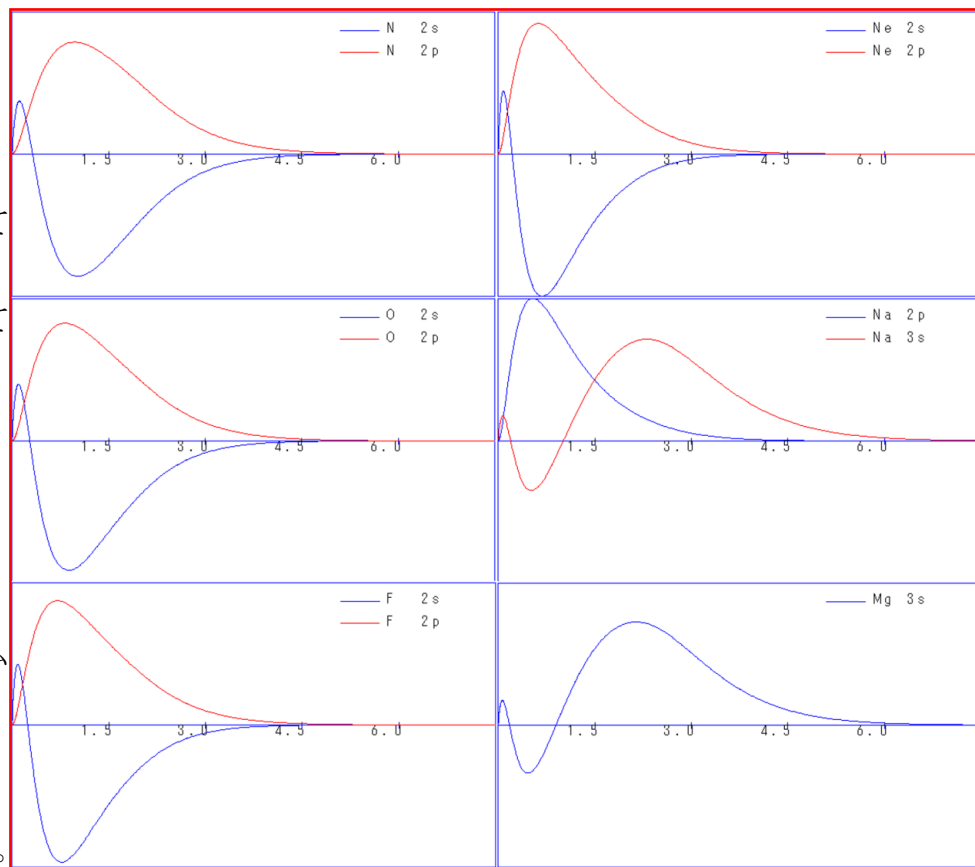


図5．窒素原子からマグネシウム原子まで

アルミニウム原子，ケイ素原子，リン原子，硫黄原子，塩素原子，アルゴン原子と原子の大きさは小さくなっていく（図6）。

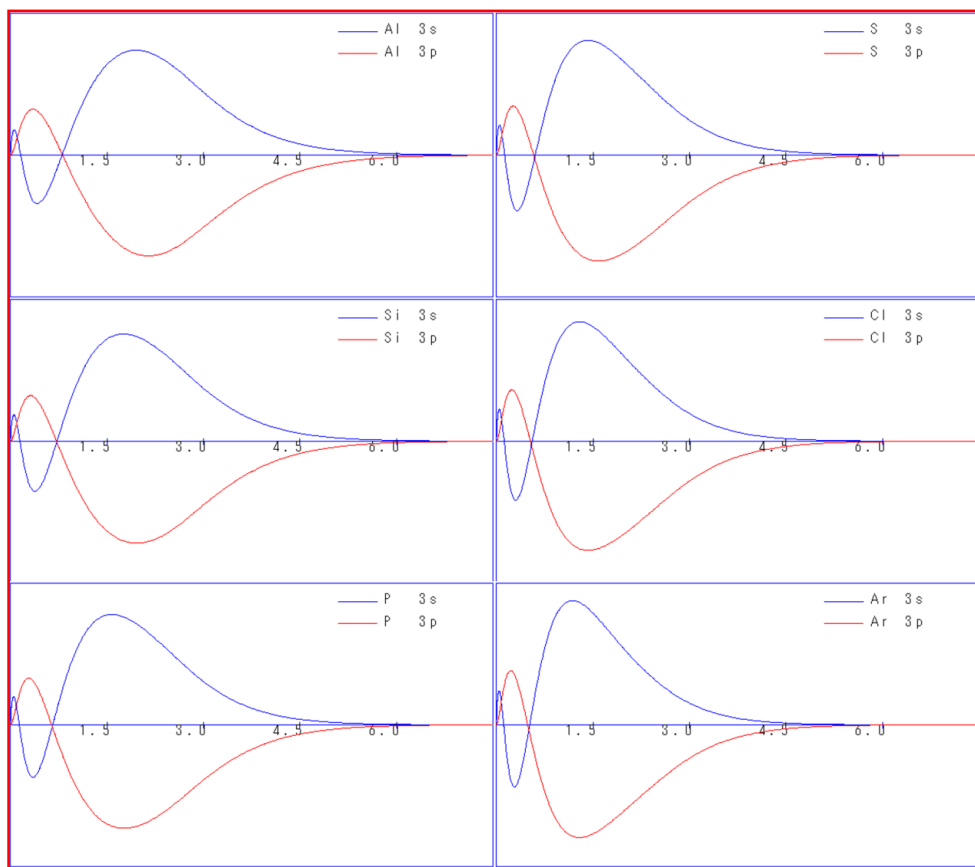


図6．アルミニウム原子からアルゴン原子まで

化学の教科書には、原子の大きさ（原子半径）が掲載されている（図7）。

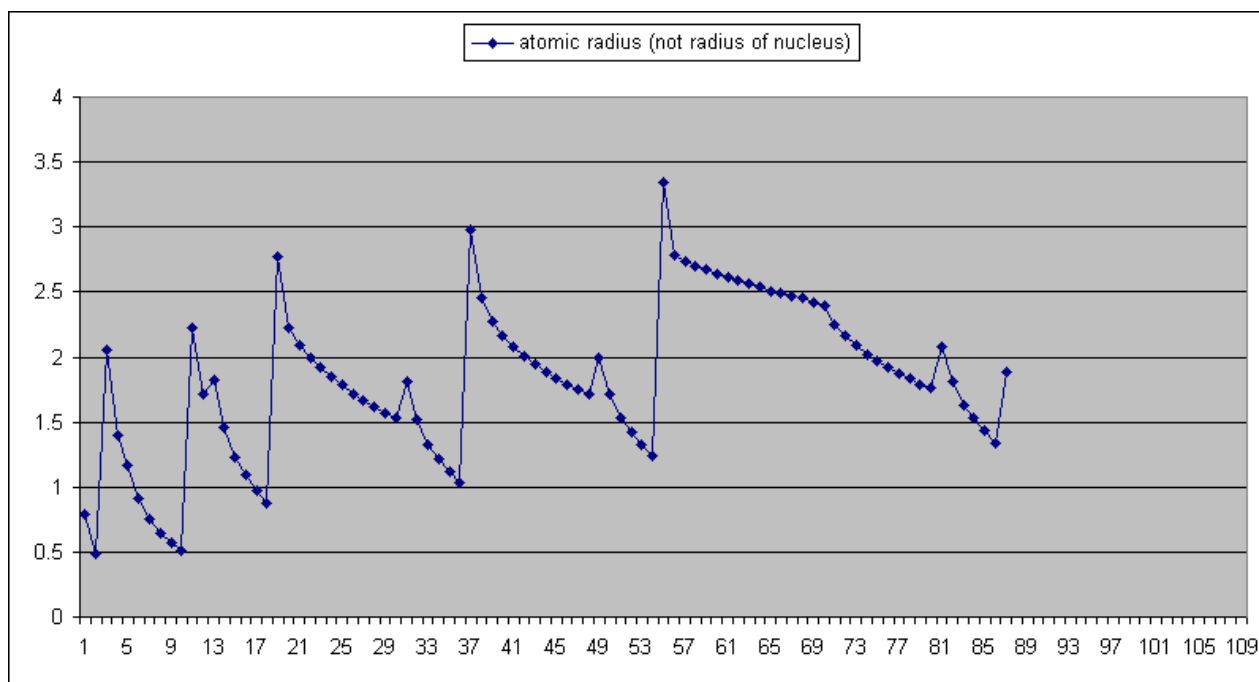
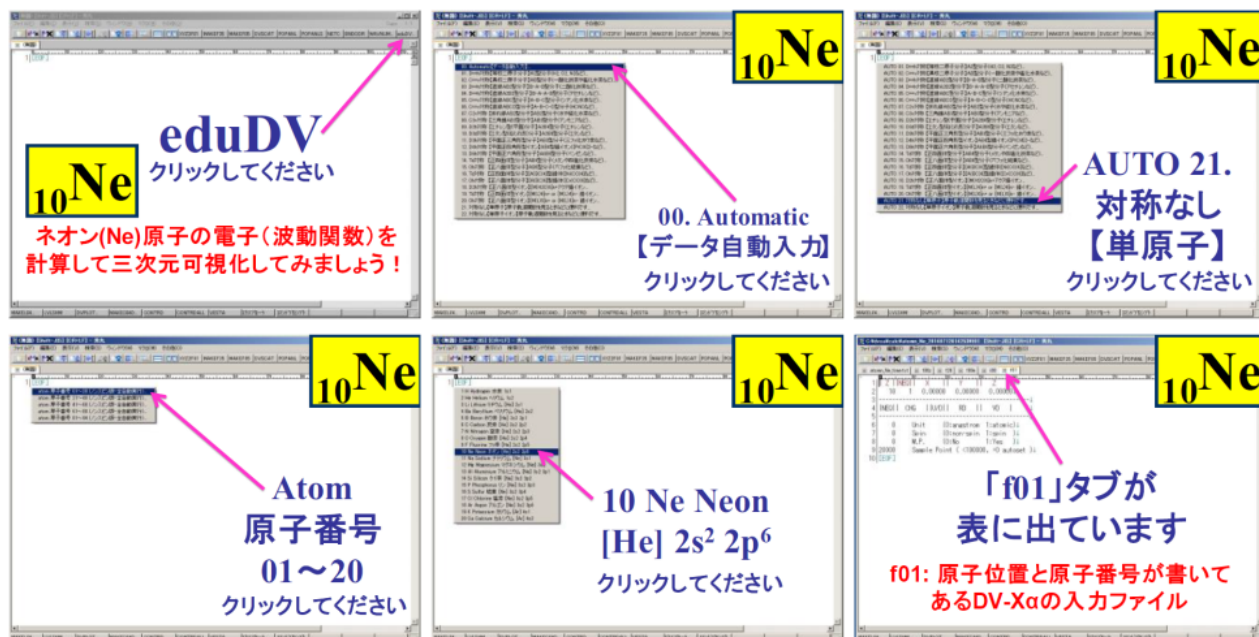


図7. 原子半径 [https://en.wikipedia.org/wiki/File:Atomic\\_radius\\_chart.gif](https://en.wikipedia.org/wiki/File:Atomic_radius_chart.gif)

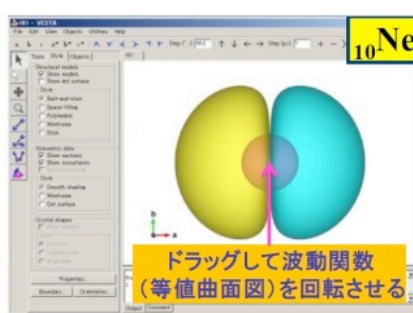
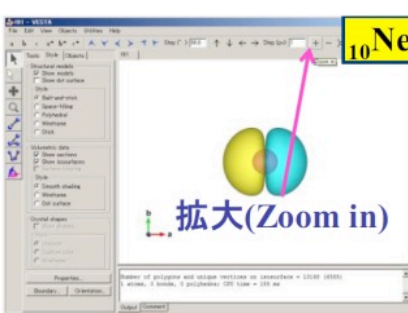
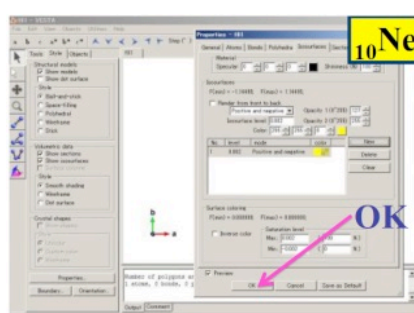
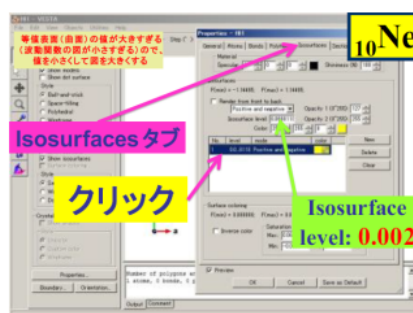
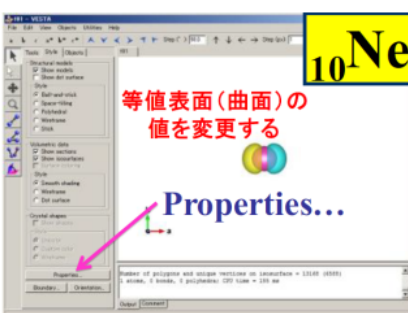
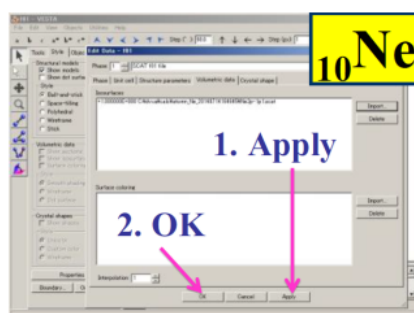
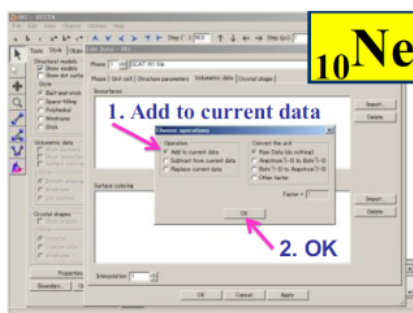
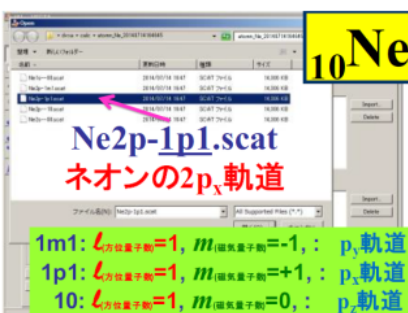
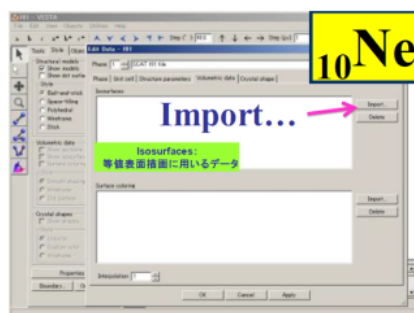
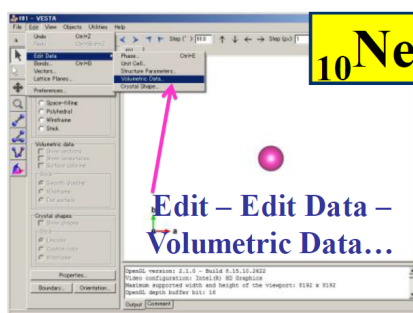
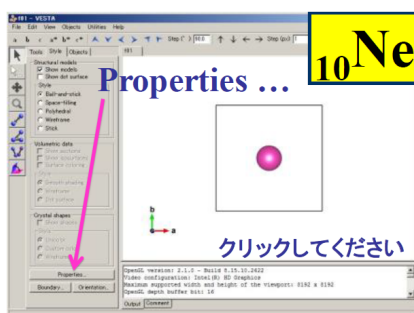
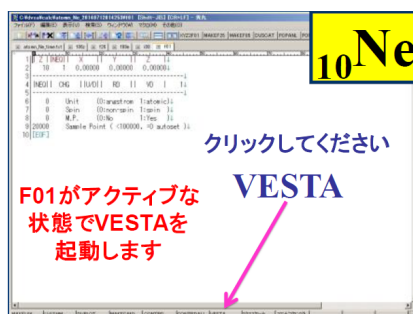
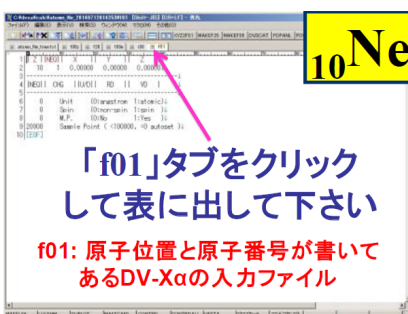
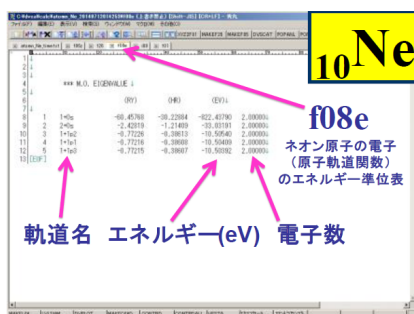
なぜ水素原子よりヘリウム原子の方が小さいのか、ヘリウム原子よりリチウム原子が大きくなるのか、リチウム原子からネオン原子までは小さくなっていったあとにナトリウム原子がなぜ大きくなるのか、DV-X $\alpha$ 法で動径関数を図示すれば理解できる。

#### 4. 原子の中の電子の姿 <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/eduDV3.pdf>

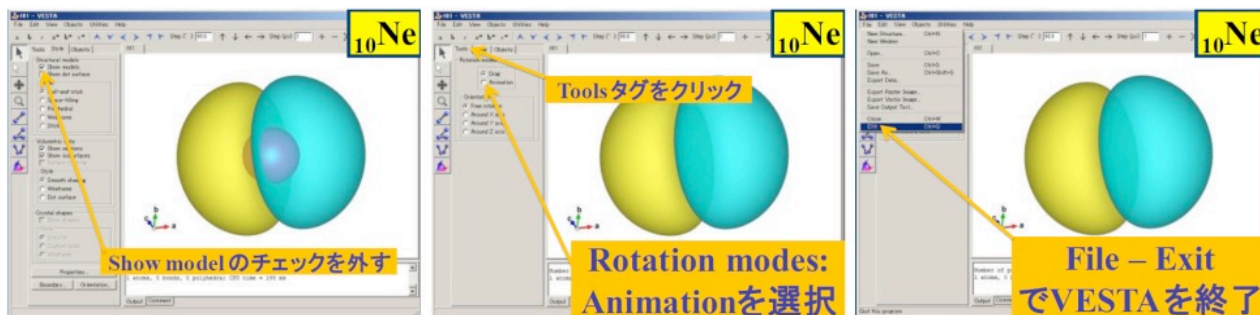
秀丸エディタより《eduDV》を起動し、《00. Automatic【データ自動入力】...》-《AUTO 21. 対称なし【単原子】原子軌道関数を見るときなどに便利です...》-《atom 原子番号 1~20（ノンスピ版・全自動実行）...》-《10 Ne Neon ネオン [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>》を選択してネオン原子の電子状態を計算する。



《f08e》タブをクリックしてネオン原子における波動関数（原子軌道）のエネルギー準位表を確認し、《f01》タブをクリックした後《VESTA》を起動、《Properties...》ボタンをクリックし、Unit cell（単位格子）のLine（線）をDo not show（非表示）にした後、《Edit》－《Edit Data》－《Volumetric Data...》－《Import...》で原子軌道ファイル《Ne2p-1p1.scat》を開けば、ネオン原子の立体的な原子軌道 2p<sub>x</sub> 軌道（等値表面図）を描ける。







必要に応じて《Properties...》ボタンをクリックし、《Isosurfaces》タブを開き、《Isosurface level》の数値を変更する（この値を小さくすれば原子軌道は大きく、大きくすれば原子軌道は小さくなる）。

同様に《18 Ar Argon アルゴン [Ne] 3s2 3p6》を選択してアルゴン原子の電子状態を計算し、原子軌道ファイル《Ar3p-1p1.scf》を開けば、アルゴン原子の波動関数（原子軌道）3px 軌道の等値表面図を描ける。



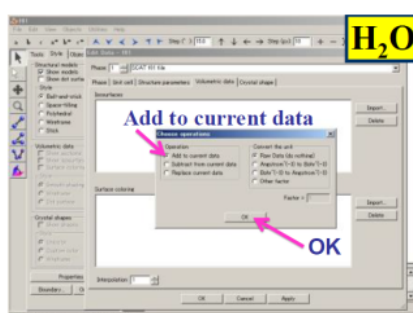
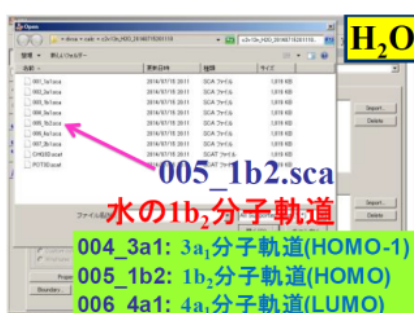
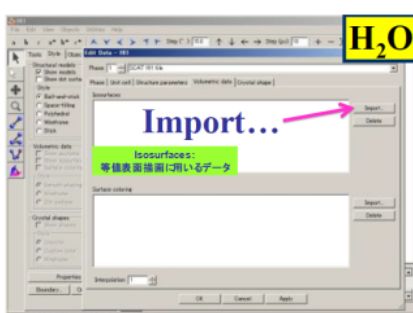
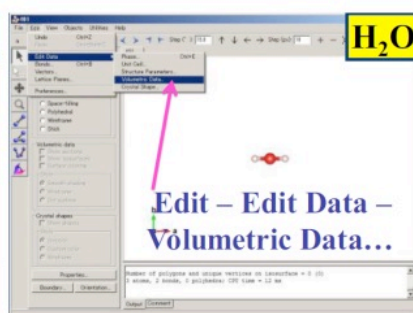
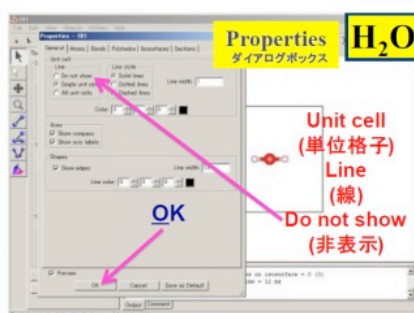
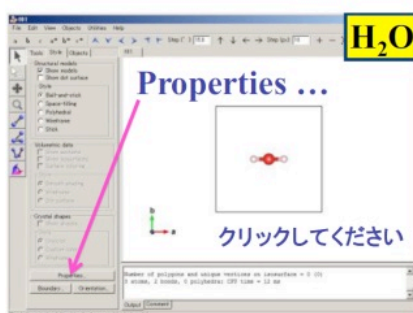
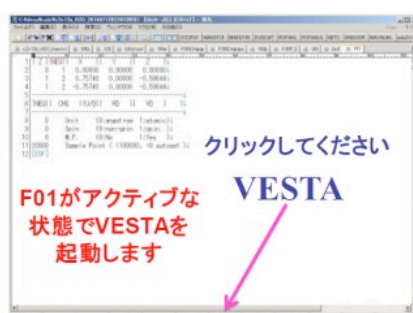
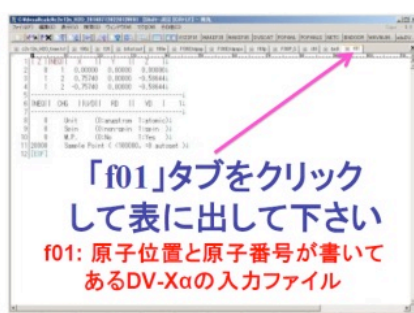
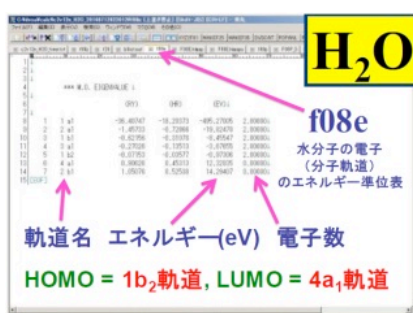
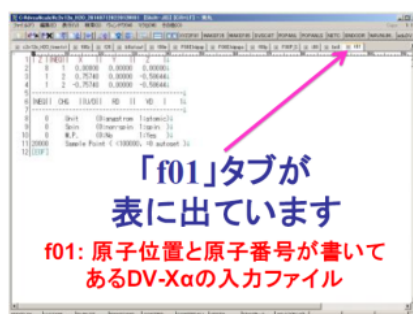
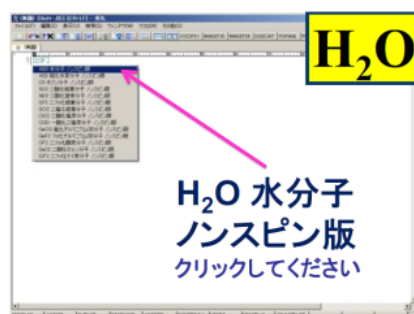
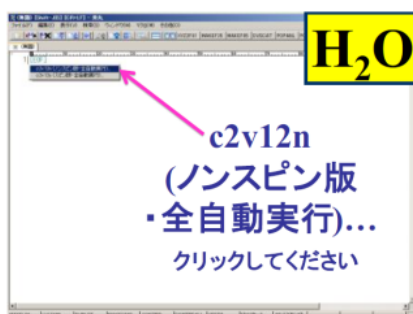
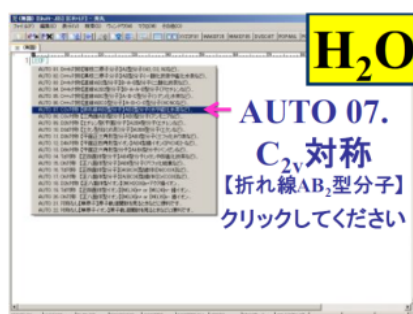
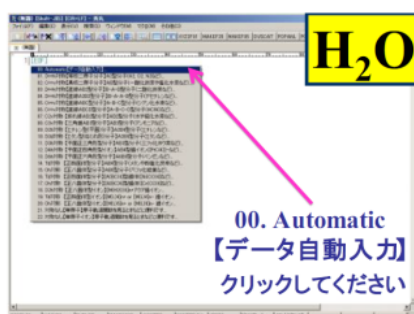
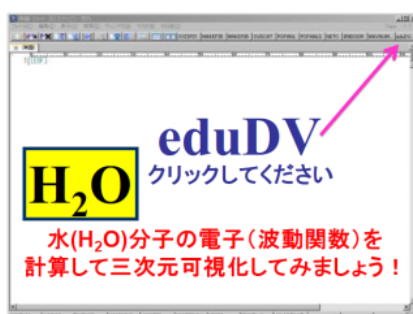


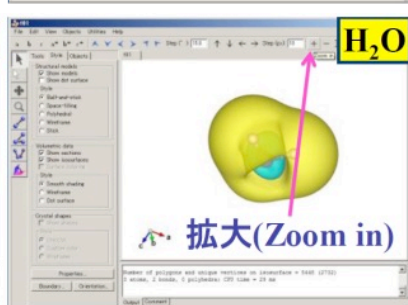
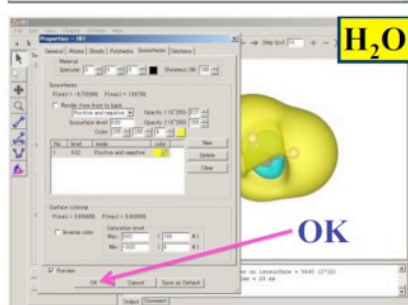
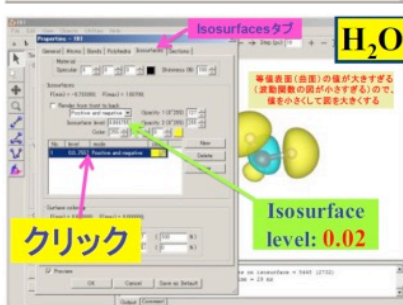
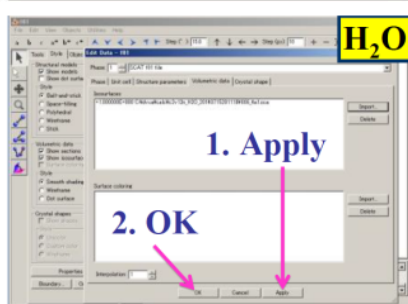
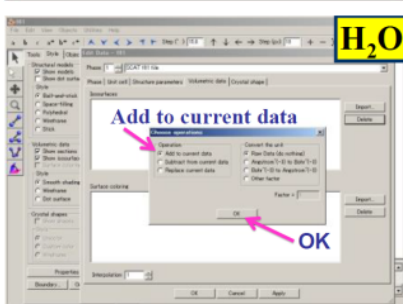
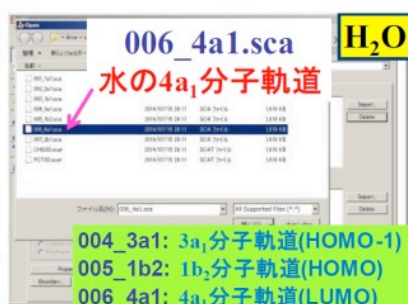
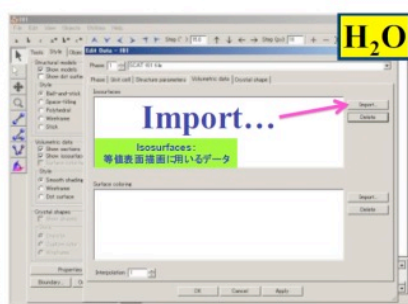
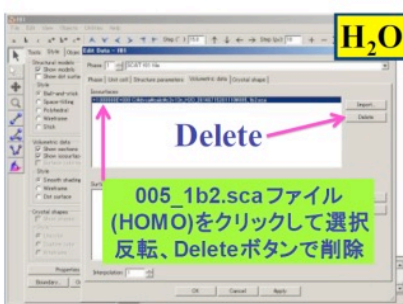
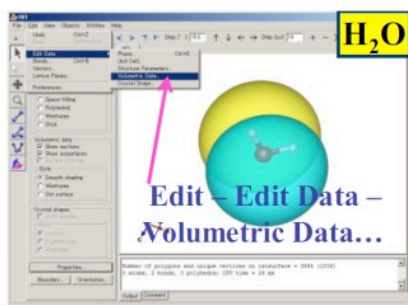
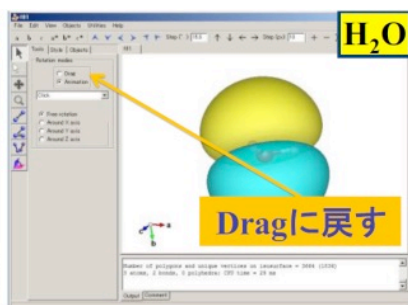
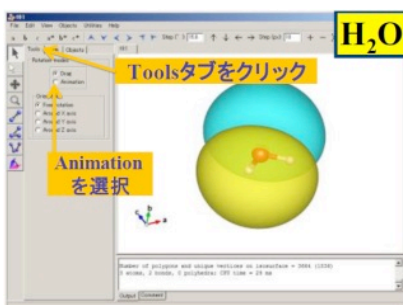
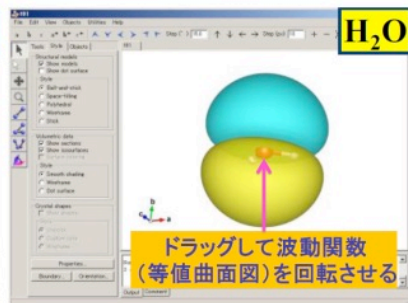
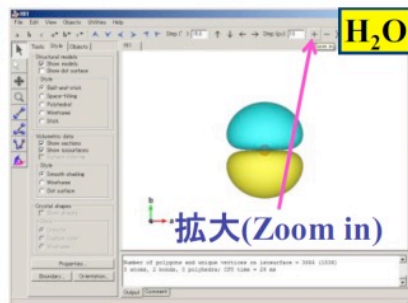
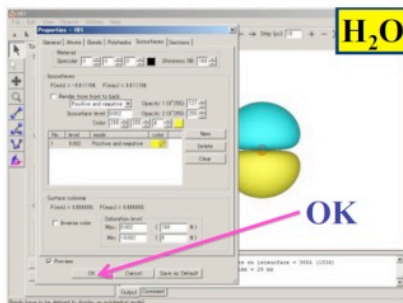
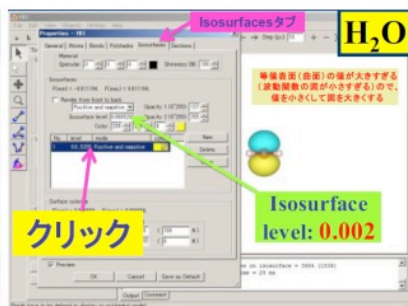
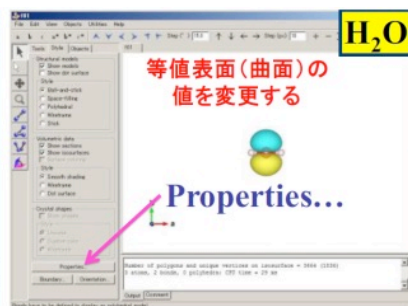
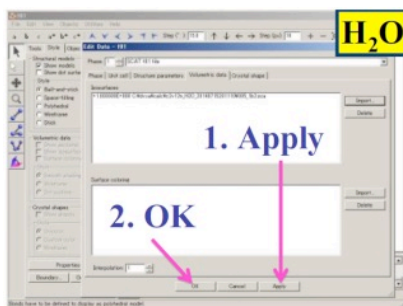
##### 5. 分子の中の電子の姿 <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/eduDV3.pdf>

秀丸エディタより《eduDV》を起動し、《00. Automatic【データ自動入力】...》-《AUTO 07. C<sub>2v</sub> 対称【折れ線 AB<sub>2</sub> 型分子】AB<sub>2</sub> 型分子（水や硫化水素など）...》-《c2v12n（ノンスピ版・全自動実行）...》-《H<sub>2</sub>O 水分子 ノンスピ版》を選択して水分子の電子状態を計算し、《f08e》タブをクリックして水分子における波動関数（分子軌道）のエネルギー準位表を確認し、《f01》タブをクリックした後《VESTA》を起動、《Properties...》ボタンをクリックし、Unit cell（単位格子）の Line（線）を Do not show（非表示）にした後、《Edit》-《Edit Data》-《Volumetric Data...》-《Import...》で分子軌道ファイル《005\_1b2.sca》を開けば、水分子の立体的な分子軌道 1b<sub>2</sub> 軌道（等値表面図）を描ける。必要に応じて《Properties...》ボタンをクリックし、《Isosurfaces》タブを開き、《Isosurface level》の数値を変更する（この値を小さくすれば分子軌道は大きく、大きくすれば分子軌道は小さくなる）。同様に分子軌道ファイル《006\_4a1.sca》を開けば、水分子の立体的な分子軌道 4a<sub>1</sub>

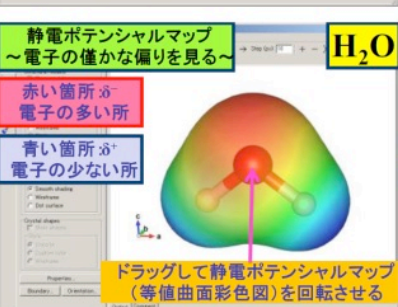
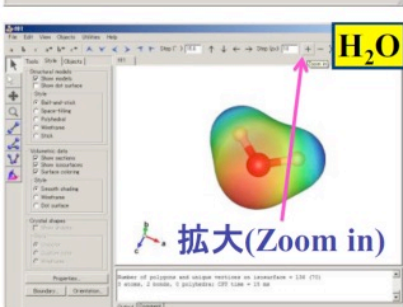
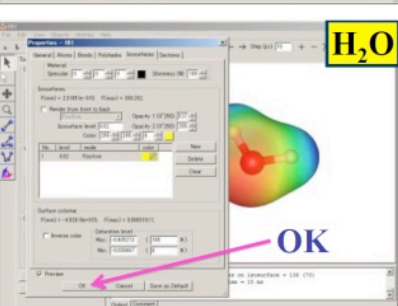
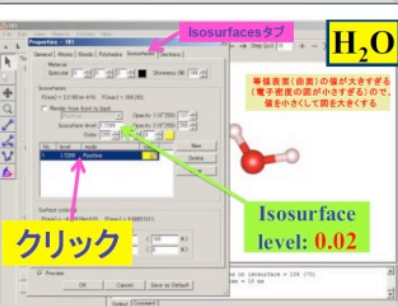
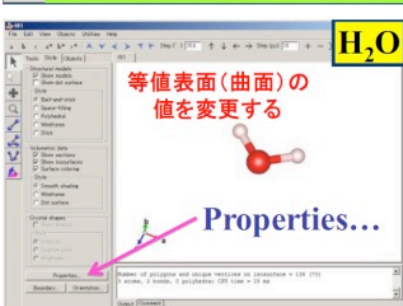
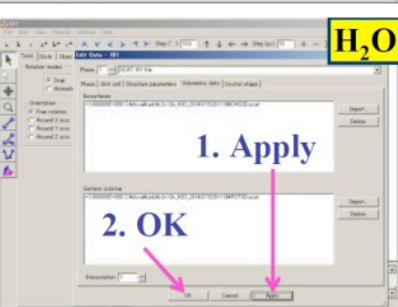
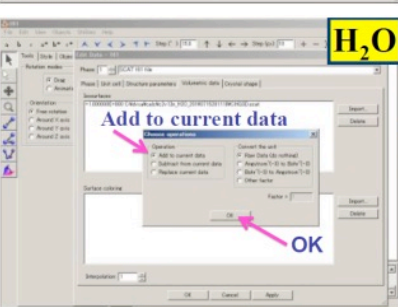
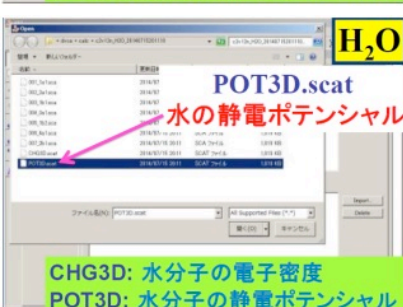
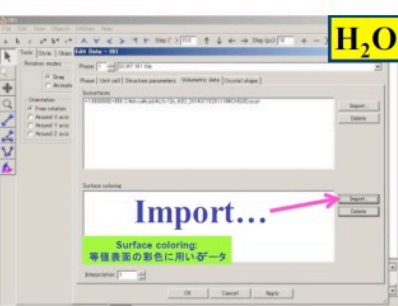
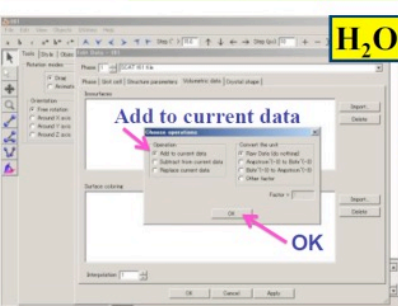
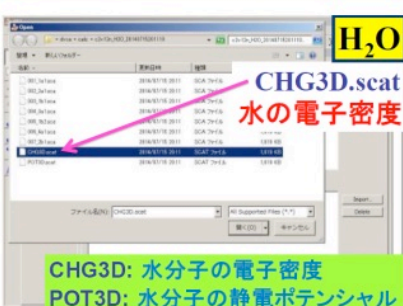
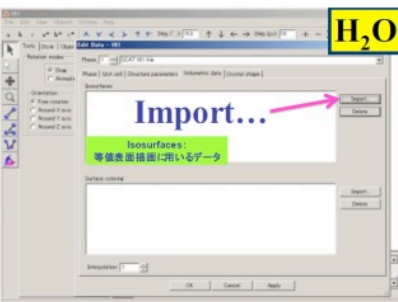
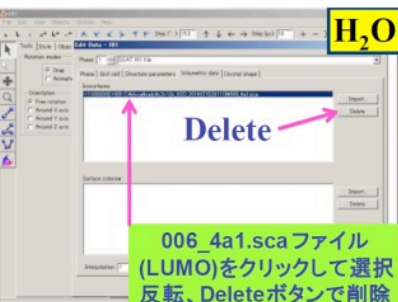
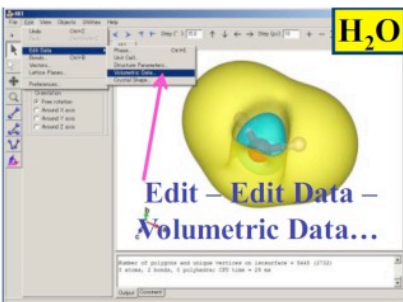
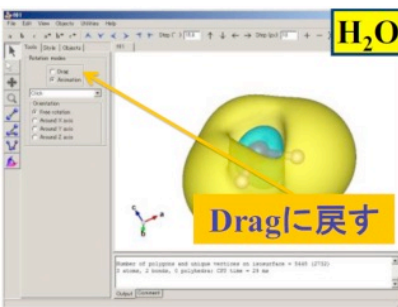
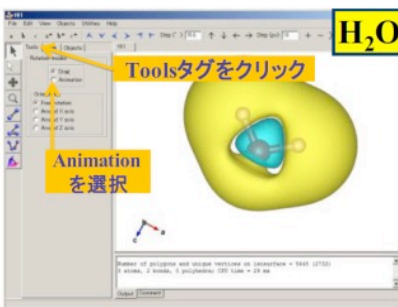
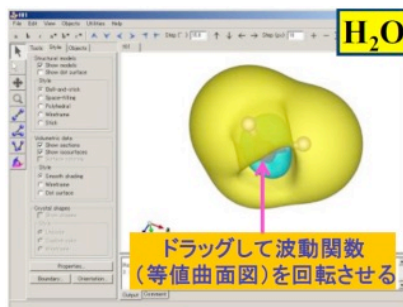


軌道（等値表面図）を描ける。さらに電子密度ファイル《CHG3D.scf》に加えて、《Surface coloring》の箇所では静電ポテンシャルファイル《POT3D.scf》を開けば、分子におけるわずかな電荷の偏りを表現した静電ポテンシャルマップ（赤い部分は、わずかに電子の多い部分、青い部分は、わずかに電子が少ない部分）を描ける。これは、等電子密度表面における静電ポテンシャルの大小で等値表面を彩色した図である。







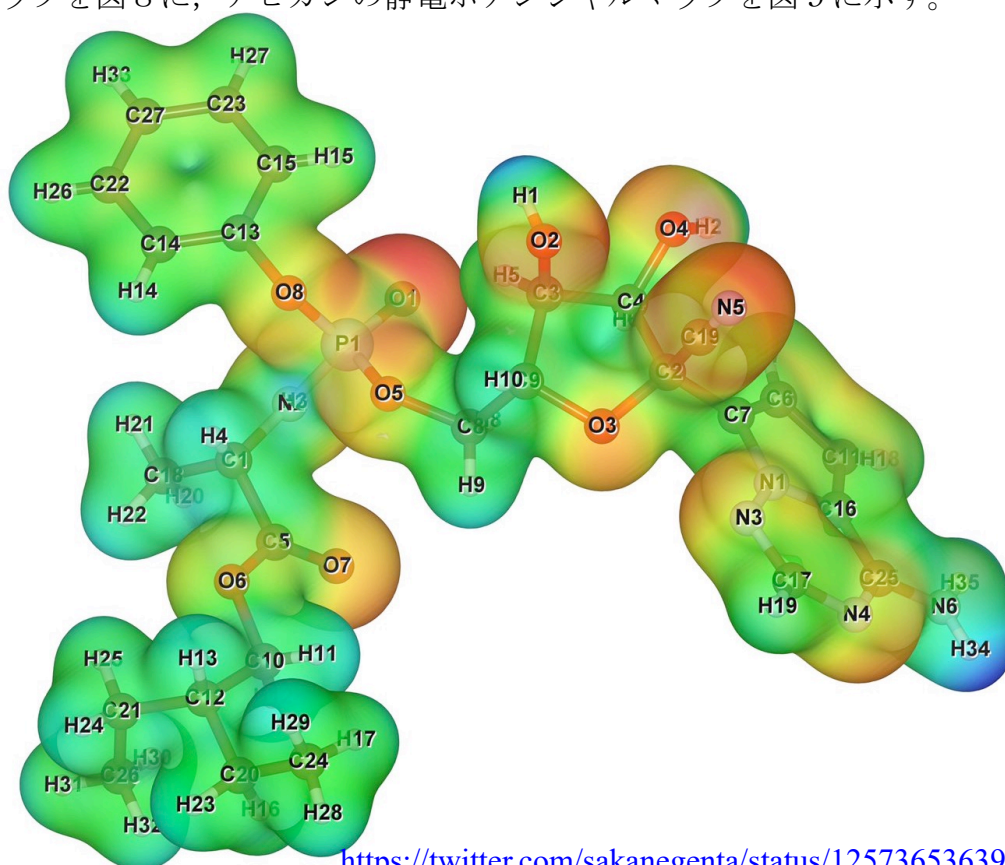


## 6. レムデシビルとアビガンの電子状態

現在、周期表には 118 種類の元素が掲載されているが、それらの組み合わせである化学物質は CAS によると、過去から現在に至る文献に 1 億 8200 万種類も掲載されている (2021 年 6 月現在) [11]。DV-X $\alpha$  法は、原子座標と原子番号だけを入力値として、どのような分子の電子状態でも計算できる (使用する計算機的能力によって計算できる原子数には限界がある)。「身近な化学 I」,「身近な化学 II」では、身近な分子の例としてレムデシビルおよびアビガンを例にとり、DV-X $\alpha$  法によりそれらの電子状態を計算し、VESTA で電子状態を三次元可視化して学生に紹介した。ギリアド・サイエンシズ株式会社のレムデシビル ( $C_{27}H_{35}N_6O_8P$ ) は、新型コロナウイルス感染症(COVID-19)の治療薬として 2020 年 5 月 7 日、厚生労働省に特例承認された。また富士フイルム富山化学株式会社のアビガン ( $C_5H_4FN_3O_2$ ) は 2020 年 10 月 16 日、厚生労働省に承認申請されている。

まず、イギリスのケンブリッジ結晶学データセンターおよびドイツの FIZ Karlsruhe - Leibniz Institute for Information Infrastructure による (無償利用できる) 結晶構造データベース Access Structures[12]にアクセスし、レムデシビルおよびアビガンの CIF を入手した。

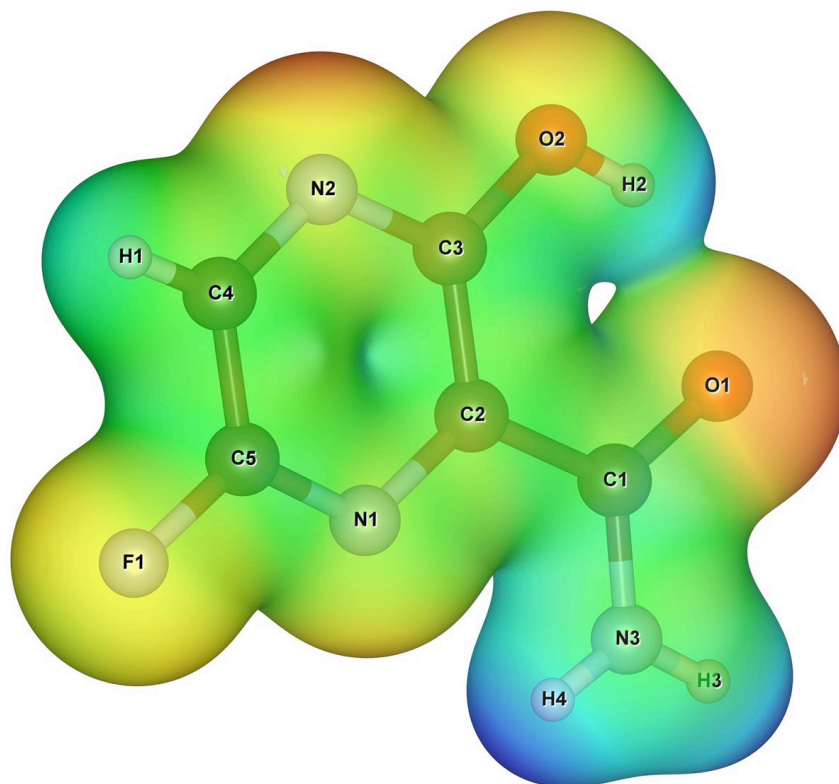
次に、DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境で CIF を開き、VESTA を起動、原子座標を XYZ 書式で保存、xyz2f01 で F01 を作成し、MAKEF05SCFS[13]で F05 を作成、DV-X $\alpha$  法により電子状態を計算し、VESTA で電子状態を三次元可視化した。CIF からの計算方法は「DV-X $\alpha$  法計算支援環境利用の手引き」[14]に解説がある。レムデシビルの静電ポテンシャルマップを図 8 に、アビガンの静電ポテンシャルマップを図 9 に示す。



<https://twitter.com/sakanegenta/status/1257365363991461889>

図 8. レムデシビルの静電ポテンシャルマップ  
(Remdesivir, GS-5734) CAS Number [1809249-37-3]





<https://twitter.com/sakanegenta/status/1257320621949587465>

図 9. アビガンの静電ポテンシャルマップ

(Avigan, 6-fluoro-3-hydroxypyrazine-2-carboxamide, T-705) CAS Number [259793-96-9]

## 7. 物質の色

物質に白い光をあてたときに色がついて見える場合、物質は特定の波長の可視光線を吸収しており、吸収されなかった可視光線を人間は色として認識している。物質が特定の波長の可視光線を吸収するのは、物質の中の波動関数（分子の場合は分子軌道）が、飛び飛びの決まったエネルギーを有しているためである。電子が入っている波動関数から、電子が入ることができる波動関数へ、励起という現象が起こり、特定の波長（エネルギー）の可視光線が吸収される。授業では、eduDV で分子の電子状態を計算し、HOMO と LUMO のエネルギー差（eV）を波長（nm）に変換し、可視光線を吸収する可能性があるかどうかを調べた。HOMO と LUMO のエネルギー差に該当する光の波長（nm）は F08E.hlgap というファイルに出力されている。

6 種類のブーメラン型（B-A-B）分子（ $C_{2v}$  対称）を題材に、その物質が有色であるか無色であるかを予想した（図 10）。

図 10. 有色か無色かの予想→

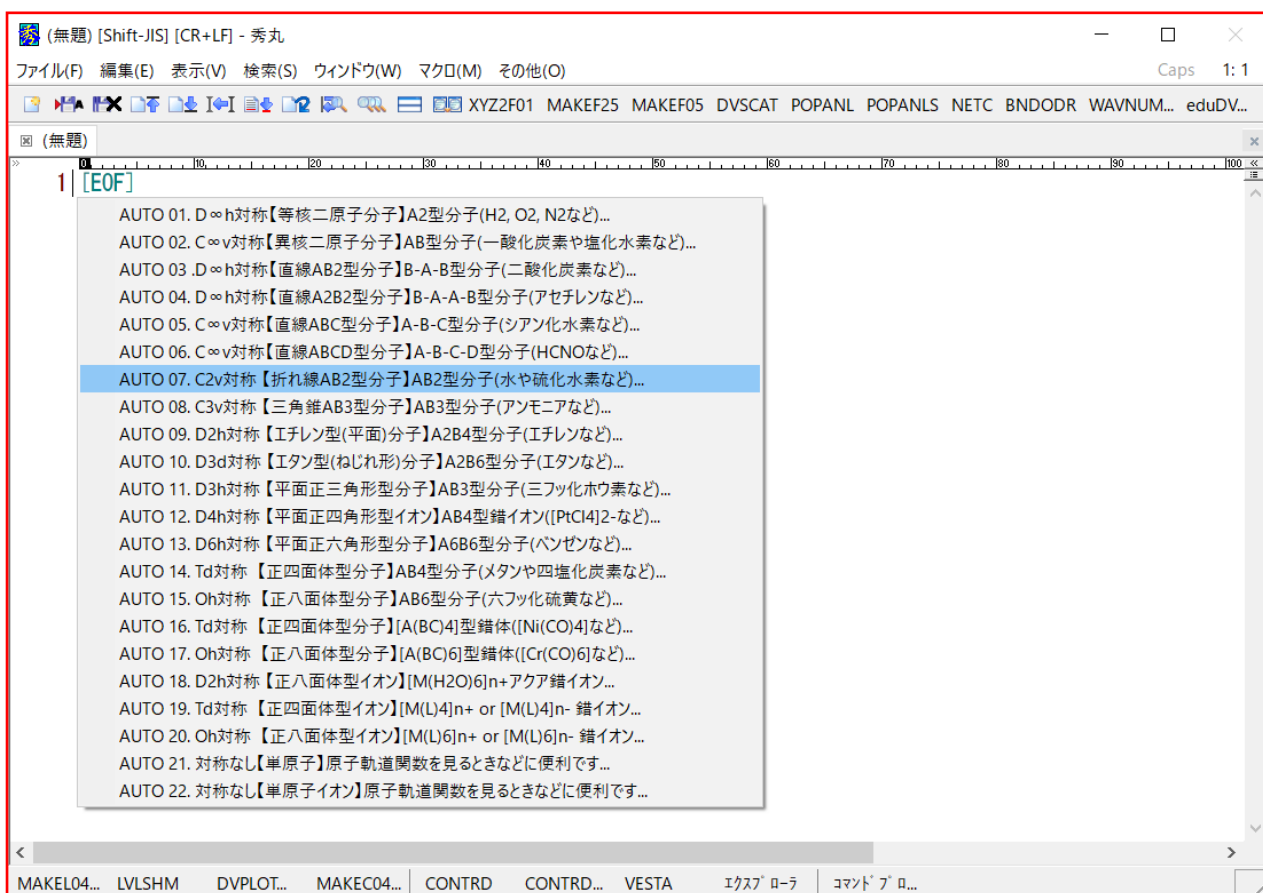
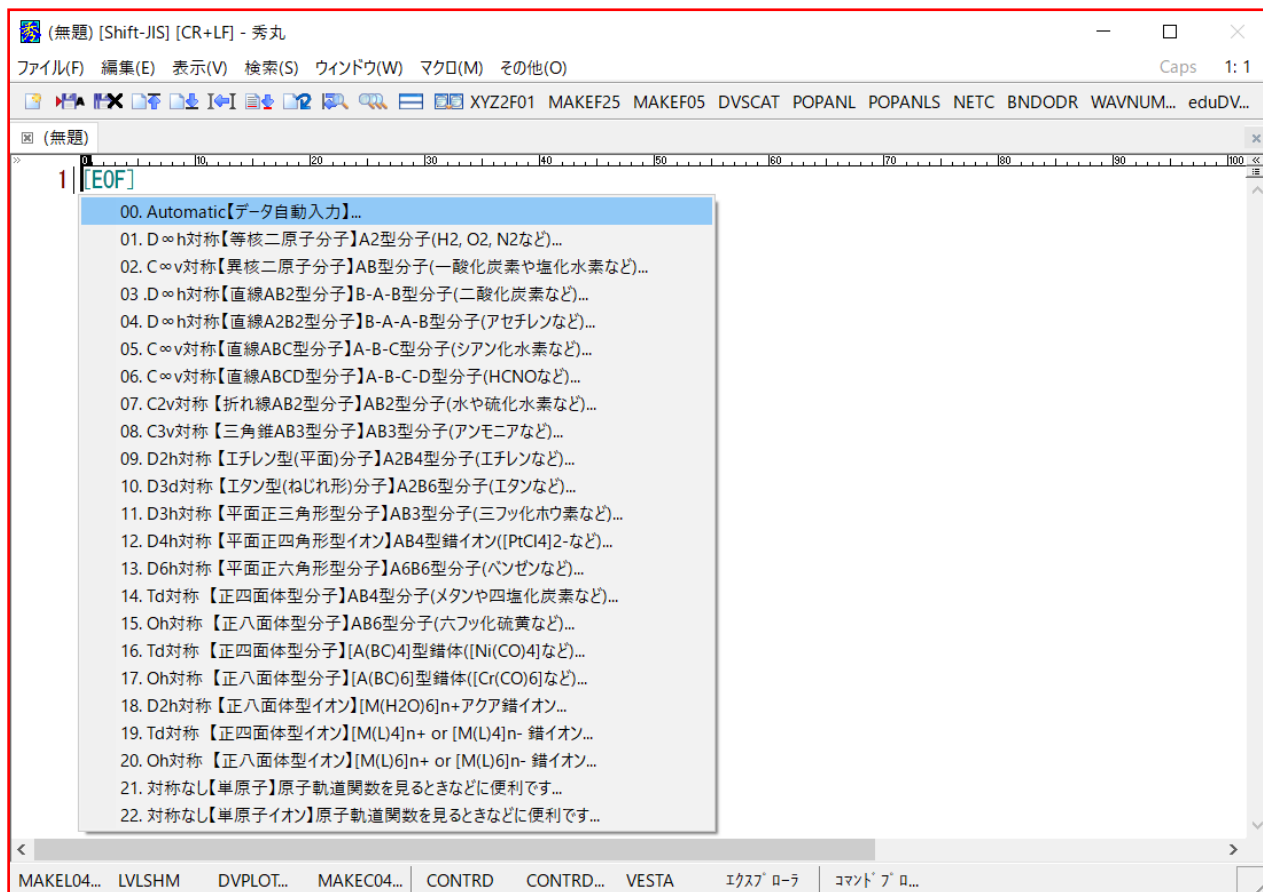
秀丸エディタを起動し、

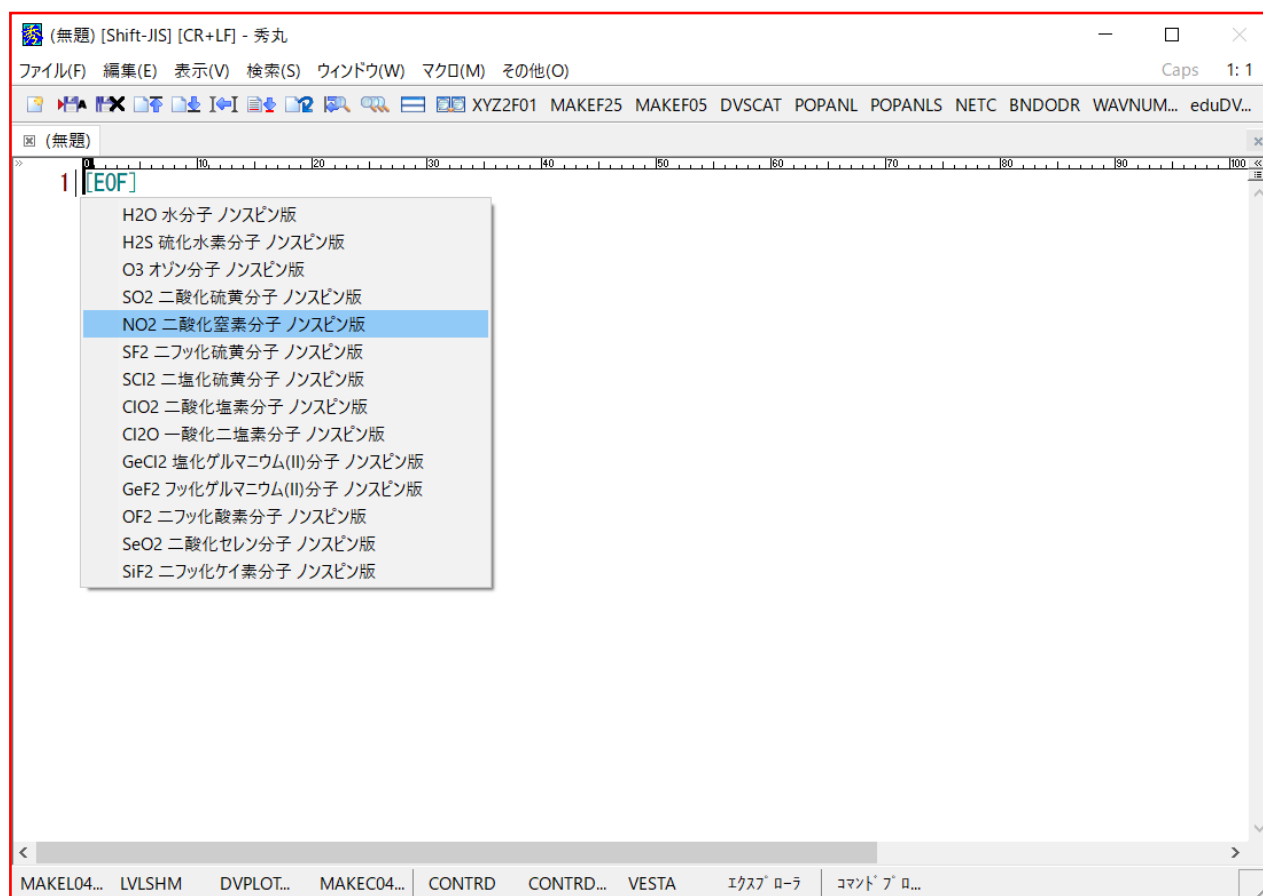
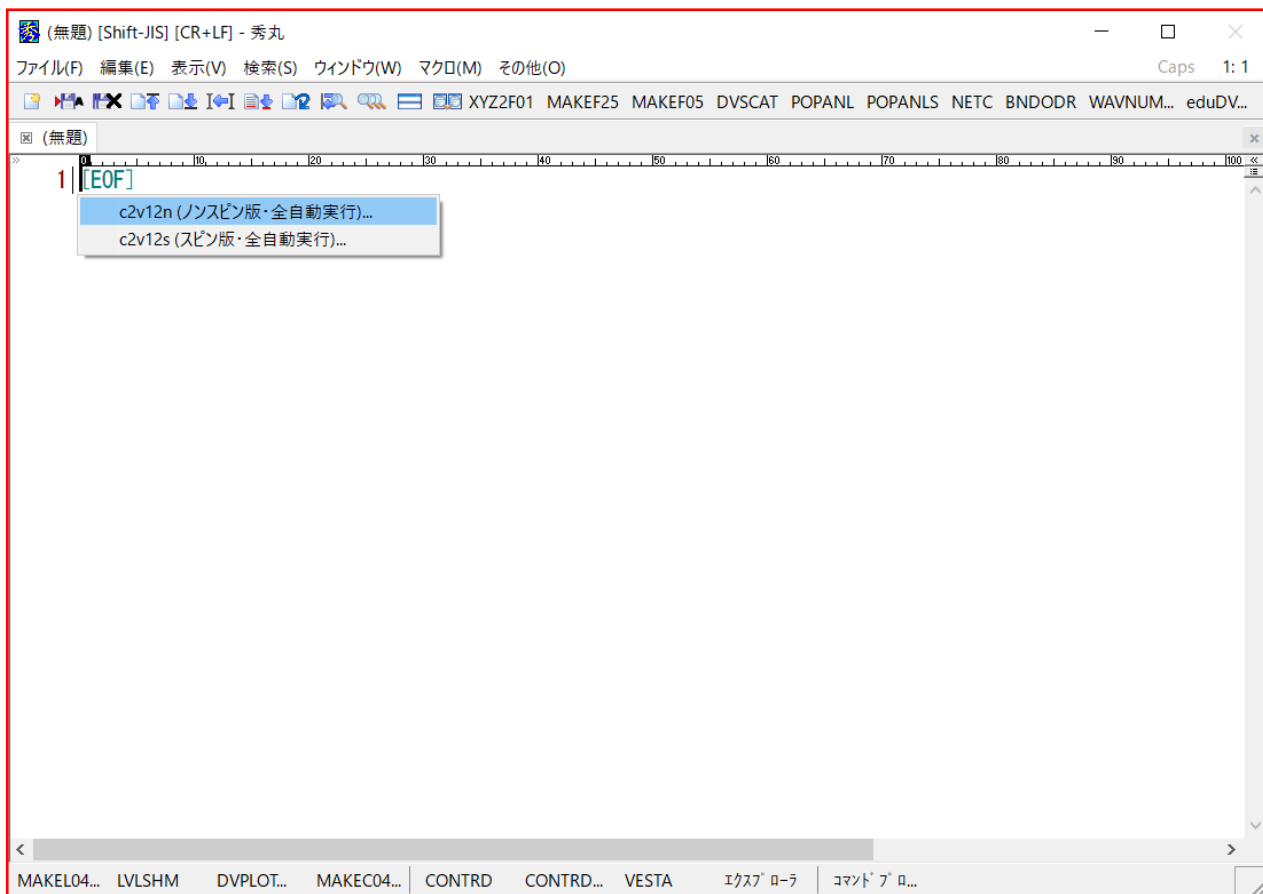
【eduDV】-【00. Automatic】-【AUTO 07.  $C_{2v}$  対称】-【ノンスピ版】-【\_\_\_\_\_】

で、HOMO と LUMO の間隔（nm）を計算した。

No.	化合物名	化学式	色・状態	F08E.hlgap
1	水	H <sub>2</sub> O	無色液体	nm
2	硫化水素	H <sub>2</sub> S	無色気体	nm
3	オゾン	O <sub>3</sub>	淡青色気体	nm
4	二酸化硫黄	SO <sub>2</sub>	無色気体	nm
5	二酸化窒素	NO <sub>2</sub>	褐色気体	nm
6	二酸化セレン	SeO <sub>2</sub>	無色固体	nm







```

1 ↓
2 *****↓
3 *** HOMO - LUMO GAP ***↓
4 *****
5 *** LUMO 2 b2 3.95206 0.0↓
6 *** HOMO 6 a1 1.52826 1.0↓
7 ↓
8 *** f r o m *** ==> *** t o *** [eV] [cm-1] [nm]↓
9 6 a1 ==> 2 b2 2.424 19549.3 511.5↓
10 [EOF]

```

水(H<sub>2</sub>O)、硫化水素(H<sub>2</sub>S)、オゾン(O<sub>3</sub>)、二酸化硫黄(SO<sub>2</sub>)、二酸化窒素(NO<sub>2</sub>)、二酸化セレン(SeO<sub>2</sub>)の計算結果は図 1 1 に示す通りである。

秀丸エディタを起動し、

【eduDV】 - 【00. Automatic】 - 【AUTO 07. C<sub>2v</sub> 対称】 - 【ノンスピ版】 - 【\_\_\_\_\_】

で、HOMO と LUMO の間隔 (nm) を計算した。

No.	化合物名	化学式	色・状態	F08E.hlgap
1	水	H <sub>2</sub> O	無色液体	<b>93 nm</b>
2	硫化水素	H <sub>2</sub> S	無色気体	<b>212 nm</b>
3	オゾン	O <sub>3</sub>	淡青色気体	<b>576 nm</b>
4	二酸化硫黄	SO <sub>2</sub>	無色気体	<b>318 nm</b>
5	二酸化窒素	NO <sub>2</sub>	褐色気体	<b>512 nm</b>
6	二酸化セレン	SeO <sub>2</sub>	無色固体	<b>221 nm</b>

可視光線の波長は、約 400 nm～800 nm である (個人差がある)。

HOMO と LUMO の間隔が 400 nm 以下である物質は、無色と予想した。

HOMO と LUMO の間隔が 400 nm 以上、800 nm 以下である物質は、有色と予想した。

図 1 1. 6 種類の物質が無色なのか、有色なのか、予想できた

## 8. 物質の磁性

eduDV で分子の電子状態を計算するときは、プルダウンメニューで「ノンspin版」と「spin版」を選択できる。spin版の DV-X $\alpha$  法はspin分極を考慮しており、磁性を予想できる可能性がある。授業では、spin版で分子の電子状態を計算し、《MAKEL04》-《LVLSHM》を実行、《L07》を《DV PLOT》で開くことにより分子軌道のエネルギー準位図(図12)を描いた。up spin分子軌道と down spin分子軌道のエネルギーが同じになっていれば「反磁性」、異なっていれば「常磁性」と予想した。

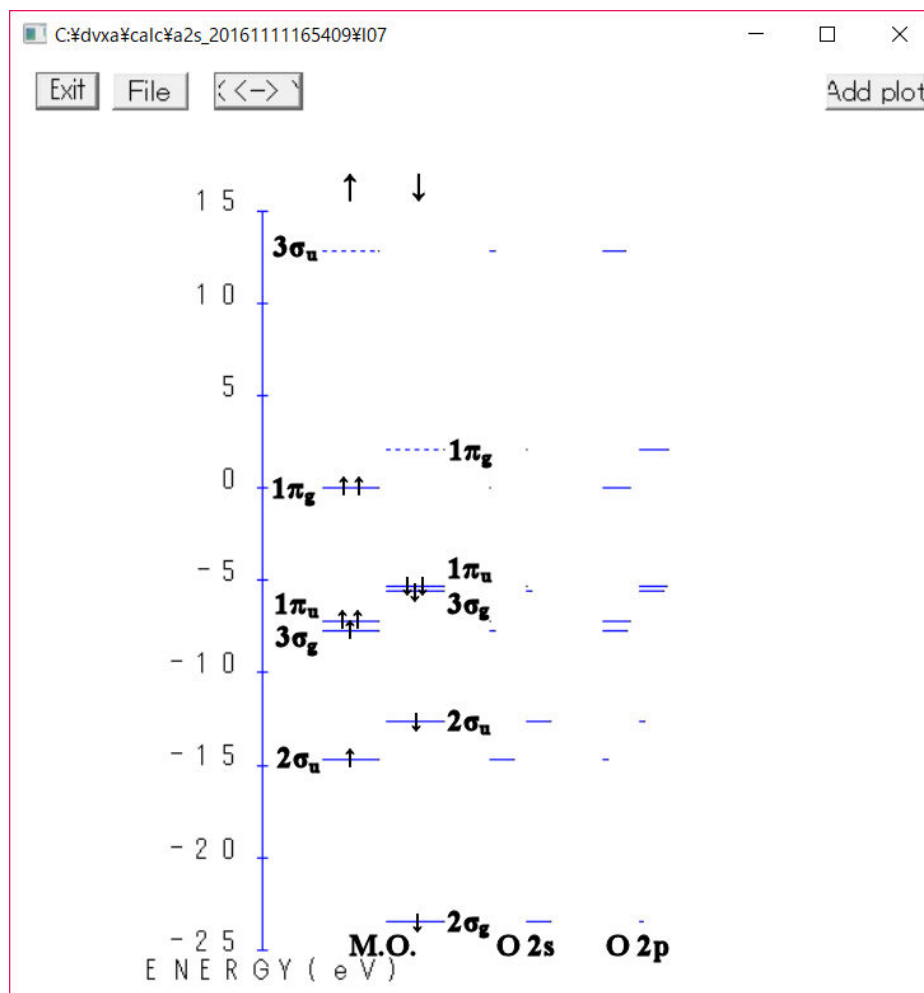


図12. 酸素(O<sub>2</sub>)は常磁性と予想できた

授業では、以下3つのグループの中で、どの物質が常磁性であるか、反磁性であるかを予想した(実際の物性としては、それぞれのグループの中で1つの物質のみが常磁性)。

1. 水素(H<sub>2</sub>), 窒素(N<sub>2</sub>), 酸素(O<sub>2</sub>), フッ素(F<sub>2</sub>), 塩素(Cl<sub>2</sub>), 臭素(Br<sub>2</sub>), ヨウ素(I<sub>2</sub>)
2. 水(H<sub>2</sub>O), 硫化水素(H<sub>2</sub>S), オゾン(O<sub>3</sub>), 二酸化硫黄(SO<sub>2</sub>), 二酸化窒素(NO<sub>2</sub>)
3. フッ化水素(HF), 塩化水素(HCl), 臭化水素(HBr), ヨウ化水素(HI), 一酸化炭素(CO), 一酸化窒素(NO)

DV-X $\alpha$  法で計算した結果、磁性の予想は、実際の物性と一致した。

秀丸エディタを起動し、

【eduDV】 - 【00. Automatic】 - 【AUTO 01. D<sub>orb</sub> 対称】 - 【スピン版】 - 【\_\_\_\_\_】  
- 【MAKEL04】 - 【LVLISHM】で、分子軌道のエネルギー準位図を作画して、  
磁性を予測した。

常磁性：磁石を近づけたとき、磁石にくっつく分子

反磁性：磁石を近づけたとき、磁石から逃げようとする分子

※計算の結果から予測した磁性をマル（○）で囲んだ。

No.	分子名	化学式	色, 状態	磁性
1	水素	H <sub>2</sub>	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
2	窒素	N <sub>2</sub>	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
3	酸素	O <sub>2</sub>	無色, 気体	<b>常磁性</b> ・反磁性
4	フッ素	F <sub>2</sub>	淡黄緑色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
5	塩素	Cl <sub>2</sub>	黄緑色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
6	臭素	Br <sub>2</sub>	赤褐色, 液体	常磁性・ <b>反磁性</b>
7	ヨウ素	I <sub>2</sub>	紫黒色, 固体	常磁性・ <b>反磁性</b>

予測：上記7種類の分子のうち、酸素のみが常磁性、その他の分子は反磁性。

秀丸エディタを起動し、

【eduDV】 - 【00. Automatic】 - 【AUTO 07. C<sub>2v</sub> 対称】 - 【スピン版】 - 【\_\_\_\_\_】  
- 【MAKEL04】 - 【LVLISHM】で、分子軌道のエネルギー準位図を作画して、  
磁性を予測した。

常磁性：磁石を近づけたとき、磁石にくっつく分子

反磁性：磁石を近づけたとき、磁石から逃げようとする分子

※計算の結果から予測した磁性をマル（○）で囲んだ。

No.	分子名	化学式	色, 状態	磁性
1	水	H <sub>2</sub> O	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
2	硫化水素	H <sub>2</sub> S	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
3	オゾン	O <sub>3</sub>	淡青色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
4	二酸化硫黄	SO <sub>2</sub>	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
5	二酸化窒素	NO <sub>2</sub>	赤褐色, 気体	<b>常磁性</b> ・反磁性

予測としては、上記5種類の分子のうち、二酸化窒素のみが常磁性、その他の分子は反磁性。

## 9. おわりに

岡山理科大学の「身近な化学 I」, 「身近な化学 II」は、理学部, 工学部, 総合情報学部, 生物地球学部といった理系学部だけではなく教育学部, 経営学部といった文系学部の学生も受講する教養教育科目である。化学を学ぶには学習段階があり、これらの授業の場合は、文系の学生にも届く言葉と教材で、小さすぎて見えない（イメージすることが難しい）原子, 分子, 電子の世界を伝える必要がある。

DV-X $\alpha$  法, VESTA, eduDV などを、秀丸エディタをプラットフォームとして起動できる DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境を利用して、原子の大きさ, 原子の中の電子（波動関数）の姿（原子軌道）, 分子の中の電子（波動関数）の姿（分子軌道）, 物質の色, 物質の磁性などが、「電子の状態」に基づいていることを学生に伝えるための教材を作成した。

授業ではシュレーディンガー方程式については取り扱っていない。しかし原子軌道や分子軌道のエネルギーが、階段のように飛び飛びの値を取ることは伝えた。物質が決まった色をしているのは、物質の「分子軌道のエネルギーの階段」の段差が決まっているからで、段差が「可視光線」のエネルギーぐらいであれば「物質は色がついている」可能性があることを説明した。物質の磁性について、電子には up スピンと down スピンの2種類があることを説明したあと、反磁性（磁石を近づけると逃げようとする性質）と常

秀丸エディタを起動し、

【eduDV】 - 【00. Automatic】 - 【AUTO 02. C<sub>∞v</sub> 対称】 - 【スピン版】 - 【\_\_\_\_\_】  
- 【MAKEL04】 - 【LVLISHM】で、分子軌道のエネルギー準位図を作画して、  
磁性を予測した。

常磁性：磁石を近づけたとき、磁石にくっつく分子

反磁性：磁石を近づけたとき、磁石から逃げようとする分子

※計算の結果から予測した磁性をマル（○）で囲んだ。

No.	分子名	化学式	色, 状態	磁性
1	フッ化水素	HF	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
2	塩化水素	HCl	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
3	臭化水素	HBr	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
4	ヨウ化水素	HI	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
5	一酸化炭素	CO	無色, 気体	常磁性・ <b>反磁性</b>
6	一酸化窒素	NO	無色, 気体	<b>常磁性</b> ・反磁性

予測としては、上記6種類の分子のうち、一酸化窒素のみが常磁性、その他の分子は反磁性。



磁性（磁石を近づけると近づこうとする性質）を紹介し、スピン版 DV-X $\alpha$  法で計算すれば、その物質が反磁性なのか、常磁性なのか、予想できる可能性があることを説明した。

物質の電磁波の吸収について、何色の光を吸収するのか（物質の色は何色なのか）といった定量的な議論はしておらず、もちろん色の濃さ（遷移確率）の話もしていない。磁性についても、DV-X $\alpha$  法でスピン軌道計算するときは、電子の初期状態によって基底状態、準安定状態のどちらに収束するか計算結果が違ってくる場合もあり、必ずしも反磁性なのか、常磁性なのか予想できるものではない[15,16]。化学を専攻する学科の授業であれば定量的な取り扱いが必要になる場合もあるが、文系学部の学生も受講する教養教育科目の学習段階では定量的な取扱いは必要ない。

DV-X $\alpha$  法は定量的な議論を要する研究に使われている第一原理計算であり、教養教育科目の化学の授業にはオーバースペックなプログラムかもしれない。しかし DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境を用いれば、必ずしも化学の教員でなくても、また DV-X $\alpha$  法の使用経験が皆無でも使いこなせる。eduDV はプルダウンメニューをクリック（タップ）していくだけで、周期表の 118 種類の元素の原子軌道や、身近な小分子の分子軌道を計算できる。さらに VESTA を起動すれば、原子軌道や分子軌道を三次元可視化できる。

高等学校や大学などの高等教育機関での授業の教材作成に、生徒や学生の実習に、DV-X $\alpha$  法のための統合支援環境（DV-X $\alpha$  法、VESTA, eduDV）は有用である。

#### 参考文献・URL

- [1] 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).
- [2] 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>
- [3] 坂根弦太, 森義裕, “教育用分子軌道計算システム eduDV の教育現場への活用”, *The Bulletin of the Information Processing Center, Okayama University of Science*, **41-42**, 9-28 (2021).
- [4] Genta Sakane, Koichi Momma, Fujio Izumi, “Building of an Integrated Assistance Environment for the DV-X $\alpha$  Method”, 7th Award for Distinguished Contributions, Memorial Award Lecture, *Bulletin of the Society for Discrete Variational X $\alpha$* , **21**(1&2), 13-17 (2008).
- [5] 有限会社サイトー企画, “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>
- [6] 秀丸エディタフリー制度 <https://hide.maruo.co.jp/support/hidemarufree.html>
- [7] 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)
- [8] 門馬綱一, “JP-Mineral”, Software, VENUS system, VESTA(Visualization for Electronic and Structural Analysis), <http://jp-minerals.org/vesta/jp/>
- [9] 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>
- [10] 足立裕彦, 小笠原一禎, 小和田善之, 坂根弦太, 水野正隆, “新版 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 2017 年.
- [11] CAS Content, Substances <https://www.cas.org/about/cas-content>
- [12] Access Structure <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>
- [13] 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).
- [14] 坂根弦太, “DV-X $\alpha$  法計算支援環境利用の手引き”, 1-176, (2021). <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [15] 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.
- [16] 足立裕彦, “量子材料化学の基礎”, 三共出版 2017 年.