

教育用分子軌道計算システム eduDV・2017 年版

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[5-11], 最新版のプログラム一式[12]とマニュアル[13], および論文[14]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[1-14], DV- $X\alpha$ 法[15-25], 秀丸エディタ[26], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[27], VESTA[28, 29]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. eduDV, VESTA を含んだ“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”の使い方については, 書籍として出版した[30].

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.

教育用分子軌道計算システム eduDV に含まれる 64 個のプログラムのうち, 孤立原子計算プログラム atom, atomn および孤立イオン計算プログラム ion, ionn は, 原子番号 1 番の水素(^1H)から 118 番のオガネソン(^{118}Og)まで周期表(表 1)の全元素に対応している[11]が, 残りの 60 個のプログラムは, 原子番号 1 番の水素(^1H)から原子番号 94 番のプルトニウム(^{94}Pu)までにしか対応していなかった. 今回, これら 60 個のプログラムすべてを拡張し, 原子番号 95 番のアメリシウム(^{95}Am)から 118 番のオガネソン(^{118}Og)までにも対応したので報告する.

1																18
H																He
2																
Li	Be															
Na	Mg															
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At
Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts

*1	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

2. 開発環境

Windows ノートパソコン (hp ENVY, CPU: Intel Core i7-4510U, 2.60 GHz, RAM: 16.0 GB, OS: Windows 10, 64-bit) に Open Watcom Fortran77 compiler (V2)[31]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

eduDV の 60 種類のプログラムを改訂する (周期表の全元素に対応させる) にあたり, 修正・開発したプログラム・ファイルは以下の通りである。

3-1. Fortran 77 プログラム (C:\¥dvxa¥scat¥*.f)

c2v12.f	c2v12n.f	c2v12s.f	c3v13.f	c3v13n.f	c3v13s.f
c8v11.f	c8v111.f	c8v1111.f	c8v1111n.f	c8v1111s.f	c8v1111n.f
c8v111s.f	c8v11n.f	c8v11s.f	d2h24.f	d2h24n.f	d2h24s.f
d3d26.f	d3d26n.f	d3d26s.f	d3h13.f	d3h13n.f	d3h13s.f
d4h14.f	d4h14n.f	d4h14s.f	d6h66.f	d6h66n.f	d6h66s.f
d8h12.f	d8h12n.f	d8h12s.f	d8h2.f	d8h22.f	d8h22n.f
d8h22s.f	d8h2n.f	d8h2s.f	mh2o6.f	mh2o6n.f	mh2o6s.f
ml4.f	ml4n.f	ml4s.f	ml6.f	ml6n.f	ml6s.f
oh16.f	oh166.f	oh166n.f	oh166s.f	oh16n.f	oh16s.f
td14.f	td144.f	td144n.f	td144s.f	td14n.f	td14s.f

3-2. Fortran 77 プログラムコンパイル用バッチファイル (C:\¥dvxa¥lscat¥*.bat)

lc2v12.bat	lc2v12n.bat	lc2v12s.bat	lc3v13.bat	lc3v13n.bat	lc3v13s.bat
lc8v11.bat	lc8v111.bat	lc8v1111.bat	lc8v1111n.bat	lc8v1111s.bat	lc8v1111n.bat
lc8v111s.bat	lc8v11n.bat	lc8v11s.bat	ld2h24.bat	ld2h24n.bat	ld2h24s.bat
ld3d26.bat	ld3d26n.bat	ld3d26s.bat	ld3h13.bat	ld3h13n.bat	ld3h13s.bat
ld4h14.bat	ld4h14n.bat	ld4h14s.bat	ld6h66.bat	ld6h66n.bat	ld6h66s.bat
ld8h12.bat	ld8h12n.bat	ld8h12s.bat	ld8h2.bat	ld8h22.bat	ld8h22n.bat
ld8h22s.bat	ld8h2n.bat	ld8h2s.bat	lmh2o6.bat	lmh2o6n.bat	lmh2o6s.bat
lml4.bat	lml4n.bat	lml4s.bat	lml6.bat	lml6n.bat	lml6s.bat
loh16.bat	loh166.bat	loh166n.bat	loh166s.bat	loh16n.bat	loh16s.bat
ltd14.bat	ltd144.bat	ltd144n.bat	ltd144s.bat	ltd14n.bat	ltd14s.bat

3-3. Fortran 77 プログラム実行ファイル (C:\¥dvxa¥object¥*.exe)

c2v12.exe	c2v12n.exe	c2v12s.exe	c3v13.exe	c3v13n.exe	c3v13s.exe
c8v11.exe	c8v111.exe	c8v1111.exe	c8v1111n.exe	c8v1111s.exe	c8v1111n.exe
c8v111s.exe	c8v11n.exe	c8v11s.exe	d2h24.exe	d2h24n.exe	d2h24s.exe
d3d26.exe	d3d26n.exe	d3d26s.exe	d3h13.exe	d3h13n.exe	d3h13s.exe
d4h14.exe	d4h14n.exe	d4h14s.exe	d6h66.exe	d6h66n.exe	d6h66s.exe
d8h12.exe	d8h12n.exe	d8h12s.exe	d8h2.exe	d8h22.exe	d8h22n.exe
d8h22s.exe	d8h2n.exe	d8h2s.exe	mh2o6.exe	mh2o6n.exe	mh2o6s.exe
ml4.exe	ml4n.exe	ml4s.exe	ml6.exe	ml6n.exe	ml6s.exe
oh16.exe	oh166.exe	oh166n.exe	oh166s.exe	oh16n.exe	oh16s.exe
td14.exe	td144.exe	td144n.exe	td144s.exe	td14n.exe	td14s.exe

3-4. 実行用バッチファイル (C:\¥dvxa¥exec¥*.bat)

a2.bat	a2b2.bat	a2b2n.bat	a2b2n_AUTO.bat	a2b2s.bat
a2b2s_AUTO.bat	a2n.bat	a2n_AUTO.bat	a2s.bat	a2s_AUTO.bat
ab.bat	ab2.bat	ab2n.bat	ab2n_AUTO.bat	ab2s.bat
ab2s_AUTO.bat	abc.bat	abcd.bat	abcdn.bat	abcdn_AUTO.bat
abcs.bat	abcs_AUTO.bat	abcn.bat	abcn_AUTO.bat	abcs.bat
abcs_AUTO.bat	abn.bat	abn_AUTO.bat	abs.bat	abs_AUTO.bat
c2v12.bat	c2v12n.bat	c2v12n_AUTO.bat	c2v12s.bat	c2v12s_AUTO.bat
c3v13.bat	c3v13n.bat	c3v13n_AUTO.bat	c3v13s.bat	c3v13s_AUTO.bat
c8v11.bat	c8v111.bat	c8v1111.bat	c8v1111n.bat	c8v1111s.bat
c8v111n.bat	c8v111s.bat	c8v11n.bat	c8v11s.bat	d2h24.bat

d2h24n.bat	d2h24n_AUTO.bat	d2h24s.bat	d2h24s_AUTO.bat	d3d26.bat
d3d26n.bat	d3d26n_AUTO.bat	d3d26s.bat	d3d26s_AUTO.bat	d3h13.bat
d3h13n.bat	d3h13n_AUTO.bat	d3h13s.bat	d3h13s_AUTO.bat	d4h14.bat
d4h14n.bat	d4h14n_AUTO.bat	d4h14s.bat	d4h14s_AUTO.bat	d6h66.bat
d6h66n.bat	d6h66n_AUTO.bat	d6h66s.bat	d6h66s_AUTO.bat	d8h12.bat
d8h12n.bat	d8h12s.bat	d8h2.bat	d8h22.bat	d8h22n.bat
d8h22s.bat	d8h2n.bat	d8h2s.bat	mh2o6.bat	mh2o6n.bat
mh2o6n_AUTO.bat	mh2o6s.bat	mh2o6s_AUTO.bat	m14.bat	m14n.bat
m14n_AUTO.bat	m14s.bat	m14s_AUTO.bat	m16.bat	m16n.bat
m16n_AUTO.bat	m16s.bat	m16s_AUTO.bat	oh16.bat	oh166.bat
oh166n.bat	oh166n_AUTO.bat	oh166s.bat	oh166s_AUTO.bat	oh16n.bat
oh16n_AUTO.bat	oh16s.bat	oh16s_AUTO.bat	td14.bat	td144.bat
td144n.bat	td144n_AUTO.bat	td144s.bat	td144s_AUTO.bat	td14n.bat
td14n_AUTO.bat	td14s.bat	td14s_AUTO.bat		

3-5. 秀丸エディタマクロ (C:\ydvxa\Macros\eduDV*.mac)

a2.mac	a2b2.mac	a2b2menu.mac	a2b2n.mac	a2b2n_C2H2.mac
a2b2n_Hg2I2.mac	a2b2n_menu.mac	a2b2s.mac	a2b2s_C2H2.mac	a2b2s_Hg2I2.mac
a2b2s_menu.mac	a2menu.mac	a2n.mac	a2n_Br2.mac	a2n_Cl2.mac
a2n_F2.mac	a2n_H2.mac	a2n_I2.mac	a2n_menu.mac	a2n_N2.mac
a2n_O2.mac	a2s.mac	a2s_Br2.mac	a2s_Cl2.mac	a2s_F2.mac
a2s_H2.mac	a2s_I2.mac	a2s_menu.mac	a2s_N2.mac	a2s_O2.mac
ab.mac	ab2.mac	ab2menu.mac	ab2n.mac	ab2n_CO2.mac
ab2n_CS2.mac	ab2n_HgCl2.mac	ab2n_KrF2.mac	ab2n_menu.mac	ab2n_XeF2.mac
ab2s.mac	ab2s_CO2.mac	ab2s_CS2.mac	ab2s_HgCl2.mac	ab2s_KrF2.mac
ab2s_menu.mac	ab2s_XeF2.mac	abc.mac	abcd.mac	abcdmenu.mac
abcdn.mac	abcdn_HCNO.mac	abcdn_menu.mac	abcds.mac	abcds_HCNO.mac
abcds_menu.mac	abcmenu.mac	abcn.mac	abcn_BrCN.mac	abcn_ClCN.mac
abcn_FCN.mac	abcn_HCN.mac	abcn_menu.mac	abcs.mac	abcs_BrCN.mac
abcs_ClCN.mac	abcs_FCN.mac	abcs_HCN.mac	abcs_menu.mac	abmenu.mac
abn.mac	abn_CO.mac	abn_HBr.mac	abn_HCl.mac	abn_HF.mac
abn_HI.mac	abn_menu.mac	abn_NO.mac	abs.mac	abs_CO.mac
abs_HBr.mac	abs_HCl.mac	abs_HF.mac	abs_HI.mac	abs_menu.mac
abs_NO.mac	AUTOa2.mac	AUTOa2b2.mac	AUTOab.mac	AUTOab2.mac
AUTOabc.mac	AUTOabcd.mac	AUTOc2v12.mac	AUTOc3v13.mac	AUTOd2h24.mac
AUTOd3d26.mac	AUTOd3h13.mac	AUTOd4h14.mac	AUTOd6h66.mac	AUTOmh2o6.mac
AUTOm14.mac	AUTOm16.mac	AUTOoh16.mac	AUTOoh166.mac	AUTOt144.mac
AUTOt144.mac	c2v12.mac	c2v12menu.mac	c2v12n.mac	c2v12n_Cl2O2.mac
c2v12n_ClO2.mac	c2v12n_GeCl2.mac	c2v12n_GeF2.mac	c2v12n_H2O.mac	c2v12n_H2S.mac
c2v12n_menu.mac	c2v12n_NO2.mac	c2v12n_O3.mac	c2v12n_OF2.mac	c2v12n_SC12.mac
c2v12n_SeO2.mac	c2v12n_SF2.mac	c2v12n_SiF2.mac	c2v12n_SO2.mac	c2v12s.mac
c2v12s_Cl2O2.mac	c2v12s_ClO2.mac	c2v12s_GeCl2.mac	c2v12s_GeF2.mac	c2v12s_H2O.mac
c2v12s_H2S.mac	c2v12s_menu.mac	c2v12s_NO2.mac	c2v12s_O3.mac	c2v12s_OF2.mac
c2v12s_SC12.mac	c2v12s_SeO2.mac	c2v12s_SF2.mac	c2v12s_SiF2.mac	c2v12s_SO2.mac
c3v13.mac	c3v13menu.mac	c3v13n.mac	c3v13n_AsBr3.mac	c3v13n_AsCl3.mac
c3v13n_AsF3.mac	c3v13n_AsH3.mac	c3v13n_AsI3.mac	c3v13n_BiBr3.mac	c3v13n_BiCl3.mac
c3v13n_GdI3.mac	c3v13n_LuCl3.mac	c3v13n_menu.mac	c3v13n_NCl3.mac	c3v13n_NF3.mac
c3v13n_NH3.mac	c3v13n_PBr3.mac	c3v13n_PCl3.mac	c3v13n_PF3.mac	c3v13n_PH3.mac
c3v13n_PrI3.mac	c3v13n_SbCl3.mac	c3v13n_SbH3.mac	c3v13s.mac	c3v13s_AsBr3.mac
c3v13s_AsCl3.mac	c3v13s_AsF3.mac	c3v13s_AsH3.mac	c3v13s_AsI3.mac	c3v13s_BiBr3.mac
c3v13s_BiCl3.mac	c3v13s_GdI3.mac	c3v13s_LuCl3.mac	c3v13s_menu.mac	c3v13s_NCl3.mac
c3v13s_NF3.mac	c3v13s_NH3.mac	c3v13s_PBr3.mac	c3v13s_PCl3.mac	c3v13s_PF3.mac
c3v13s_PH3.mac	c3v13s_PrI3.mac	c3v13s_SbCl3.mac	c3v13s_SbH3.mac	d2h24.mac
d2h24menu.mac	d2h24n.mac	d2h24n_C2Cl4.mac	d2h24n_C2F4.mac	d2h24n_C2H4.mac
d2h24n_menu.mac	d2h24n_N2O4s.mac	d2h24n_N2O4v.mac	d2h24s.mac	d2h24s_C2Cl4.mac
d2h24s_C2F4.mac	d2h24s_C2H4.mac	d2h24s_menu.mac	d2h24s_N2O4s.mac	d2h24s_N2O4v.mac
d3d26.mac	d3d26menu.mac	d3d26n.mac	d3d26n_C2F6.mac	d3d26n_C2H6.mac

d3d26n_menu.mac	d3d26s.mac	d3d26s_C2F6.mac	d3d26s_C2H6.mac	d3d26s_menu.mac
d3h13.mac	d3h13menu.mac	d3h13n.mac	d3h13n_BBr3.mac	d3h13n_BC13.mac
d3h13n_BF3.mac	d3h13n_BI3.mac	d3h13n_menu.mac	d3h13s.mac	d3h13s_BBr3.mac
d3h13s_BC13.mac	d3h13s_BF3.mac	d3h13s_BI3.mac	d3h13s_menu.mac	d4h14.mac
d4h14menu.mac	d4h14n.mac	d4h14n_AuCl4.mac	d4h14n_menu.mac	d4h14n_PdCl4.mac
d4h14n_PtCl4.mac	d4h14s.mac	d4h14s_AuCl4.mac	d4h14s_menu.mac	d4h14s_PdCl4.mac
d4h14s_PtCl4.mac	d6h66.mac	d6h66menu.mac	d6h66n.mac	d6h66n_C6Br6.mac
d6h66n_C6Cl6.mac	d6h66n_C6F6.mac	d6h66n_C6H6.mac	d6h66n_C6I6.mac	d6h66n_menu.mac
d6h66s.mac	d6h66s_C6Br6.mac	d6h66s_C6Cl6.mac	d6h66s_C6F6.mac	d6h66s_C6H6.mac
d6h66s_C6I6.mac	d6h66s_menu.mac	mh2o6.mac	mh2o6menu.mac	mh2o6n.mac
mh2o6n_CoH2O62p.mac	mh2o6n_CoH2O63p.mac	mh2o6n_CrH2O62p.mac	mh2o6n_CrH2O63p.mac	
mh2o6n_FeH2O62p.mac	mh2o6n_FeH2O63p.mac	mh2o6n_menu.mac	mh2o6n_MnH2O62p.mac	
mh2o6n_NiH2O62p.mac	mh2o6n_RuH2O63p.mac	mh2o6n_TiH2O63p.mac	mh2o6n_TiH2O64p.mac	
mh2o6n_VH2O62p.mac	mh2o6n_VH2O63p.mac	mh2o6n_ZnH2O62p.mac	mh2o6s.mac	
mh2o6s_CoH2O62p.mac	mh2o6s_CoH2O63p.mac	mh2o6s_CrH2O62p.mac	mh2o6s_CrH2O63p.mac	
mh2o6s_FeH2O62p.mac	mh2o6s_FeH2O63p.mac	mh2o6s_menu.mac	mh2o6s_MnH2O62p.mac	
mh2o6s_NiH2O62p.mac	mh2o6s_RuH2O63p.mac	mh2o6s_TiH2O63p.mac	mh2o6s_TiH2O64p.mac	
mh2o6s_VH2O62p.mac	mh2o6s_VH2O63p.mac	mh2o6s_ZnH2O62p.mac		
ml4.mac	ml4menu.mac	ml4n.mac	ml4n_CoBr42m.mac	ml4n_CoCl42m.mac
ml4n_CoI42m.mac	ml4n_menu.mac	ml4s.mac	ml4s_CoBr42m.mac	ml4s_CoCl42m.mac
ml4s_CoI42m.mac	ml4s_menu.mac	ml6.mac	ml6menu.mac	ml6n.mac
ml6n_CrBr63m.mac	ml6n_CrCl63m.mac	ml6n_CrF63m.mac	ml6n_CrI63m.mac	ml6n_menu.mac
ml6n_NhCl63m.mac	ml6s.mac	ml6s_CrBr63m.mac	ml6s_CrCl63m.mac	ml6s_CrF63m.mac
ml6s_CrI63m.mac	ml6s_menu.mac	ml6s_NhCl63m.mac	oh16.mac	oh166.mac
oh166menu.mac	oh166n.mac	oh166n_CrCO6.mac	oh166n_menu.mac	oh166n_MoCO6.mac
oh166n_VCO6.mac	oh166n_WCO6.mac	oh166s.mac	oh166s_CrCO6.mac	oh166s_menu.mac
oh166s_MoCO6.mac	oh166s_VCO6.mac	oh166s_WCO6.mac	oh16menu.mac	oh16n.mac
oh16n_IrF6.mac	oh16n_menu.mac	oh16n_MoF6.mac	oh16n_NpF6.mac	oh16n_OsF6.mac
oh16n_PuF6.mac	oh16n_ReF6.mac	oh16n_SeF6.mac	oh16n_SF6.mac	oh16n_TeF6.mac
oh16n_UF6.mac	oh16n_WF6.mac	oh16s.mac	oh16s_IrF6.mac	oh16s_menu.mac
oh16s_MoF6.mac	oh16s_NpF6.mac	oh16s_OsF6.mac	oh16s_PuF6.mac	oh16s_ReF6.mac
oh16s_SeF6.mac	oh16s_SF6.mac	oh16s_TeF6.mac	oh16s_UF6.mac	oh16s_WF6.mac
td14.mac	td144.mac	td144menu.mac	td144n.mac	td144n_menu.mac
td144n_NiCO4.mac	td144s.mac	td144s_menu.mac	td144s_NiCO4.mac	td14menu.mac
td14n.mac	td14n_CBr4.mac	td14n_CC14.mac	td14n_CF4.mac	td14n_CH4.mac
td14n_GeBr4.mac	td14n_GeCl4.mac	td14n_GeH4.mac	td14n_HfCl4.mac	td14n_menu.mac
td14n_OsO4.mac	td14n_RuO4.mac	td14n_SiCl4.mac	td14n_SiF4.mac	td14n_SiH4.mac
td14n_SnCl4.mac	td14n_SnH4.mac	td14n_ThCl4.mac	td14n_ThF4.mac	td14n_TiBr4.mac
td14n_TiCl4.mac	td14n_VCl4.mac	td14n_XeO4.mac	td14n_ZrCl4.mac	td14n_ZrF4.mac
td14s.mac	td14s_CBr4.mac	td14s_CC14.mac	td14s_CF4.mac	td14s_CH4.mac
td14s_GeBr4.mac	td14s_GeCl4.mac	td14s_GeH4.mac	td14s_HfCl4.mac	td14s_menu.mac
td14s_OsO4.mac	td14s_RuO4.mac	td14s_SiCl4.mac	td14s_SiF4.mac	td14s_SiH4.mac
td14s_SnCl4.mac	td14s_SnH4.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

3-6. データファイル (C:\¥dvxa¥data¥*)

a2b2_C2H2.txt	a2b2_Hg2I2.txt	a2_Br2.txt	a2_Cl2.txt	a2_F2.txt
a2_H2.txt	a2_I2.txt	a2_N2.txt	a2_O2.txt	ab2_CO2.txt
ab2_CS2.txt	ab2_HgCl2.txt	ab2_KrF2.txt	ab2_XeF2.txt	abcd_HCNO.txt
abc_BrCN.txt	abc_ClCN.txt	abc_FCN.txt	abc_HCN.txt	ab_CO.txt
ab_HBr.txt	ab_HCl.txt	ab_HF.txt	ab_HI.txt	ab_NO.txt
c2v12	c2v12_Cl2O.txt	c2v12_ClO2.txt	c2v12_GeCl2.txt	c2v12_GeF2.txt
c2v12_H2O.txt	c2v12_H2S.txt	c2v12_NO2.txt	c2v12_O3.txt	c2v12_OF2.txt
c2v12_SC12.txt	c2v12_SeO2.txt	c2v12_SF2.txt	c2v12_SiF2.txt	c2v12_SO2.txt
c3v13	c3v13_AsBr3.txt	c3v13_AsCl3.txt	c3v13_AsF3.txt	c3v13_Ash3.txt
c3v13_AsI3.txt	c3v13_BiBr3.txt	c3v13_BiCl3.txt	c3v13_GdI3.txt	c3v13_LuCl3.txt
c3v13_NC13.txt	c3v13_NF3.txt	c3v13_NH3.txt	c3v13_PBr3.txt	c3v13_PC13.txt

```

c3v13_PF3.txt      c3v13_PH3.txt      c3v13_PrI3.txt      c3v13_SbCl3.txt      c3v13_SbH3.txt
c8v11              c8v111             c8v1111             d2h24                d2h24_C2Cl4.txt
d2h24_C2F4.txt     d2h24_C2H4.txt     d2h24_N2O4s.txt     d2h24_N2O4v.txt     d3d26
d3d26_C2F6.txt     d3d26_C2H6.txt     d3h13              d3h13_BBr3.txt      d3h13_BC13.txt
d3h13_BF3.txt      d3h13_BI3.txt      d4h14              d4h14_AuCl4.txt     d4h14_PdCl4.txt
d4h14_PtCl4.txt     d6h66              d6h66_C6Br6.txt     d6h66_C6Cl6.txt     d6h66_C6F6.txt
d6h66_C6H6.txt     d6h66_C6I6.txt     d8h12              d8h2                 d8h22
mh2o6              mh2o6_CoH2O62p.txt  mh2o6_CoH2O63p.txt  mh2o6_CrH2O62p.txt
mh2o6_CrH2O63p.txt  mh2o6_FeH2O62p.txt  mh2o6_FeH2O63p.txt  mh2o6_MnH2O62p.txt
mh2o6_NiH2O62p.txt  mh2o6_RuH2O63p.txt  mh2o6_TiH2O63p.txt  mh2o6_TiH2O64p.txt
mh2o6_VH2O62p.txt  mh2o6_VH2O63p.txt  mh2o6_ZnH2O62p.txt
ml4_CoBr42m.txt    ml4_CoCl42m.txt     ml4_CoI42m.txt     ml6_CrBr63m.txt     ml6_CrCl63m.txt
ml6_CrF63m.txt     ml6_CrI63m.txt     ml6_NhCl63m.txt    oh16                 oh166
oh166_CrCO6.txt    oh166_MoCO6.txt     oh166_VCO6.txt     oh166_WCO6.txt     oh16_IrF6.txt
oh16_MoF6.txt      oh16_NpF6.txt      oh16_OsF6.txt      oh16_PuF6.txt      oh16_ReF6.txt
oh16_SeF6.txt      oh16_SF6.txt        oh16_TeF6.txt      oh16_UF6.txt        oh16_WF6.txt
td14               td144              td144_NiCO4.txt     td14_CBr4.txt       td14_CC14.txt
td14_CF4.txt       td14_CH4.txt        td14_GeBr4.txt      td14_GeCl4.txt      td14_GeH4.txt
td14_HfCl4.txt     td14_OsO4.txt       td14_RuO4.txt       td14_SiCl4.txt      td14_SiF4.txt
td14_SiH4.txt      td14_SnCl4.txt      td14_SnH4.txt      td14_ThCl4.txt      td14_ThF4.txt
td14_TiBr4.txt     td14_TiCl4.txt      td14_VC14.txt       td14_XeO4.txt       td14_ZrCl4.txt      td14_ZrF4.txt

```

4. 内蔵構造データを利用する場合の変更点

eduDV のデータ自動入力機能「Auto-eduDV」[8]にヘキサクロリドニホニウム酸(III)酸イオン $[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$ の構造データ (表 2) を追加した。

表 2. ヘキサクロリドニホニウム酸(III)酸イオン $[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$ の構造データ

使用プログラム : ml6, ml6n, ml6s	対称軌道 : c:¥dvxa¥data¥oh16
M の原子番号 : 113	M の酸化数 : 3.0
L の原子番号 : 17	L の酸化数 : -1.0
M-L の原子間距離 (Å) : 2.5	

5. 原子番号, 原子間距離, 原子間角度, 酸化数を手入力する場合の変更点

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

プログラム d8h2n を起動し, ノンスピン版の scat で水素分子(H_2)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 に示す. 会話形式で原子番号を 1, 原子間距離を 0.7414 Å と入力した.

```

*** Program D(infinity)h2n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for A2 type Homonuclear Diatomic Molecule (e. g. N2)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom A, Z = ? 1

Input Distance(angstrom), A - A = ? 0.7414

```

図 1. プログラム d8h2n で水素分子(H_2)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, ニホニウム分子(Nh_2)でも計算できる.

5.2. $C_{\infty v}$ 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)

プログラム c8v11n を起動し、ノンスピンの scat で塩化水素分子(HCl)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 2 に示す。会話形式で原子番号を 1 と 17, 原子間距離を 1.2746 Å と入力した。

```
*** Program C(infinity)v11n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for AB type Linear Heteronuclear Diatomic Molecule (e. g. CO)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom B, Z = ? 17
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.2746
```

図 2. プログラム c8v2n で塩化水素分子(HCl)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として異核二原子分子の電子状態を計算できる。

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

プログラム d8h12n を起動し、ノンスピンの scat で二酸化炭素分子(CO_2)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 3 に示す。会話形式で原子番号を 6 と 8, 原子間距離を 1.1600 Å と入力した。

```
*** Program D(infinity)h12n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for AB2 type Linear Triatomic Molecule (e. g. CO2)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.1600
```

図 3. プログラム d8h12n で二酸化炭素分子(CO_2)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 AB_2 (B-A-B) 型分子 ($D_{\infty h}$ 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム d8h22n を起動し、ノンスピンの scat でアセチレン分子($H-C\equiv C-H$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 4 に示す。会話形式で原子番号を 6 と 1, 原子間距離は炭素-炭素間を 1.2024 Å, 炭素-水素間を 1.0625 Å と入力した。


```

*** Program D(infinity)h22n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for A2B2 type Linear Tetraatomic Molecule (e. g. C2H2)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.2024
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0625

```

図4. プログラム d8h22n でアセチレン分子($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 $\text{A}_2\text{B}_2(\text{B}-\text{A}-\text{A}-\text{B})$ 型分子 ($\text{D}_{\infty\text{h}}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.5. $\text{C}_{\infty\text{v}}$ 対称【直線 ABC 型分子】A-B-C 型分子(シアン化水素など)

プログラム c8v111n を起動し、ノンスピンの scat でシアン化水素分子(HCN)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図5に示す。会話形式で原子番号を1, 6, 7, 水素-炭素間距離を1.0650 Å, 炭素-窒素間距離を1.1532 Åと入力した。

```

*** Program C(infinity)v111n (Continuous Group) NON-SPIN version***
*** for ABC type Linear Triatomic Molecule (e. g. HCN)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 7
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0650
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.1532

```

図5. プログラム c8v111n でシアン化水素分子(HCN)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 ABC 型分子 ($\text{C}_{\infty\text{v}}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.6. $\text{C}_{\infty\text{v}}$ 対称【直線 ABCD 型分子】A-B-C-D 型分子(HCNO など)

プログラム c8v1111n を起動し、ノンスピンの scat で HCNO 分子の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図6に示す。会話形式で原子番号を1, 6, 7, 8, 水素-炭素原子間距離を1.027 Å, 炭素

—窒素原子間距離を 1.168 Å, 窒素—酸素原子間距離を 1.199 Å と入力した。

```
*** Program C(infinity)v1111n (Continuous Group) NON-SPIN version***
*** for ABCD type Linear Tetraatomic Molecule (e. g. HCN0)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom C, Z = ? 7
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom D, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.027
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.168
Input Distance(angstrom), C - D = ? 1.199
```

図 6. プログラム c8v1111n で HCN0 分子を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 ABCD 型分子 ($C_{\infty v}$ 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム c2v12n を起動し、ノンスピ版の scat で水分子(H_2O)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 7 に示す。会話形式で原子番号を 8 と 1, 酸素—水素原子間距離を 0.9579 Å, 水素—酸素—水素原子間角度を 104.50° と入力した。

```
*** Program C2v12n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB2 type molecule (e. g. H2O)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 8
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - B = ? 0.9579
Input Angle(degree) ( 0 deg. < Angle < 180 deg.), B-A-B = ? 104.50
```

図 7. プログラム c2v12n で水分子(H_2O)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として折れ

線 AB_2 型分子 (C_{2v} 対称) の電子状態を計算できる.

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

プログラム c3v13n を起動し, ノンスピン版の scat でアンモニア分子(NH_3)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 8 に示す. 会話形式で原子番号を 7 と 1, 窒素-水素原子間距離を 1.012 Å, 水素-窒素-水素原子間角度を 106.7° と入力した.

```
*** Program C3v13n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB3 type molecule (e. g. NH3)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 7
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.012
Input Angle(degree) ( 0 deg.< Angle < 120 deg.), B-A-B = ? 106.7
```

図 8. プログラム c3v13n でアンモニア分子(NH_3)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった. 原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として三角錐 AB_3 型分子 (C_{3v} 対称) の電子状態を計算できる.

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

プログラム d2h24n[6]を起動し, ノンスピン版の scat でエチレン分子($H_2C=CH_2$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 9 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 炭素-炭素原子間距離を 1.339 Å, 炭素-水素原子間距離を 1.087 Å, 水素-炭素-水素原子間角度を 117.4° と入力した.

```
*** Program D2h24 (symOrb NON-SPIN version)
*** for A2B4 type molecule (e. g. C2H4)

Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.339
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.087
Input Angle(degree) ( 0 deg.< Angle < 180 deg.), B-A-B = ? 117.4
```

図 9. プログラム d2h24n でエチレン分子($H_2C=CH_2$)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてエチレン型(A_2B_4 型)分子 (D_{2h} 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム d3d26n[7]を起動し、ノンスピンの scat でエタン分子(C_2H_6) (ねじれ形) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 0 に示す。会話形式で原子番号を 6 と 1, 炭素-炭素原子間距離を 1.5351 Å, 炭素-水素原子間距離を 1.0940 Å, 炭素-炭素-水素原子間角度を 111.17° と入力した。

```
*** Program D3d26 (symOrb NON-SPIN version)
*** for A2B6 type molecule (e. g. C2H6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.5351
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0940
Input Angle(degree) ( 90 deg. < Angle < 180 deg.), A-A-B = ? 111.17
```

図 1 0. プログラム d3d26n でエタン分子(C_2H_6) (ねじれ形配座) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてエタン型 (A_2B_6 型) (ねじれ形配座) 分子 (D_{3d} 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム d3h13n を起動し、ノンスピンの scat で三フッ化ホウ素分子(BF_3)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 1 に示す。会話形式で原子番号を 5 と 9, ホウ素-フッ素原子間距離を 1.3070 Å と入力した。

```
*** Program D3h13n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB3 type Molecule (e. g. BF3)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 5
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 9
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.3070
```

図 1 1. プログラム d3h13n で三フッ化ホウ素分子(BF_3)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として平面正三角形 AB_3 型分子 (D_{3h} 対称) の電子状態を計算できる。

5.12. D_{4h} 対称 【平面正方形型イオン】 AB_4 型錯イオン ($[PtCl_4]^{2-}$ など)

プログラム d4h14n を起動し、ノンスピンの scat でテトラクロリド白金 (II) 酸イオン ($[Pt^{II}Cl_4]^{2-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 2 に示す。会話形式で原子番号を 78, 白金の酸化数を 2, 原子番号を 17, 塩素の酸化数を -1, 白金-塩素原子間距離を 2.308 Å と入力した。

```
*** Program D4h14n (symOrb NON-SPIN version) *** for [AB4]n+ or [AB4]n-
ype Complex Ion (e. g. [PtCl4]2-)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 78
Input Charge (Oxidation Number) of Central Atom A = ? 2
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal atom B, Z = ? 17
Input Charge (Oxidation Number) of Terminal Atom B = ? -1
Input Distance (angstrom), A - B = ? 2.308
```

図 1 2. プログラム d4h14n でテトラクロリド白金 (II) 酸イオン ($[Pt^{II}Cl_4]^{2-}$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として平面正方形 $[AB_4]^{n+/n-}$ 型錯イオン (D_{4h} 対称) の電子状態を計算できる (例えば、テトラクロリドダームスタチウム (II) 酸イオン ($[Ds^{II}Cl_4]^{2-}$) やテトラクロリドレントゲニウム (III) 酸イオン ($[Rg^{III}Cl_4]$) など)。

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

プログラム d6h66n を起動し、ノンスピンの scat でベンゼン分子 (C_6H_6) の電子状態を計算する際の

```
*** Program D6h66n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A6B6 type Molecule (e. g. C6H6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - A = ? 1.399
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.101
```

図 1 3. プログラム d6h66n でベンゼン分子 (C_6H_6) を計算する

マンドプロンプト画面を図 1 3 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 炭素－炭素原子間距離を 1.399 Å, 炭素－水素原子間距離を 1.101 Å と入力した.

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として平面正六角形型 (A_6B_6 型) 分子 (D_{6h} 対称) の電子状態を計算できる.

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

プログラム `td14n` を起動し, ノンスピン版の `scat` でメタン分子(CH_4)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 4 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 原子間距離を 1.0870 Å と入力した.

```
*** Program Td14n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB4 type Molecule (e. g. CH4)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0870
```

図 1 4. プログラム `td14n` でメタン分子(CH_4)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として正四面体型 (AB_4 型) 分子 (T_d 対称) の電子状態を計算できる.

5.15. O_h 対称 【正八面体型分子】 AB_6 型分子(六フッ化硫黄や六フッ化ウランなど)

プログラム `oh16n` を起動し, ノンスピン版の `scat` で六フッ化ウラン分子(UF_6)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 5 に示す. 会話形式で原子番号を 92 と 9, 原子間距離を 1.9962 Å と入力した.

```
*** Program Oh16n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB6 type molecule (e. g. SF6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of central atom A, Z = ? 92
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of terminal atom B, Z = ? 9
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.9962
```

図 1 5. プログラム `oh16n` で六フッ化ウラン分子(UF_6)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 (AB_6 型) 分子 (O_h 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム `td144n` を起動し、ノンスピンの版の `scat` でテトラカルボニルニッケル錯体分子 ($[Ni(CO)_4]$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 6 に示す。会話形式で原子番号を 28, 6, 8, ニッケル-炭素原子間距離を 1.838 Å, 炭素-酸素原子間距離を 1.141 Å と入力した。

```
*** Program Td144n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A(BC)4 type Molecule (e. g. Ni(CO)4)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 28
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Middle Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.838
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.141
```

図 1 6. プログラム `td144n` でテトラカルボニルニッケル錯体分子 ($[Ni(CO)_4]$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正四面体型 $A(BC)_4$ 型分子 (T_d 対称) の電子状態を計算できる。

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

```
*** Program Oh166n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A(BC)6 type Molecule (e. g. Cr(CO)6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 24
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Middle Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.92
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.16
```

図 1 7. プログラム `oh166n` でヘキサカルボニルクロム錯体分子 ($[Cr(CO)_6]$) を計算する

プログラム oh166n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサカルボニルクロム錯体分子($[\text{Cr}(\text{CO})_6]$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 7 に示す。会話形式で原子番号を 24, 6, 8, クロム-炭素原子間距離を 1.92 Å, 炭素-酸素原子間距離を 1.16 Å と入力した。

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 $\text{A}(\text{BC})_6$ 型分子 (O_h 対称) の電子状態を計算できる。

5.18. D_{2h} 対称 【正八面体型イオン】 $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{n+}$ アクア錯イオン

プログラム mh2o6n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサアクア亜鉛 (II) イオン ($[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 8 に示す。会話形式で原子番号を 30, 亜鉛-酸素原子間距離を 2.097 Å, 亜鉛の酸化数を 2 と入力した。

```
*** Program MH206n (symOrb NON-SPIN version) *** for [M(H2O)6]n+ type Aqua Complex Cation
*** Bond Distance (angstrom) O-H = 0.9579
*** Bond Angle (degree) H-O-H = 104.50
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Metal Atom M, Z = ? 30
Input Distance(angstrom), M - O (OH2) = ? 2.097
Input Oxidation Number of Metal Atom, [M(H2O)6]n+, n = ? 2
```

図 1 8. プログラム mh2o6n でヘキサアクア亜鉛 (II) イオン ($[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてヘキサアクア金属錯陽イオン ($[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{n+}$) (D_{2h} 対称) の電子状態を計算できる。

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

```
*** Program ML4n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML4]n+ or [ML4]n- type Complex Ion
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 27
Input Charge(Oxidation Number) of Central Atom M = ? 2
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 17
Input Charge(Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance(angstrom), M - L = ? 2.254
```

図 1 9. プログラム ml4n でテトラクロリドコバルト (II) 酸イオン ($[\text{Co}^{\text{II}}\text{Cl}_4]^{2-}$) を計算する

プログラム ml4n を起動し、ノンスピンの scat でテトラクロリドコバルト (II) 酸イオン ($[\text{Co}^{\text{II}}\text{Cl}_4]^{2-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 9 に示す。会話形式で原子番号を 27, コバルトの酸化数を 2, 原子番号を 17, 塩素の酸化数を -1, コバルト-塩素原子間距離を 2.254 Å と入力した。

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正四面体型 (ML₄ 型) 錯イオン (M = 金属イオン, L = 配位子) (T_d 対称) の電子状態を計算できる。

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

プログラム ml6n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサヨージドクロム (III) 酸イオン ($[\text{Cr}^{\text{III}}\text{I}_6]^{3-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 2 0 に示す。会話形式で原子番号を 24, クロムの酸化数を 3, 原子番号を 53, ヨウ素の酸化数を -1, クロム-ヨウ素原子間距離を 2.782 Å と入力した。

```
*** Program ML6n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML6]n+ or [ML6]n- type Complex Ion

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 24
Input Charge(Oxidation Number) of Central Atom M = ? 3
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 53
Input Charge(Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance(angstrom), M - L = ? 2.782
```

図 2 0. プログラム ml6n でヘキサヨージドクロム (III) 酸イオン ($[\text{Cr}^{\text{III}}\text{I}_6]^{3-}$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 (ML₆ 型) 錯イオン (M = 金属イオン, L = 配位子) (O_h 対称) の電子状態を計算できる。

6. 計算例

プログラム ml6n でヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン ($[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$) の電子状態を計算した。MSCF= SCFS[20], ニホニウム原子の使用原子軌道 (基底関数) は 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p, 6d, 7s, 7p, 塩素原子の使用原子軌道 (基底関数) は 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, サンプル点数は 20000 点, 原子軌道数は 25, 全電子数は 218 である。ニホニウムイオン, 塩化物イオンの初期電子配置[9]は $_{113}\text{Nh}^{3+}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^{10} 7s^0 7p^0$, $_{17}\text{Cl}^-$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^0$ とした。

DV-X α 法のための統合支援環境[4, 30]で, 上方ツールバーの右端の[eduDV]ボタンを押し, 現れたプルダウンメニューの[20. O_h 対称 【正八面体型イオン】 $[\text{M}(\text{L})_6]^{n+}$ or $[\text{M}(\text{L})_6]^{n-}$ 錯イオン...]を選び (図 2 1), ノンスピン版の ml6n を起動した (図 2 2)。

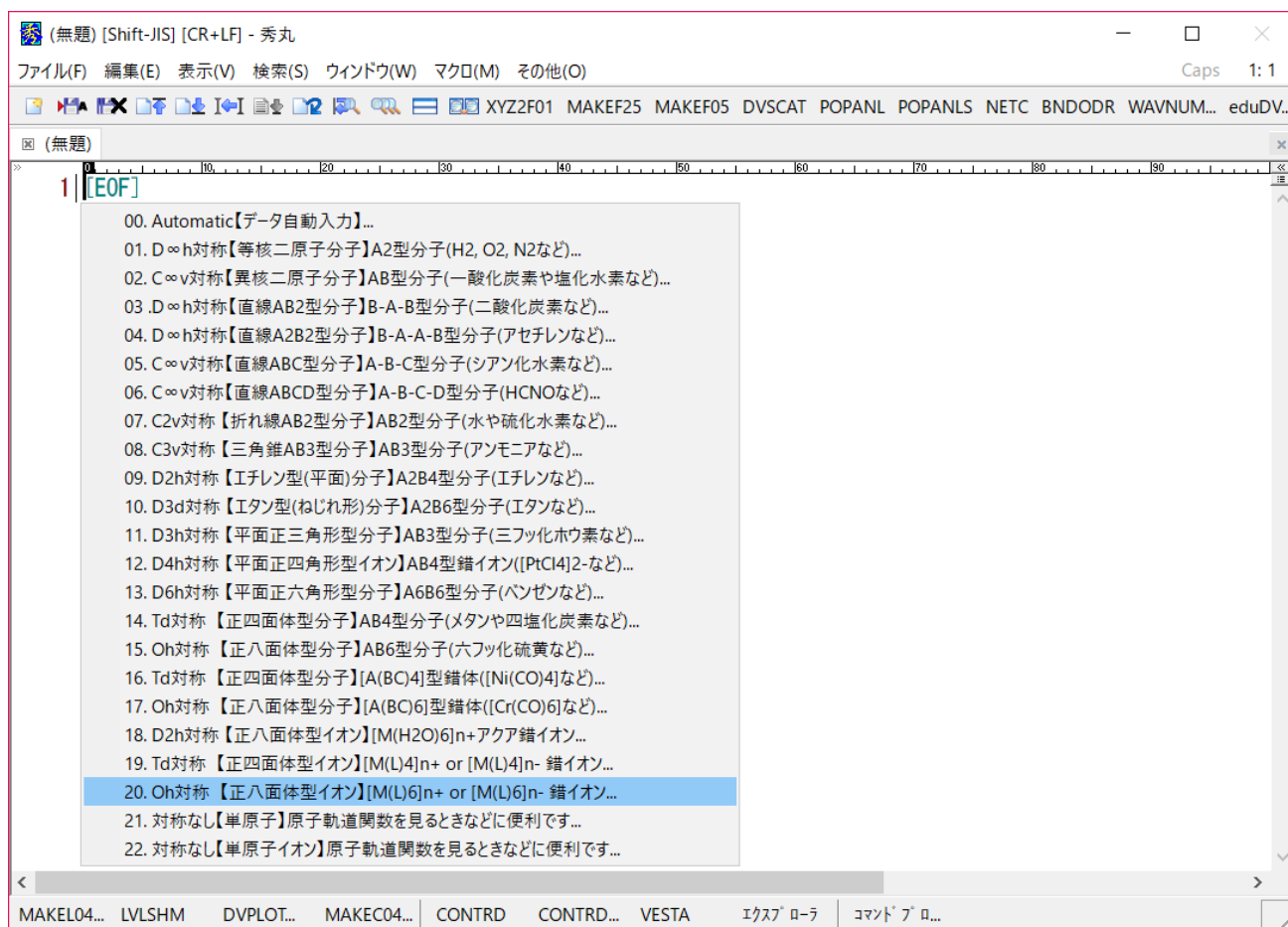
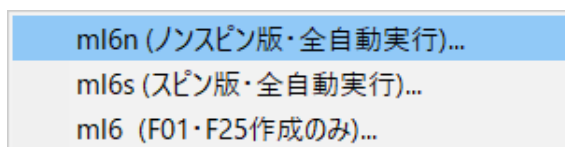
図 2 1. [20. Oh 対称【正八面体型イオン】[M(L)₆]ⁿ⁺ or [M(L)₆]ⁿ⁻ 錯イオン...] を選択する

図 2 2. ノンスピ版 ml6n を起動する

```

*** Program ML6n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML6]n+ or [ML6]n- type Complex Ion

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 113
Input Charge(Oxidation Number) of Central Atom M = ? 3
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 17
Input Charge(Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance(angstrom), M - L = ? 2.5

```

図 2 3. プログラム ml6n でヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン([Nh^{III}Cl₆]³⁻)を計算する

コマンドプロンプト画面にて、会話形式で原子番号を 113, ニホニウムの酸化数を 3, 原子番号を 17, 塩素の酸化数を-1, ニホニウム-塩素原子間距離を 2.5 Åと入力した (図 2 3). 自動作成された F01 を 図 2 4 に示す.

Z	NEQ	X	Y	Z	↓
113	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
17	2	2.50000	0.00000	0.00000	↓
17	2	-2.50000	0.00000	0.00000	↓
17	2	0.00000	2.50000	0.00000	↓
17	2	0.00000	-2.50000	0.00000	↓
17	2	0.00000	0.00000	2.50000	↓
17	2	0.00000	0.00000	-2.50000	↓
↓					
NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1 ↓
1	3.00000				↓
2	-1.00000				↓
↓					
0	Unit	(0:angstrom	1:atomic)		↓
0	Spin	(0:non-spin	1:spin		↓
0	M. P.	(0:No	1:Yes		↓
20000	Sample Point	(<100000, =0 autose) ↓			

図 2 4. ヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン([Nh^{III}Cl₆)³⁻)の F01

自動実行されたプログラム BNDODR の出力ファイル bn8 (図 2 5) を見ると, マリケンの電子密度解析で求めたニホニウム-塩素間の有効共有結合電荷[32]は 0.288 であった ((1.3422 + 0.3881) ÷ 6 = 0.288).

BOND OVERLAP POPULATION BETWEEN ATOMS ↓							
	(1 Nh)	(2 Cl)	(3 Cl)	(4 Cl)	(5 Cl)	(6 Cl)	(7 Cl) (↓)
(1)	111.5017↓						
(2)	1.3422	57.4458↓					
(3)	0.0000	0.0000	0.0000↓				
(4)	0.3881	0.1540	0.0000	47.1682↓			
(5)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000↓		
(6)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000↓	
(7)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000↓

図 2 5. 有効共有結合電荷(Overlap Population)

同様に自動実行されたプログラム NETC の出力ファイル i08 (図 2 6) を見ると, マリケンの電子密度解析で求めたニホニウムおよび塩素の正味の電荷[32]はそれぞれ, Nh: +0.633, Cl: -0.606 であった.

EFFECTIVE CHARGE ↓			
LO			NET CHARGE↓
1	Nh	112.36686	0.63314↓
2	Cl	17.60552	-0.60552↓

図 2 6. 正味の電荷(Net Charge)

プログラム MAKEC04D で c04d を作成し (図 2 7), プログラム CONTRD を実行して HOMO($9e_g$)および LUMO($12a_{1g}$)の波動関数ボックスデータファイルを作成した. VESTA[28, 29]で描いた HOMO($9e_g$)を図 2 8 に, LUMO($12a_{1g}$)を図 2 9 に示す.

プログラム MAKED04 で d04, d05 を作成し, プログラム DOS を実行して描いた状態密度曲線を図 3 0 に示す.

251	251	251↓	
20.00000	20.00000	20.00000↓	
0.00000	0.00000	0.00000↓	
3	23	34	12↓
↓			
HOMO:	10.5202 eV	[23] [34]↓	
LUMO:	16.9842 eV	[12]↓	

図 2 7. CONTRD の入力ファイル c04d

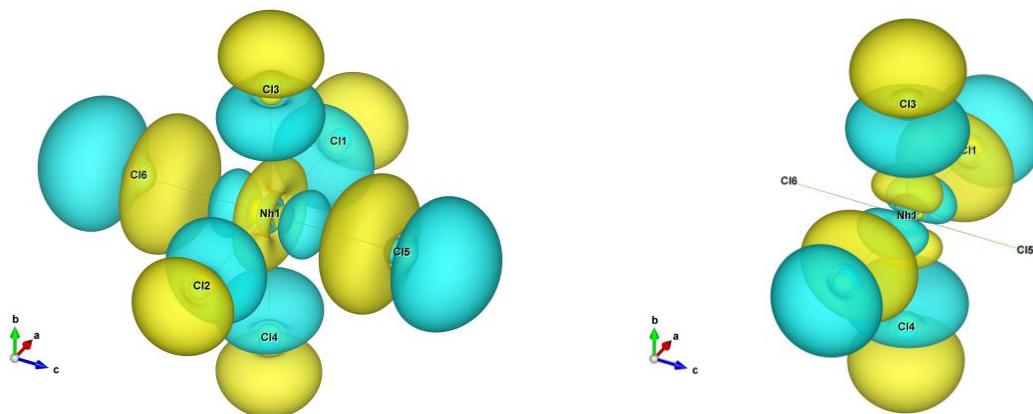


図 2 8. HOMO($9e_g$)の等値表面図

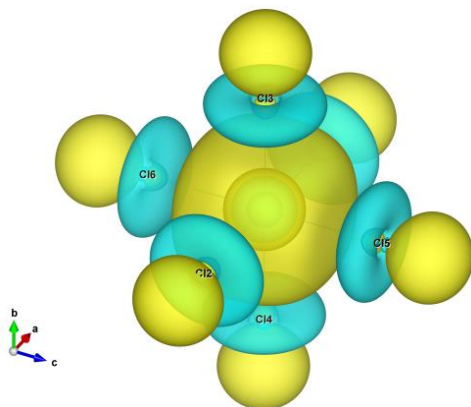


図 2 9. LUMO($12a_{1g}$)の等値表面図

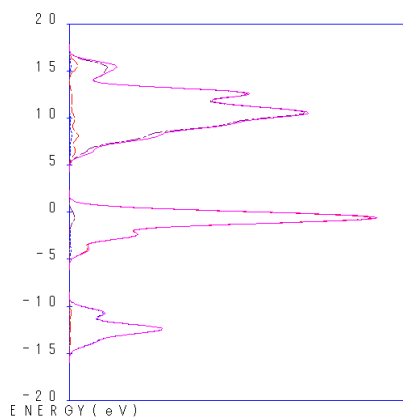


図 3 0. 状態密度曲線

7. まとめ

eduDV に含まれる 60 個のプログラムで, 原子番号 95 番のアメリシウム($_{95}\text{Am}$)から 118 番のオガネソン($_{118}\text{Og}$)まで計算できるようになった. これにより教育用分子軌道計算システム eduDV は, 全プログラム (84 個)が周期表全元素 (原子番号 118 番まで) に対応できた.

eduDV を含む DV-X α 法のための統合支援環境[4, 30]は本学情報処理センターのコンピュータ実習室の

すべてのパソコンにインストールしてあり、筆者の担当する講義科目「現代人の科学 D（コンピュータで理解する周期表の世界）」（理学部・工学部・総合情報学部・生物地球学部・経営学部対象）および「錯体化学Ⅱ」（大学院理学研究科化学専攻対象）で教材として活用している。小さすぎて実感することが困難な量子化学の世界を DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 30]は、メニューから原子・分子を選択したり、計算に必要な最低限の数字（原子番号、酸化数、原子間距離、原子間角度）を入力するだけで、計算して三次元可視化できる。周期表の全元素を同じ精度で取り扱えるのも DV- $X\alpha$ 法の特長の一つである。

2016 年に原子番号 113 番元素ニホニウム(Nh, Nihonium), 115 番元素モスコビウム(Mc, Moscovium), 117 番元素テネシン(Ts, Tennessine), 118 番元素オガネソン(Og, Oganesson)の元素名が正式に決定し、周期表は第 7 周期まですべての枠が元素で埋まった。日本で発見されたニホニウムも含んで、周期表のどの元素でも自由に計算できる楽しさは、受講生の好奇心を刺激することに成功している。

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”, 7th 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, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (4)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, 34, 1-37 (2013).
- [9] 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (5)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, 35, 1-32 (2014).
- [10] 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (6)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, 36, 1-18 (2015).
- [11] 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (7)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, 37, 1-16 (2016).
- [12] 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>
- [13] 坂根弦太, “はじめての DV- $X\alpha$ 法分子軌道計算支援環境ータブエディタ (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ー”, 1-176 (2014),

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

- [14] 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
- [15] 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).
- [16] 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.
- [17] 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 $[\text{Mo}_3\text{X}_4(\text{H}_2\text{O})_9]^{4+}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{S}$) 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).
- [18] 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 $[\text{Mo}_3\text{MS}_4(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{4+}$ ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Ni}$) 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).
- [19] 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 $[\text{Mo}_4\text{S}_4(\text{H}_2\text{O})_{12}]^{n+}$ ($n = 4, 5, 6$) 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).
- [20] 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).
- [21] 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.
- [22] 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).
- [23] 坂根弦太, “DV- $X\alpha$ 法による $[\text{MoCl}_6]^{3-}$ 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).
- [24] 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.
- [25] “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■”,
ダウンロード・ページ, GUI 版 dvscat プログラム(Windows 専用), Version 2.02,
http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/dvxa_assistance_environment_2.html
- [26] 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>
- [27] 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
- [28] 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>
- [29] 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
- [30] 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.
- [31] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>
- [32] 足立裕彦, “量子材料化学の基礎”, 三共出版 2017 年.