

How to draw beautiful molecular orbitals, electrostatic potential maps, etc. with VESTA

Genta Sakane*

Institute for the Advancement of Higher Education

Okayama University of Science

E-mail: gsakane@ous.ac.jp

The electronic structures of molecules calculated by the Discrete Variational (DV)-X α molecular orbital method can be visualized in three dimensions by VESTA as molecular orbital isosurfaces and electrostatic potential maps. In this paper I report on how to use VESTA to produce high quality molecular orbital isosurface maps and electrostatic potential maps for use in paper and conference presentations.

1. はじめに

DV-X α 分子軌道法[1]によって計算された分子の電子構造は、結晶構造、電子・核密度等の三次元データ、及び結晶外形の可視化プログラム VESTA[2]によって、分子軌道等値表面図、静電ポテンシャルマップとして 3 次元的に可視化することができる。今回の事例報告では、論文や学会発表で使用するために、VESTA を使用して高品質の分子軌道等値表面図と静電ポテンシャルマップを作成する方法について報告する。

2. 計算環境

HP ENVY x360, Intel Core i7-10510U(1.80 GHz), RAM 16.0 GB, 64 bit, Windows 10 Home Ver. 22H2, dvxa_v205.zip(64 bit version, 2020/5/15), 秀丸エディタ Ver. 9.24(64 bit edition), VESTA Ver. 3.5.8, DV-X α .zip Ver. 2020/12/19, eduDV.zip Ver. 2021/2/26.

今回は DV-X α 法のための統合支援環境（秀丸エディタ環境）の教育用分子軌道計算システム eduDV を用い、eduDV の“**AUTO 10.**

D_{3d} 対称【エタン型

(ねじれ形) 分子】

A₂B₆ 型分子 (エタンなど)

...”の中から、

“C₂H₆ エタン分子

(ノンスピンの) の電子

状態計算を行った

(図 1)。

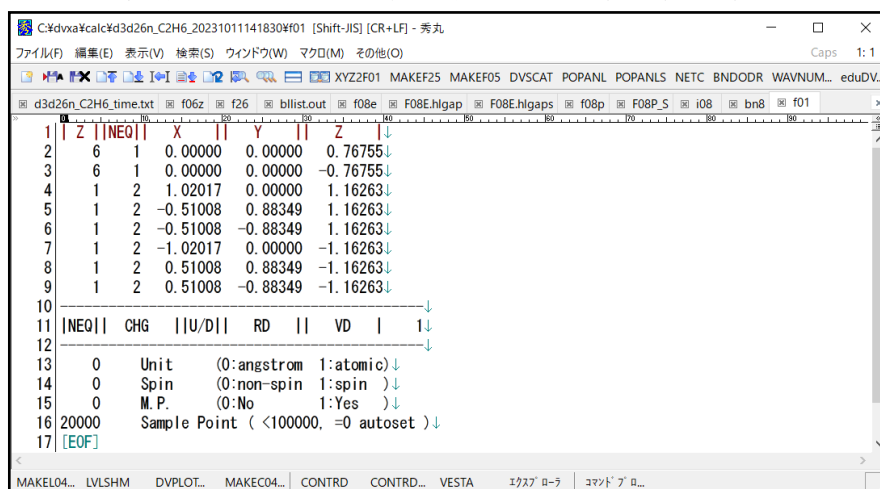


図 1. eduDV でエタン (C₂H₆) の電子状態計算を行った画面

3. 原子の球

VESTA ボタンを押すと、エタン (C_2H_6) の Ball-and-stick が表示される(図 2)。

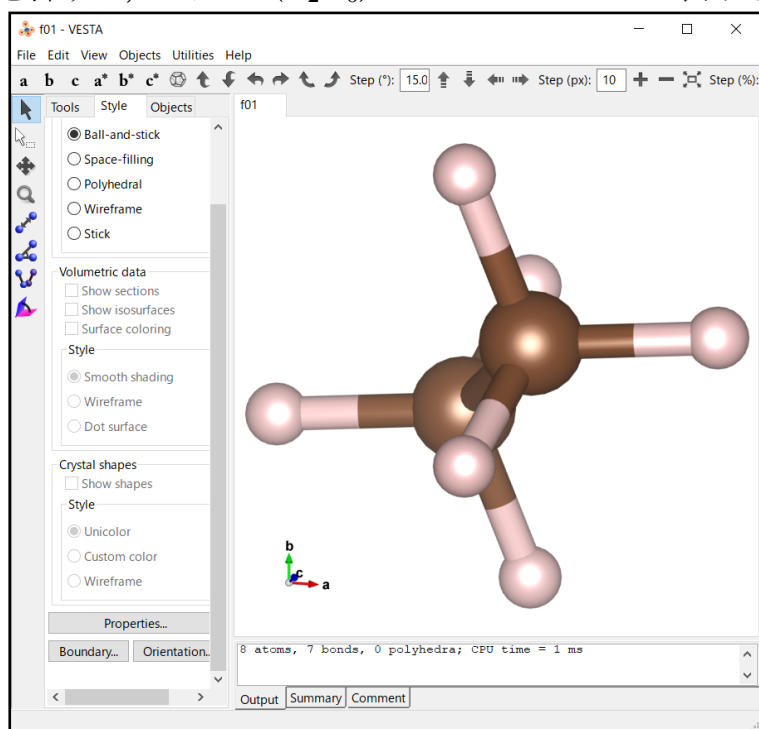


図 2. VESTA で描いたエタン (C_2H_6) の Ball-and-stick 図

遠目に見れば
水素原子や
炭素原子の
球は十分に
美しいが、
VESTA で
画像を拡大
すると輪郭
が少し
ガタガタ
している
(図 3)。

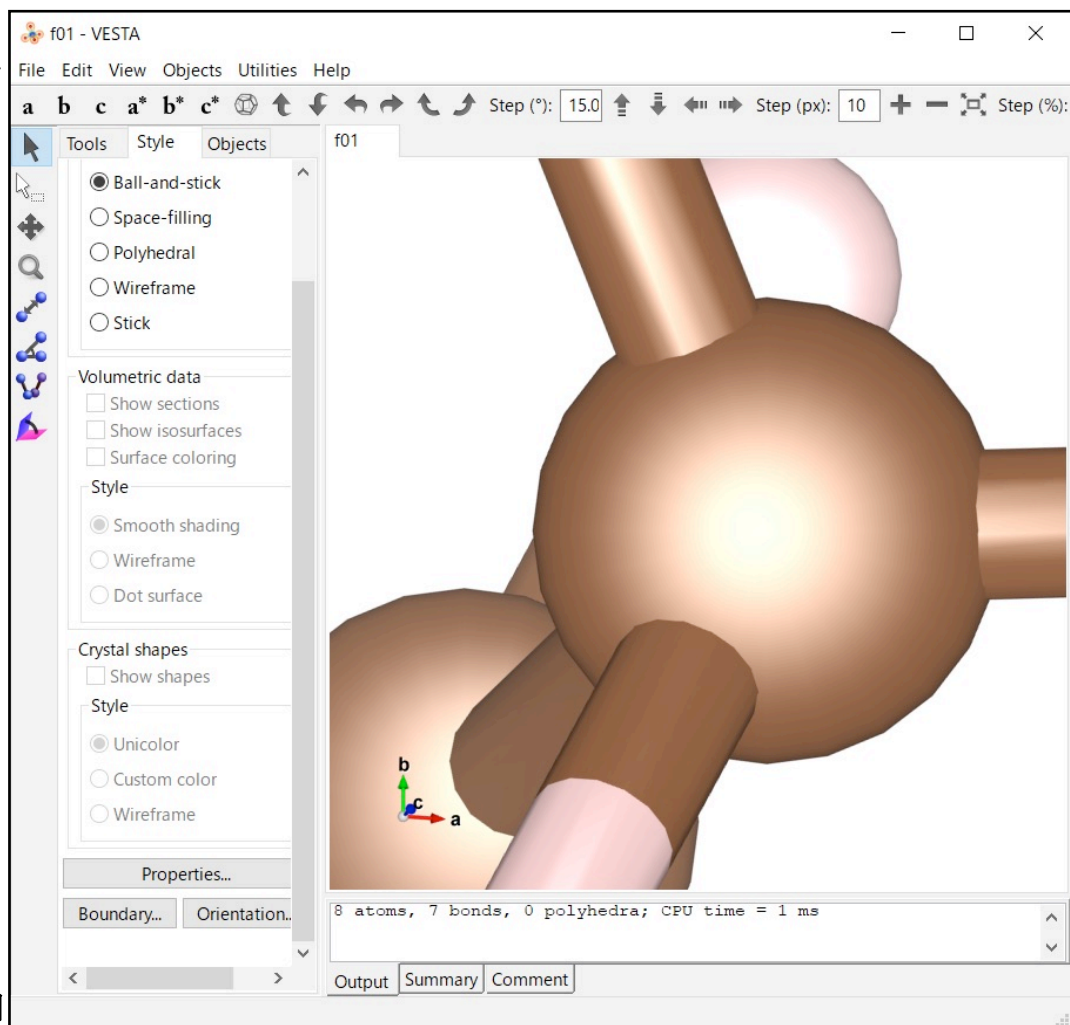


図 3.
拡大図

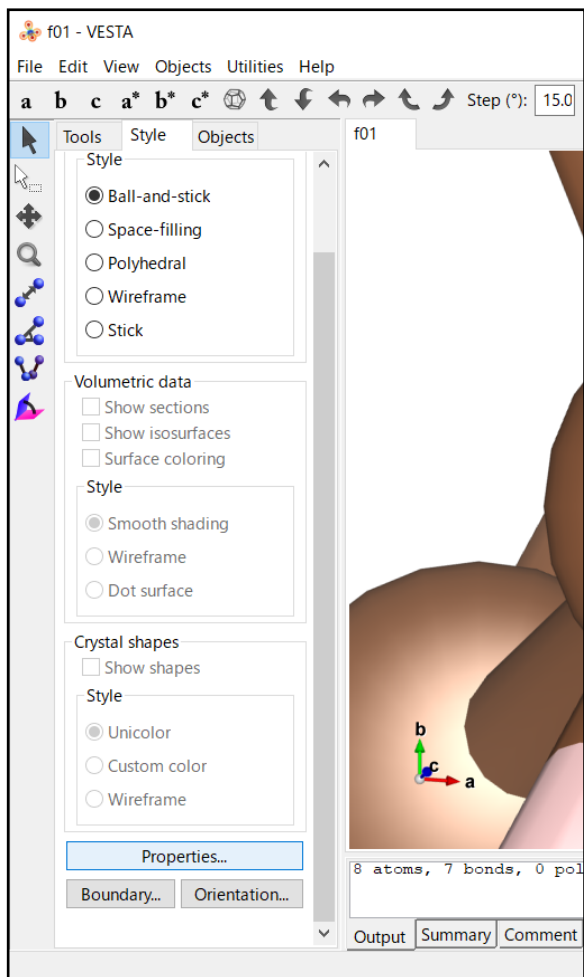


図 4. 左サイドパネル

VESTA 画面の左サイドパネルの下の方にある“Properties...” ボタンをクリック(図 4)すると [Properties] ダイアログボックスが開く(図 5)。

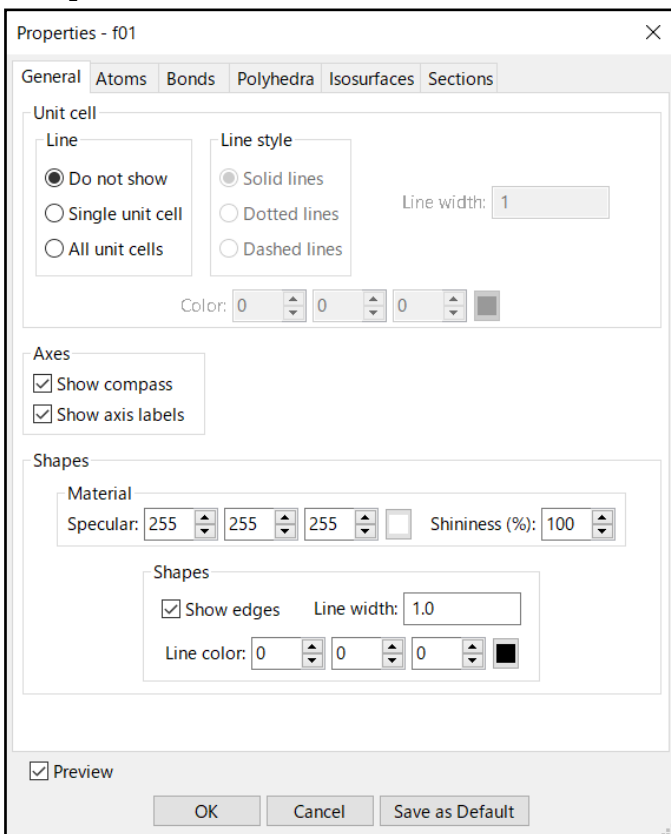


図 5. Properties ダイアログボックス

[Properties] ダイアログボックスの上の方の [Atoms] タブをクリックする(図 6)。

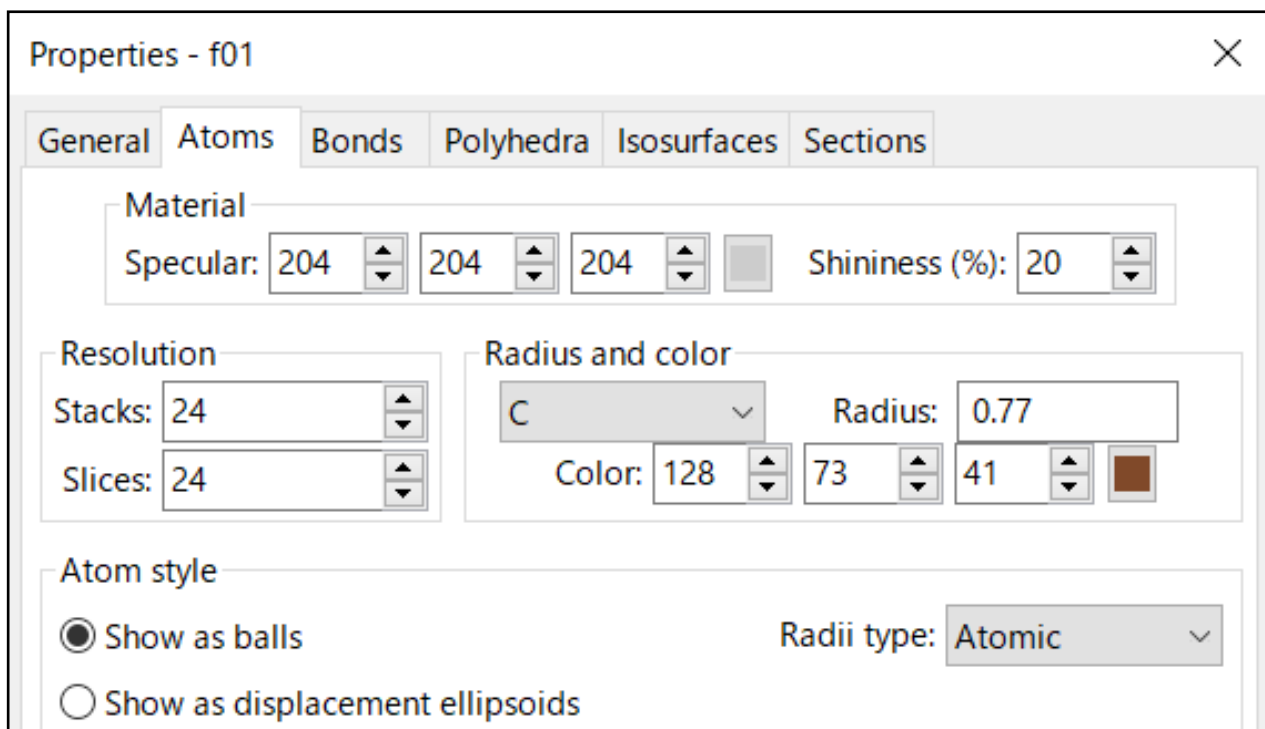


図 6. [Properties] ダイアログボックスの [Atoms] ページ

ここで“Resolution”の箇所は、Stacks: 24, Slices: 24 となっている。この数字を大きくすることで、原子球の輪郭のガタガタが滑らかになる。例えば、Stacks: 96, Slices: 96 としてみる(図 7)。

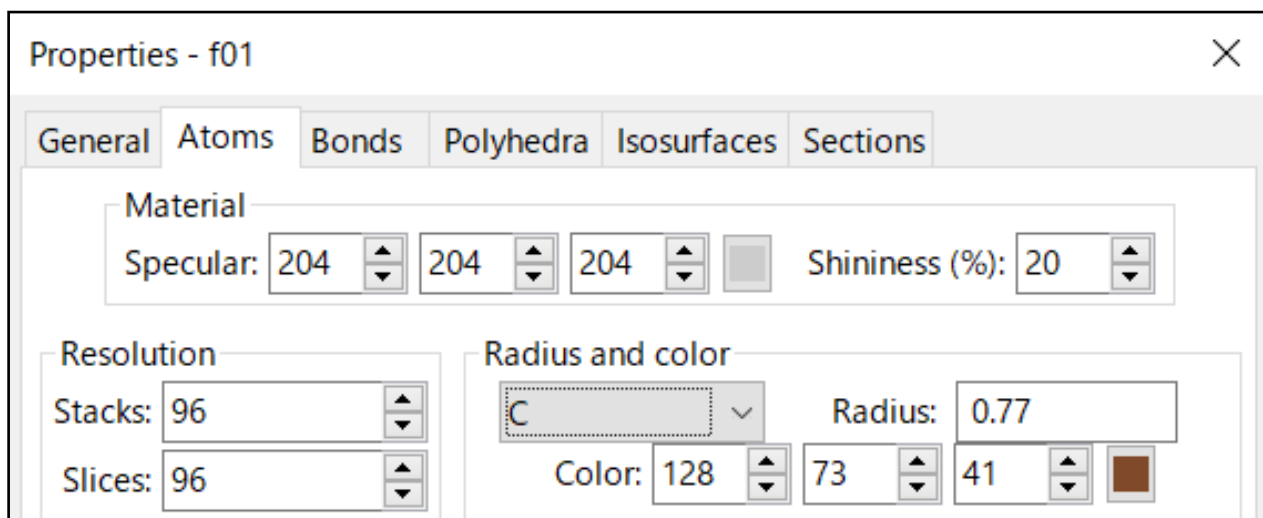


図 7. Stacks と Slices の数字を大きくする

すると、原子球の輪郭は滑らかになった(図 8)。球表面の反射光も高解像度になった。

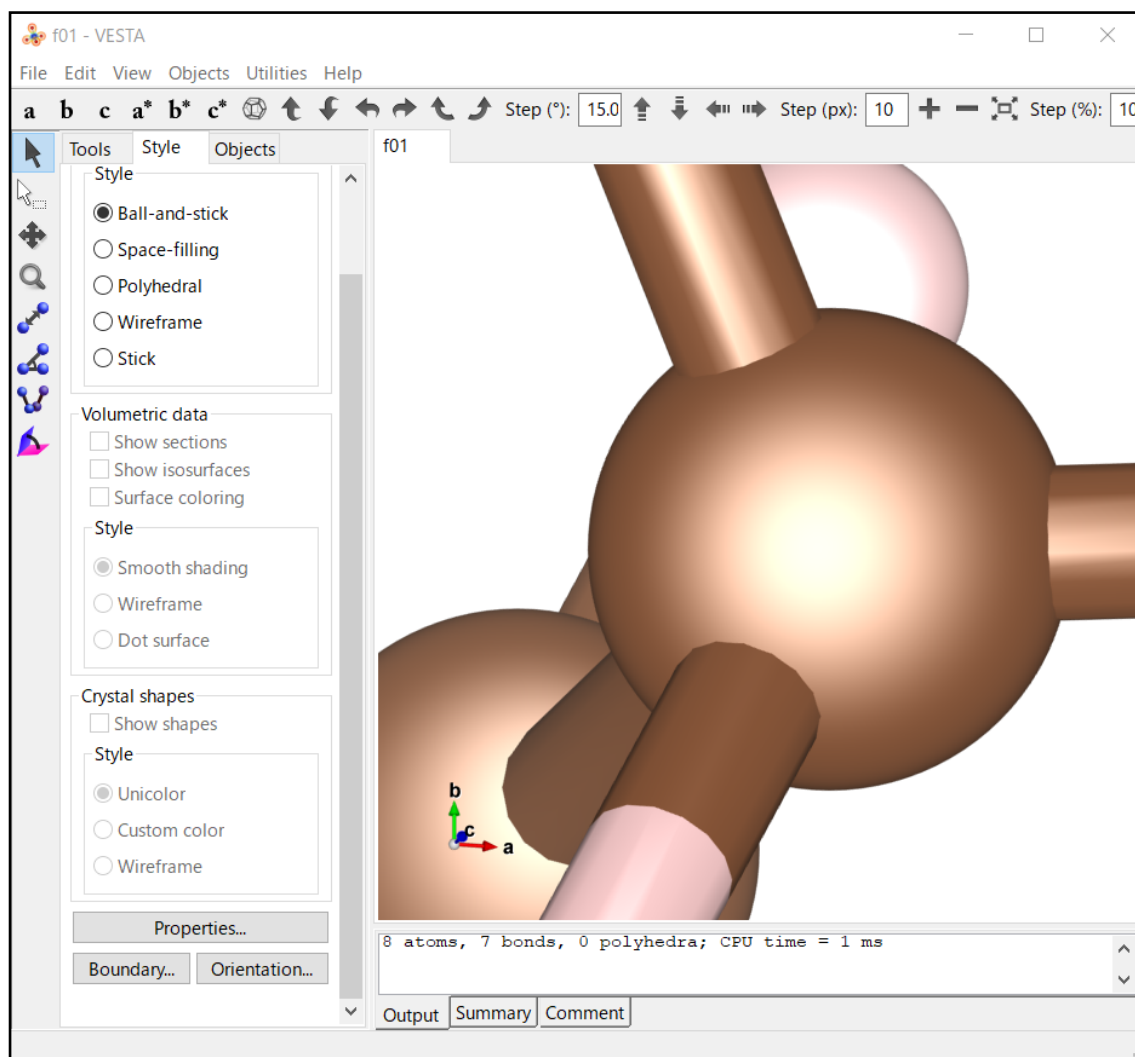


図 8. 原子球の輪郭が滑らかに、球表面の光反射も高解像度になった

4. 結合の棒

図8を見ると、原子球と結合の棒の接触箇所がガタガタしている。また、結合の棒の表面も、多角柱のようにガタガタしている。これを滑らかにするには、[Properties]ダイアログボックスの上の方の[Bonds]タブをクリックする(図9)。ここで“Resolution”の箇所は、Stacks: 1, Slices: 16 となっている。この数字を大きくすることで、結合の棒が滑らかな円柱となる。例えば、Stacks: 4, Slices: 64 としてみると、結合の棒は表面が滑らかな円柱となった(図10)。

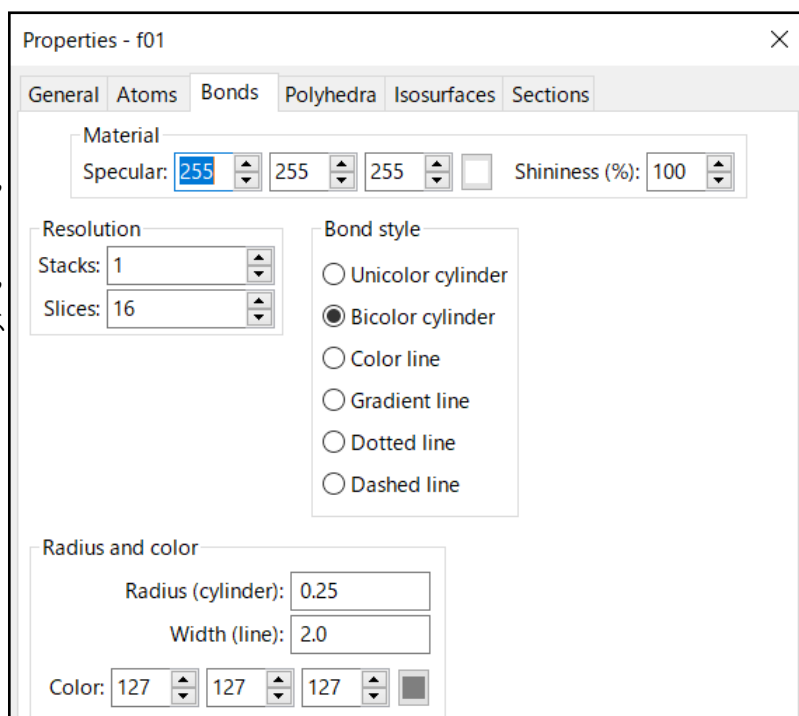


図9. [Properties]ダイアログボックスの[Bonds]ページ

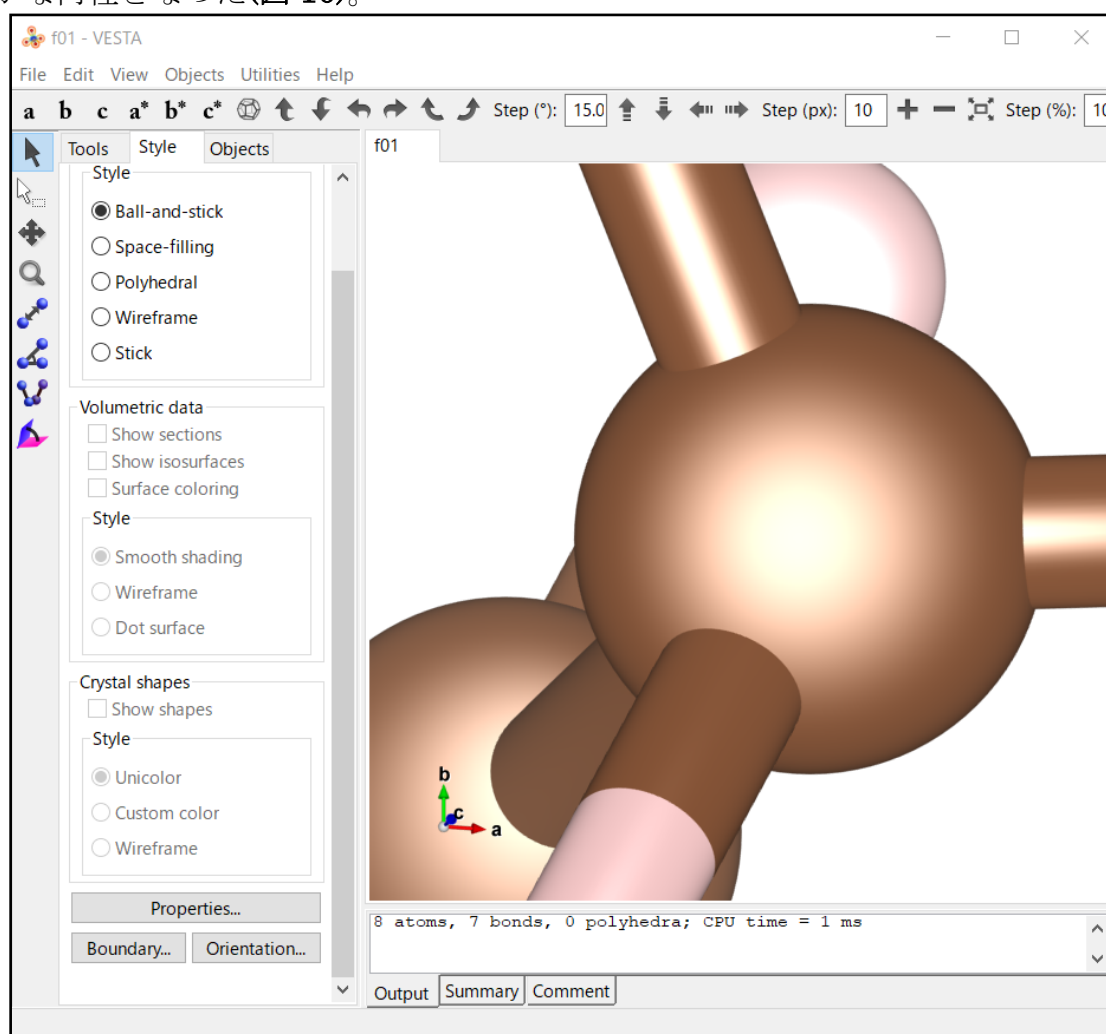


図10. 結合の棒の表面が円柱のように滑らかになった

5. 等値表面

メニューバーの[Edit]をクリックし、[Edit Data]の[Volumetric Data...]をクリック(図 11)、エタン (C_2H_6) の HOMO “008_1eg.sca” を読み込み 1eg 軌道の等値表面図を表示する(図 12)。

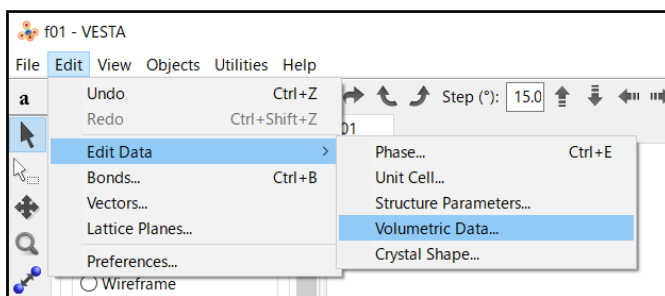


図 11. 等値表面のデータを読み込む

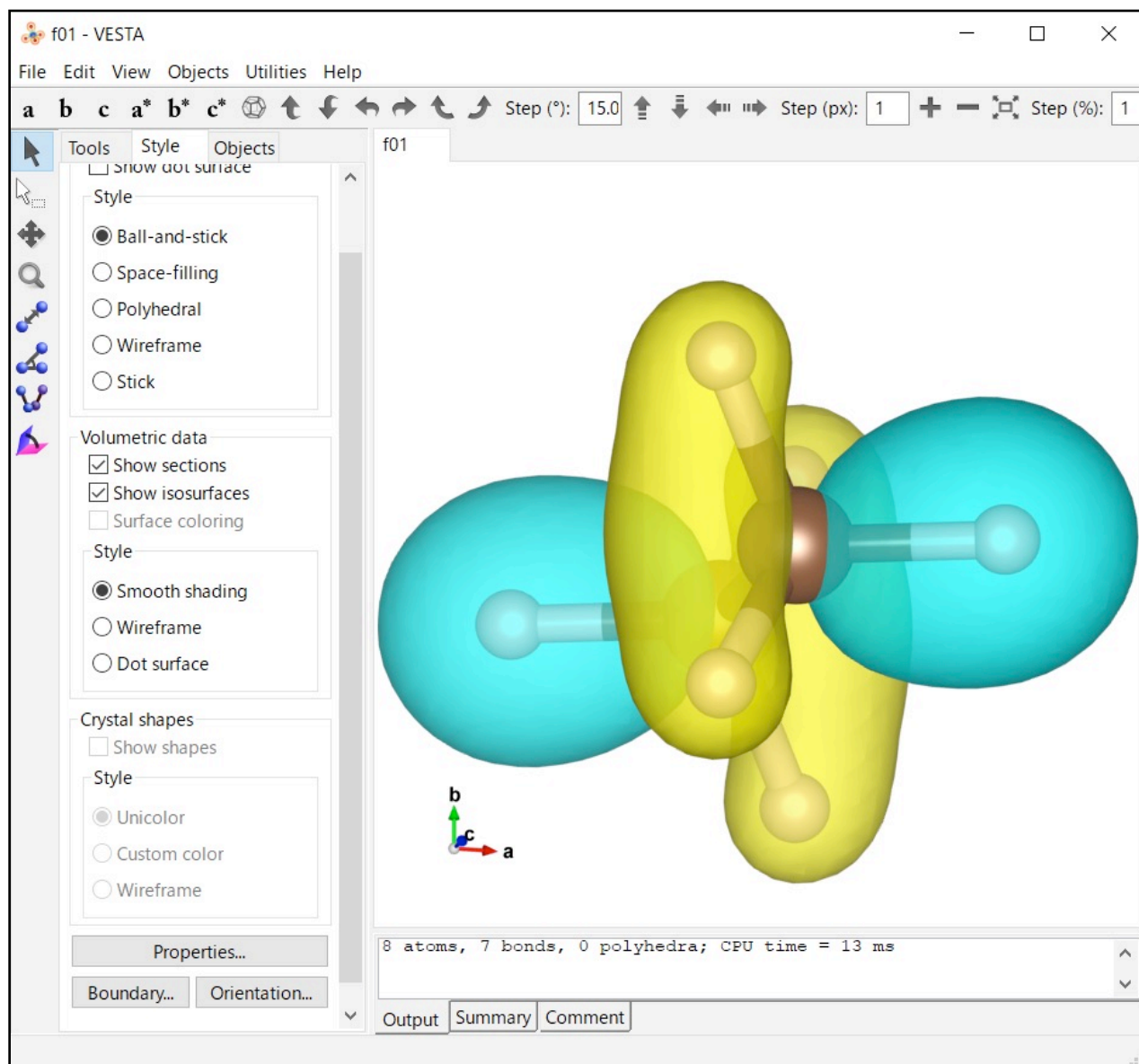


図 12. エタン (C_2H_6) の 1eg 軌道(HOMO)の等値表面図

分子軌道の形状を見るには十分な図であるが、等値表面をよく見ると段々が見え、表面が滑らかとは言えない。秀丸エディタ画面に戻ってメニューバーの[ファイル(F)]をクリックし、[開く(O)...]で “c04d” を開く(図 13)。

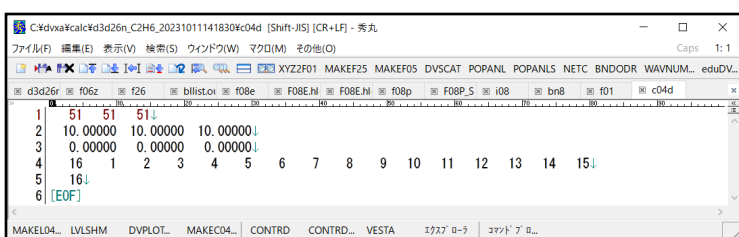


図 13. c04d

$$\begin{array}{r} \text{---+---1---+---2} \\ \text{51 51 51} \\ \text{10.00000 10.00000} \\ \text{---+---1---+---2} \end{array}$$

$\text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} - 1 \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} - 2$
 151 151 151
 10.00000 10.00000
 $\text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} - 1 \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} - 2$

(1行目)

(2行目)

131

6. 画像ファイルの出力

メニューバーの[File]をクリックし、[Export Raster Image...]をクリック(図 15), 例えばファイルの種類(T)を[JPEG file (*.jpg)]にし、ファイル名を指定して[保存(S)]する。

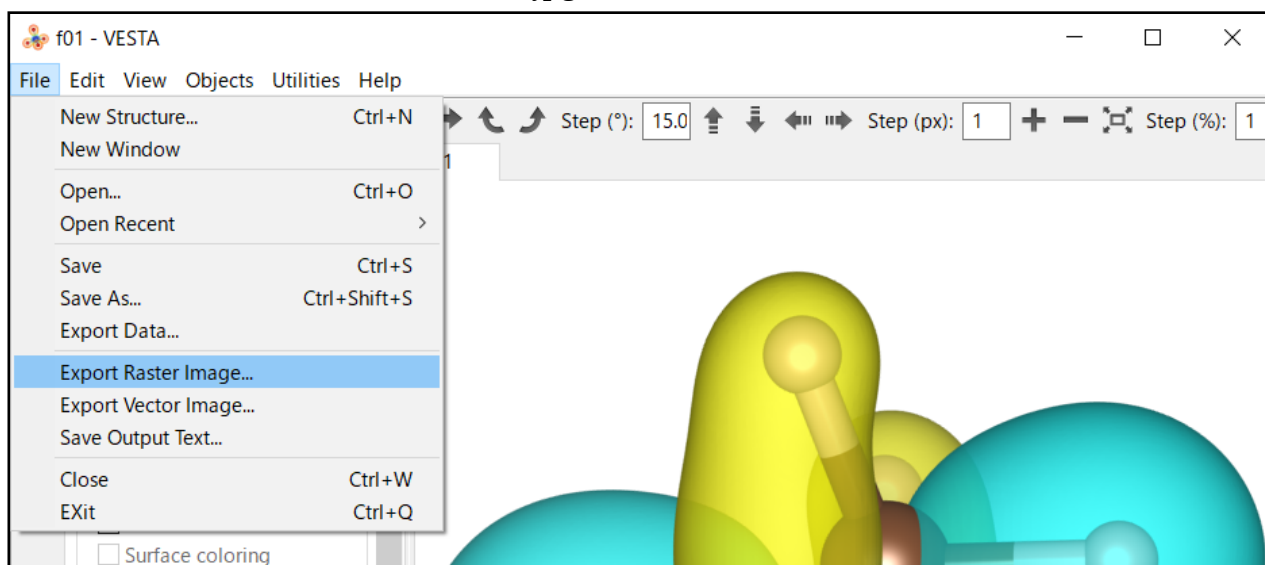


図 15. 画像ファイルの出力

すると[Export image]ダイアログボックスが表示される。デフォルトでは“Scale x”は“1”が入っている(図 16)。今回の例では“Scale x” = 1 のときは、628 ピクセル×629 ピクセルの JPEG 画像が出力された。この“Scale x”の値を“2”にすると、2 倍の 1256 ピクセル×1258 ピクセルの JPEG 画像が出力される。同様に“Scale x”の値を 1 つずつ 10 まで増やしてみたときのファイルサイズ、ピクセル数を図 17 に示す。

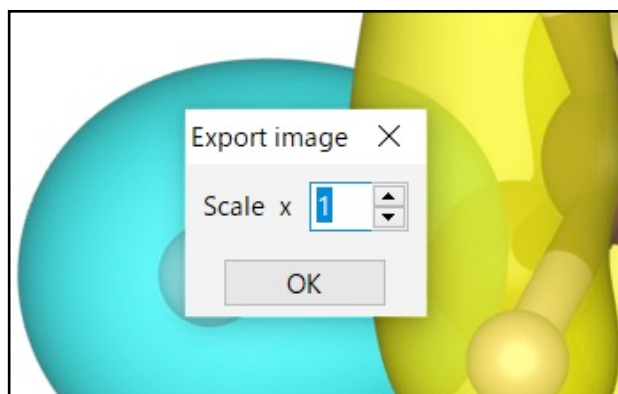


図 16. “Scale x”

7. まとめ

試行錯誤の計算機実験の段階では、高解像度の図は必要ない。デフォルトのままで十分である。しかし学会のポスター発表で大きな図を使うとき、論文投稿のときには、少々手間と時間がかかるが、せっかくの DV-X α 計算結果を VESTA で作画する場合、なるべく高解像度の美しい図を使いたい。

f01x1.jpg	24 KB	629 ピクセル	628 x 629
f01x2.jpg	64 KB	1258 ピクセル	1256 x 1258
f01x3.jpg	119 KB	1887 ピクセル	1884 x 1887
f01x4.jpg	187 KB	2516 ピクセル	2512 x 2516
f01x5.jpg	269 KB	3145 ピクセル	3140 x 3145
f01x6.jpg	364 KB	3774 ピクセル	3768 x 3774
f01x7.jpg	471 KB	4403 ピクセル	4396 x 4403
f01x8.jpg	591 KB	5032 ピクセル	5024 x 5032
f01x9.jpg	723 KB	5661 ピクセル	5652 x 5661
f01x10.jpg	868 KB	6290 ピクセル	6280 x 6290

図 17. “Scale x” を大きくする

8. References

- (1) 新版 はじめての電子状態計算 足立裕彦, 小笠原一禎, 小和田善之, 坂根弦太, 水野正隆 著, 三共出版.
- (2) K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data", *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272-1276 (2011).