

対称軌道作成プログラム symOrb による F25 の改定

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[5-9], 最新版のプログラム一式[10]とマニュアル[11], および論文[12]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[1-12], DV- $X\alpha$ 法[13-23], 秀丸エディタ[24], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[25], VESTA[26, 27]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.

これまで教育用分子軌道計算システム eduDV では, 取り扱える基底関数(原子軌道)は方位量子数 $l=0$ (s 軌道), $l=1$ (p 軌道), $l=2$ (d 軌道), $l=3$ (f 軌道)までであったが, 今回, $l=4$ (g 軌道), $l=5$ (h 軌道)を追加し, 5g 軌道, 6h 軌道などを取り扱えるようになったので報告する.

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 8.1, 64-bit) に Open Watcom Fortran77 compiler (V2)[28]をインストールした環境を用いた.

3. 対称軌道ファイル F25

分子軌道は原子軌道の線形結合で表せるが, 分子の形状に对称性がある場合は, 予め原子軌道を対称性に基づいて線形結合させて対称軌道を作成しておく, 計算時間が短縮され, 計算結果の理解が容易になる. 対称軌道は球面調和関数の線形結合で記述しており, 方位量子数と磁気量子数の情報を含むが, 主量子数の情報は含まない. DV- $X\alpha$ 法では F25 という名前のファイルに対称軌道を記述しておく.

eduDV では, 対称軌道作成プログラム symOrb[22]で出力した F25 を使用している. これまでは方位量子数 $l=0$ (s 軌道), $l=1$ (p 軌道), $l=2$ (d 軌道), $l=3$ (f 軌道)の球面調和関数で記述しており, 基底関数として 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p, 6d, 7s, 7p 原子軌道を使用することができた. 具体的には, 対称軌道を用いる分子軌道計算で, 原子番号 1 番の水素(H)原子から 94 番のプルトニウム(Pu)原子までを計算に含むことができた.

しかし昨年度, DV- $X\alpha$ 法の原子軌道設定ファイル nonrel を編集することにより, DV- $X\alpha$ 法では原子番号 172 番のウンセプトビウム(Usb)まで, 周期表の全元素が取り扱えるようになった[9]. 例えば, 原子番

号 172 番のウンセプトビウム(Usb)原子は, nonrel では $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 5g^{18} 6s^2 6p^6 6d^{10} 6f^{14} 7s^2 7p^6 7d^{10} 8s^2 8p^6 9s^2 9p^2$ という初期電子配置を設定しており (初期電子配置は, 手作業により如何様にも変更可能), 方位量子数 $l=4$ の g 軌道を使用する. nonrel の設定 (基底状態の電子配置) で 5g 軌道を使用している元素 (ウンビウニウム(^{121}Ubu)~ウンセプトビウム(^{172}Usb)) を計算に用いる場合, 現在の eduDV では対称軌道が使えない (対称軌道を使用しない分子軌道計算は可能).

そこで今年度は, 対称軌道作成プログラム symOrb[22]を用いて $l=4$ (g 軌道), $l=5$ (h 軌道)の球面調和関数も F25 に書き出すことにより, eduDV における分子軌道計算で使用している多くの対称軌道ファイル F25 を更新した. その結果, eduDV で 5g 軌道, 6g 軌道, 6h 軌道などを含む元素を用いる場合でも, 対称性を考慮して分子軌道を計算できるようになった. ただし, 対称軌道作成プログラム symOrb[22]が対応していない点群, $C_{\infty v}$ 対称および $D_{\infty h}$ 対称の F25 は, 方位量子数 $l=0$ (s 軌道), $l=1$ (p 軌道), $l=2$ (d 軌道), $l=3$ (f 軌道)までしか書き込んでおらず, $l=4$ (g 軌道), $l=5$ (h 軌道)には対応していない.

4. g 軌道および h 軌道

方位量子数 $l=4$ の g 軌道 (球面調和関数) は, 磁気量子数 $m=4, 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4$ の 9 種類が存在する. 主量子数 $n=6$ のウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道を図 1-1~図 1-9 に示す.

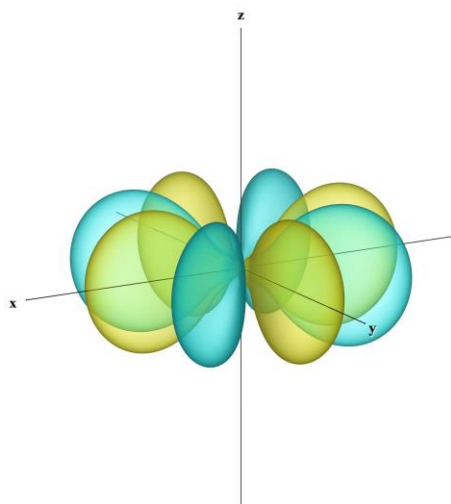


図 1-1. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n=5, l=4, m=4$)

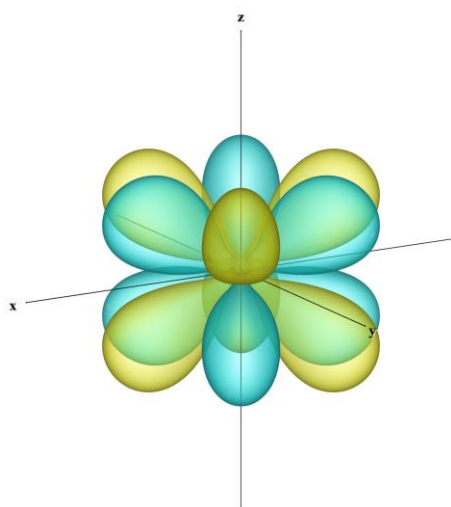


図 1-2. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n=5, l=4, m=3$)

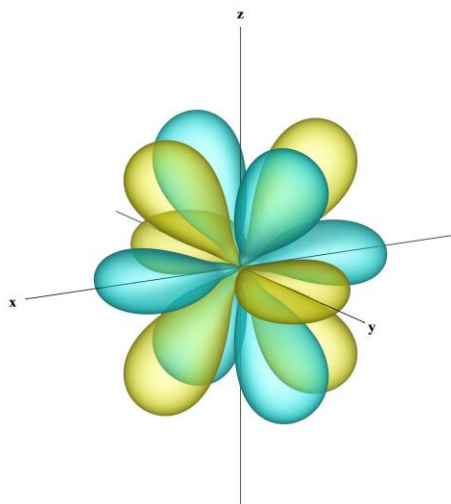


図 1 -3. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = 2$)

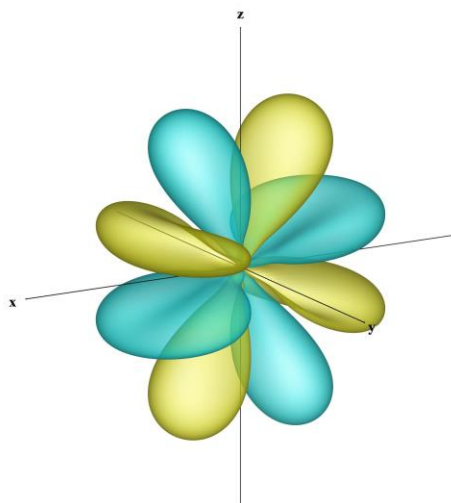


図 1 -4. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = 1$)

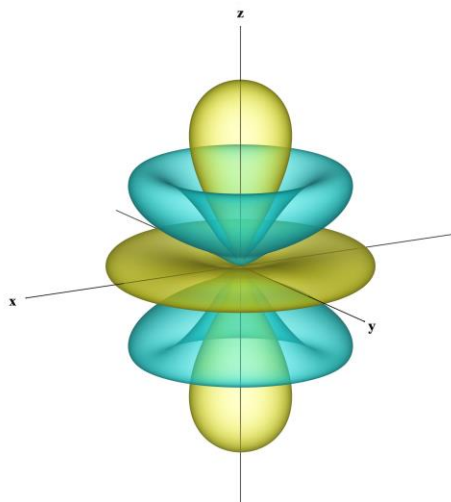


図 1 -5. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = 0$)

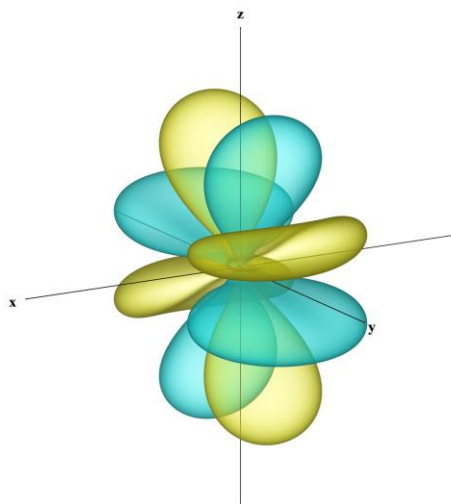


図 1 -6. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = -1$)

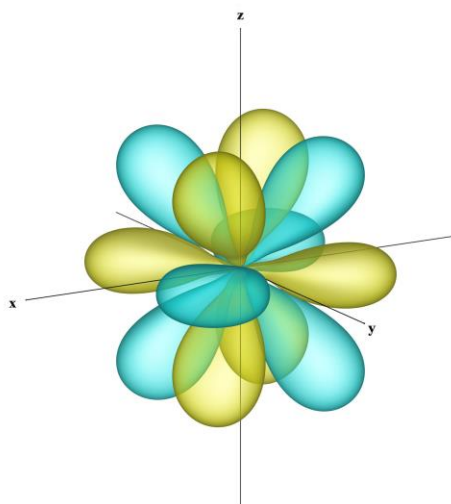


図 1 -7. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = -2$)

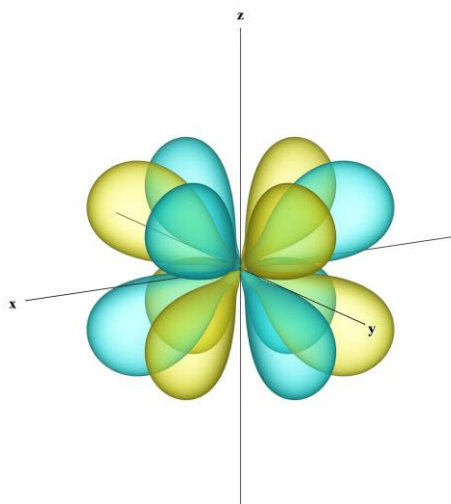


図 1 -8. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = -3$)

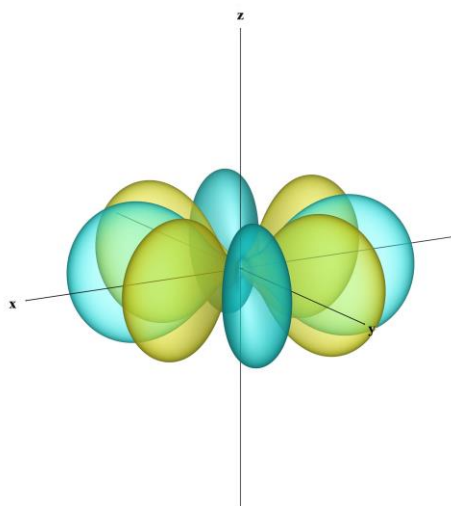


図 1 -9. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 5g 軌道($n = 5, l = 4, m = -4$)

方位量子数 $l = 5$ の h 軌道（球面調和関数）は，磁気量子数 $m = 5, 4, 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4, -5$ の 11 種類が存在する．主量子数 $n = 6$ のウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道を図 2 -1～図 2 -11 に示す．

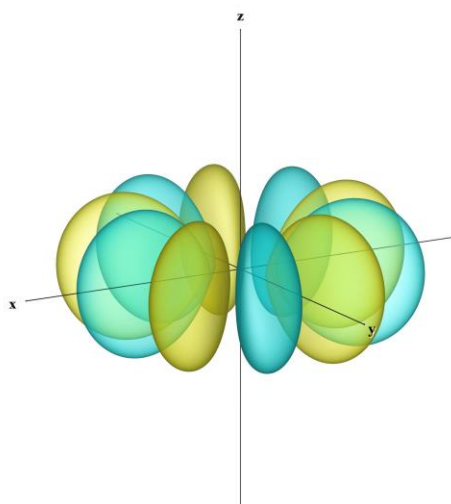


図 2 -1. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 5$)

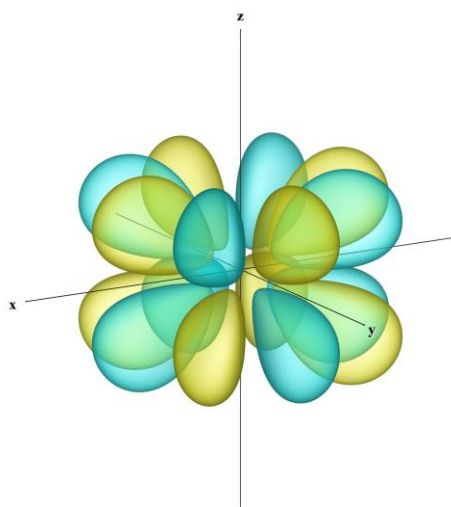


図 2 -2. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 4$)

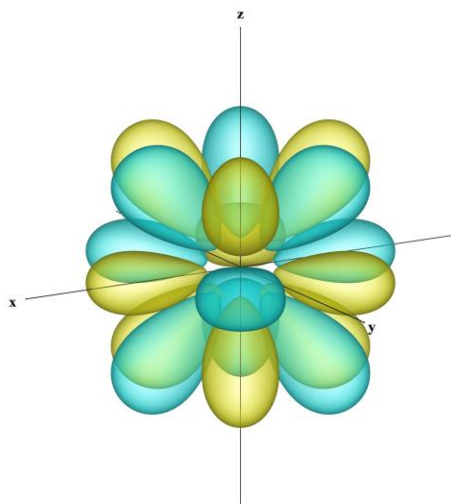


図 2 -3. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 3$)

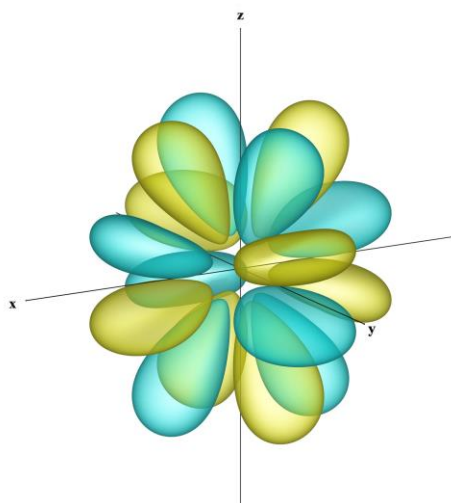


図 2 -4. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 2$)

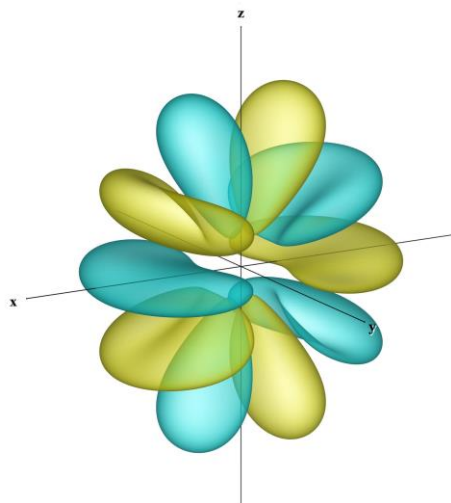


図 2 -5. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 1$)

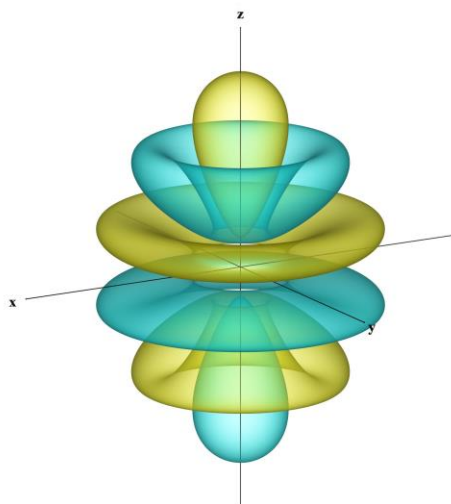


図 2 -6. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = 0$)

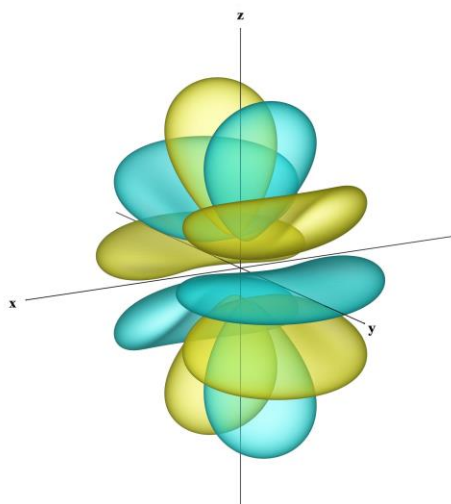


図 2 -7. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = -1$)

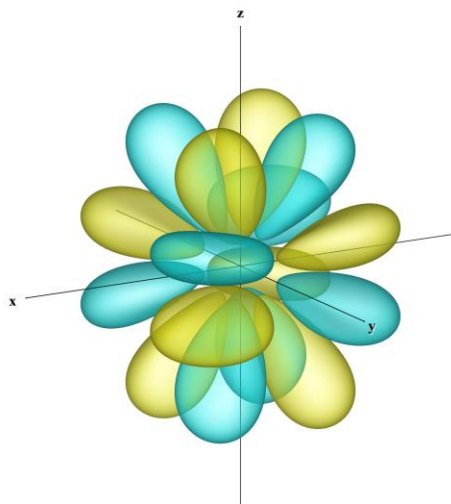


図 2 -8. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n = 6, l = 5, m = -2$)

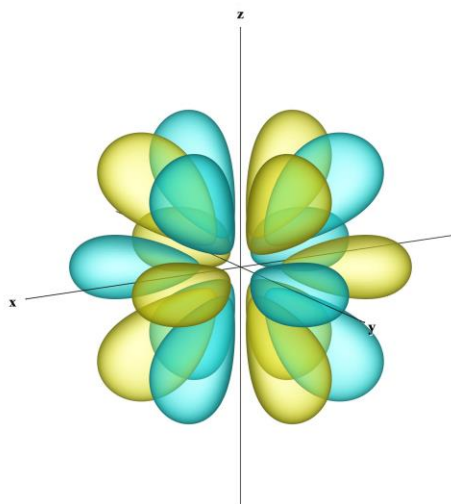


図 2 -9. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n=6, l=5, m=-3$)

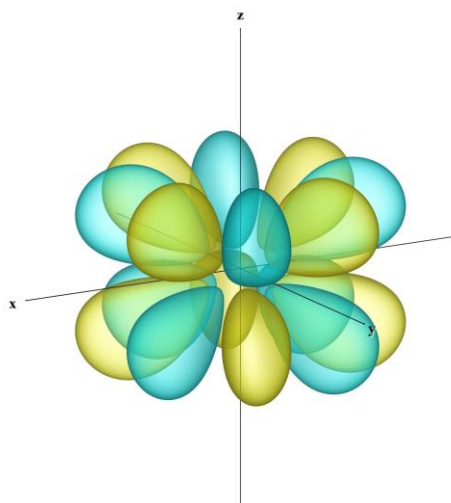


図 2 -10. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n=6, l=5, m=-4$)

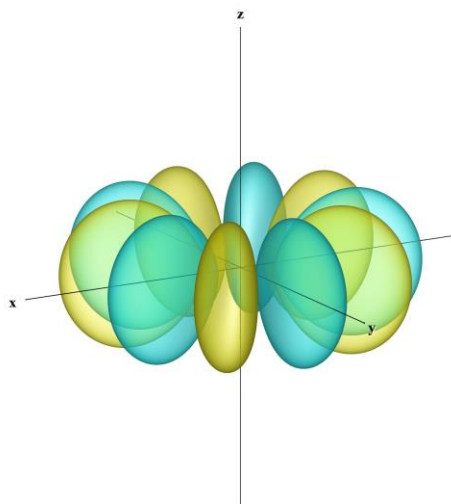


図 2 -11. DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で可視化したウンウンオクチウム(Uuo)の 6h 軌道($n=6, l=5, m=-5$)

5. g 軌道および h 軌道の情報を書き加えた対称軌道

プログラム C3v13(C_{3v} 対称)で使用する F25 を以下に示す.

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8									
30	a1	/z	C3v						
0	1	1							
0	1	6.000000							
1	1	1							
0	1	6.000000							
2	1	1							
0	1	6.000000							
3	1	1							
3	1	6.000000							
3	1	1							
0	1	6.000000							
4	1	1							
3	1	6.000000							
4	1	1							
0	1	6.000000							
5	1	1							
3	1	6.000000							
5	1	1							
0	1	6.000000							
0	3	1							
0	2	2.000000		0	3	2.000000	0	4	2.000000
1	5	1							
1	2	2.000000		1	3	-1.000000	-1	3	1.732051
-1	4	-1.732051						1	4
1	3	1							
0	2	2.000000		0	3	2.000000	0	4	2.000000
2	5	1							
2	2	2.000000		2	3	-1.000000	-2	3	-1.732051
-2	4	1.732051						2	4
2	5	1							
1	2	2.000000		1	3	-1.000000	-1	3	1.732051
-1	4	-1.732051						1	4
2	3	1							
0	2	2.000000		0	3	2.000000	0	4	2.000000
3	3	1							
3	2	2.000000		3	3	2.000000	3	4	2.000000
3	5	1							
2	2	2.000000		2	3	-1.000000	-2	3	-1.732051
-2	4	1.732051						2	4
3	5	1							
1	2	2.000000		1	3	-1.000000	-1	3	1.732051
-1	4	-1.732051						1	4
3	3	1							
0	2	2.000000		0	3	2.000000	0	4	2.000000
4	5	1							
4	2	2.000000		4	3	-1.000000	-4	3	1.732051
-4	4	-1.732051						4	4
4	3	1							
3	2	2.000000		3	3	2.000000	3	4	2.000000
4	5	1							
2	2	2.000000		2	3	-1.000000	-2	3	-1.732051
-2	4	1.732051						2	4
4	5	1							
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8									

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8											
1	2	2.000000	1	3	-1.000000	-1	3	1.732051	1	4	-1.000000
-1	4	-1.732051									
4	3	1									
0	2	2.000000	0	3	2.000000	0	4	2.000000			
5	5	1									
5	2	2.000000	5	3	-1.000000	-5	3	1.732051	5	4	-1.000000
-5	4	-1.732051									
5	5	1									
4	2	2.000000	4	3	-1.000000	-4	3	1.732051	4	4	-1.000000
-4	4	-1.732051									
5	3	1									
3	2	2.000000	3	3	2.000000	3	4	2.000000			
5	5	1									
2	2	2.000000	2	3	-1.000000	-2	3	-1.732051	2	4	-1.000000
-2	4	1.732051									
5	5	1									
1	2	2.000000	1	3	-1.000000	-1	3	1.732051	1	4	-1.000000
-1	4	-1.732051									
5	3	1									
0	2	2.000000	0	3	2.000000	0	4	2.000000			
18 a2											
3	1	1									
-3	1	6.000000									
4	1	1									
-3	1	6.000000									
5	1	1									
-3	1	6.000000									
1	5	1									
-1	2	2.000000	1	3	-1.732051	-1	3	-1.000000	1	4	1.732051
-1	4	-1.000000									
2	5	1									
-1	2	2.000000	1	3	-1.732051	-1	3	-1.000000	1	4	1.732051
-1	4	-1.000000									
2	5	1									
-2	2	2.000000	2	3	1.732051	-2	3	-1.000000	2	4	-1.732051
-2	4	-1.000000									
3	5	1									
-1	2	2.000000	1	3	-1.732051	-1	3	-1.000000	1	4	1.732051
-1	4	-1.000000									
3	5	1									
-2	2	2.000000	2	3	1.732051	-2	3	-1.000000	2	4	-1.732051
-2	4	-1.000000									
3	3	1									
-3	2	2.000000	-3	3	2.000000	-3	4	2.000000			
4	5	1									
-1	2	2.000000	1	3	-1.732051	-1	3	-1.000000	1	4	1.732051
-1	4	-1.000000									
4	5	1									
-2	2	2.000000	2	3	1.732051	-2	3	-1.000000	2	4	-1.732051
-2	4	-1.000000									
4	3	1									
-3	2	2.000000	-3	3	2.000000	-3	4	2.000000			
4	5	1									
-4	2	2.000000	4	3	-1.732051	-4	3	-1.000000	4	4	1.732051
-4	4	-1.000000									
5	5	1									
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8											

	1	2	3	4	5	6	7	8			
-1	2	2.000000	1	3	-1.732051	-1	3	-1.000000	1	4	1.732051
-1	4	-1.000000									
5	5	1									
-2	2	2.000000	2	3	1.732051	-2	3	-1.000000	2	4	-1.732051
-2	4	-1.000000									
5	3	1									
-3	2	2.000000	-3	3	2.000000	-3	4	2.000000			
5	5	1									
-4	2	2.000000	4	3	-1.732051	-4	3	-1.000000	4	4	1.732051
-4	4	-1.000000									
5	5	1									
-5	2	2.000000	5	3	-1.732051	-5	3	-1.000000	5	4	1.732051
-5	4	-1.000000									
48 e	/x										
1	1	1									
1	1	6.000000									
2	1	1									
2	1	6.000000									
2	1	1									
1	1	6.000000									
3	1	1									
2	1	6.000000									
3	1	1									
1	1	6.000000									
4	1	1									
4	1	6.000000									
4	1	1									
2	1	6.000000									
4	1	1									
1	1	6.000000									
5	1	1									
5	1	6.000000									
5	1	1									
4	1	6.000000									
5	1	1									
2	1	6.000000									
5	1	1									
1	1	6.000000									
0	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
1	5	1									
1	2	4.000000	1	3	1.000000	-1	3	-1.732051	1	4	1.000000
-1	4	1.732051									
1	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
1	4	1									
1	3	3.000000	-1	3	1.732051	1	4	3.000000	-1	4	-1.732051
2	5	1									
2	2	4.000000	2	3	1.000000	-2	3	1.732051	2	4	1.000000
-2	4	-1.732051									
2	5	1									
1	2	4.000000	1	3	1.000000	-1	3	-1.732051	1	4	1.000000
-1	4	1.732051									
2	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
2	4	1									

	1	2	3	4	5	6	7	8			
1	3	3.000000	-1	3	1.732051	1	4	3.000000	-1	4	-1.732051
2	4	1									
2	3	-3.000000	-2	3	1.732051	2	4	-3.000000	-2	4	-1.732051
3	3	1									
3	2	4.000000	3	3	-2.000000	3	4	-2.000000			
3	5	1									
2	2	4.000000	2	3	1.000000	-2	3	1.732051	2	4	1.000000
-2	4	-1.732051									
3	5	1									
1	2	4.000000	1	3	1.000000	-1	3	-1.732051	1	4	1.000000
-1	4	1.732051									
3	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
3	4	1									
1	3	3.000000	-1	3	1.732051	1	4	3.000000	-1	4	-1.732051
3	4	1									
2	3	-3.000000	-2	3	1.732051	2	4	-3.000000	-2	4	-1.732051
3	2	1									
-3	3	-3.464102	-3	4	3.464102						
4	5	1									
4	2	4.000000	4	3	1.000000	-4	3	-1.732051	4	4	1.000000
-4	4	1.732051									
4	3	1									
3	2	4.000000	3	3	-2.000000	3	4	-2.000000			
4	5	1									
2	2	4.000000	2	3	1.000000	-2	3	1.732051	2	4	1.000000
-2	4	-1.732051									
4	5	1									
1	2	4.000000	1	3	1.000000	-1	3	-1.732051	1	4	1.000000
-1	4	1.732051									
4	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
4	4	1									
1	3	3.000000	-1	3	1.732051	1	4	3.000000	-1	4	-1.732051
4	4	1									
2	3	-3.000000	-2	3	1.732051	2	4	-3.000000	-2	4	-1.732051
4	2	1									
-3	3	-3.464102	-3	4	3.464102						
4	4	1									
4	3	3.000000	-4	3	1.732051	4	4	3.000000	-4	4	-1.732051
5	5	1									
5	2	4.000000	5	3	1.000000	-5	3	-1.732051	5	4	1.000000
-5	4	1.732051									
5	5	1									
4	2	4.000000	4	3	1.000000	-4	3	-1.732051	4	4	1.000000
-4	4	1.732051									
5	3	1									
3	2	4.000000	3	3	-2.000000	3	4	-2.000000			
5	5	1									
2	2	4.000000	2	3	1.000000	-2	3	1.732051	2	4	1.000000
-2	4	-1.732051									
5	5	1									
1	2	4.000000	1	3	1.000000	-1	3	-1.732051	1	4	1.000000
-1	4	1.732051									
5	3	1									
0	2	4.000000	0	3	-2.000000	0	4	-2.000000			
	1	2	3	4	5	6	7	8			

	1	2	3	4	5	6	7	8			
5	4	1									
1	3	3.000000	-1	3	1.732051	1	4	3.000000	-1	4	-1.732051
5	4	1									
2	3	-3.000000	-2	3	1.732051	2	4	-3.000000	-2	4	-1.732051
5	2	1									
-3	3	-3.464102	-3	4	3.464102						
5	4	1									
4	3	3.000000	-4	3	1.732051	4	4	3.000000	-4	4	-1.732051
5	4	1									
5	3	3.000000	-5	3	1.732051	5	4	3.000000	-5	4	-1.732051
48 e	/y										
1	1	1									
-1	1	6.000000									
2	1	1									
-2	1	-6.000000									
2	1	1									
-1	1	6.000000									
3	1	1									
-2	1	-6.000000									
3	1	1									
-1	1	6.000000									
4	1	1									
-4	1	6.000000									
4	1	1									
-2	1	-6.000000									
4	1	1									
-1	1	6.000000									
5	1	1									
-5	1	6.000000									
5	1	1									
-4	1	6.000000									
5	1	1									
-2	1	-6.000000									
5	1	1									
-1	1	6.000000									
0	2	1									
0	3	3.464102	0	4	-3.464102						
1	4	1									
1	3	-1.732051	-1	3	3.000000	1	4	1.732051	-1	4	3.000000
1	2	1									
0	3	3.464102	0	4	-3.464102						
1	5	1									
-1	2	4.000000	1	3	1.732051	-1	3	1.000000	1	4	-1.732051
-1	4	1.000000									
2	4	1									
2	3	-1.732051	-2	3	-3.000000	2	4	1.732051	-2	4	-3.000000
2	4	1									
1	3	-1.732051	-1	3	3.000000	1	4	1.732051	-1	4	3.000000
2	2	1									
0	3	3.464102	0	4	-3.464102						
2	5	1									
-1	2	4.000000	1	3	1.732051	-1	3	1.000000	1	4	-1.732051
-1	4	1.000000									
2	5	1									
-2	2	4.000000	2	3	-1.732051	-2	3	1.000000	2	4	1.732051
-2	4	1.000000									
	1	2	3	4	5	6	7	8			

	1	2	3	4	5	6	7	8
3	2	1						
3	3	3.464102	3	4 -3.464102				
3	4	1						
2	3	-1.732051	-2	3 -3.000000	2	4 1.732051	-2	4 -3.000000
3	4	1						
1	3	-1.732051	-1	3 3.000000	1	4 1.732051	-1	4 3.000000
3	2	1						
0	3	3.464102	0	4 -3.464102				
3	5	1						
-1	2	4.000000	1	3 1.732051	-1	3 1.000000	1	4 -1.732051
-1	4	1.000000						
3	5	1						
-2	2	4.000000	2	3 -1.732051	-2	3 1.000000	2	4 1.732051
-2	4	1.000000						
3	3	1						
-3	2	4.000000	-3	3 -2.000000	-3	4 -2.000000		
4	4	1						
4	3	-1.732051	-4	3 3.000000	4	4 1.732051	-4	4 3.000000
4	2	1						
3	3	3.464102	3	4 -3.464102				
4	4	1						
2	3	-1.732051	-2	3 -3.000000	2	4 1.732051	-2	4 -3.000000
4	4	1						
1	3	-1.732051	-1	3 3.000000	1	4 1.732051	-1	4 3.000000
4	2	1						
0	3	3.464102	0	4 -3.464102				
4	5	1						
-1	2	4.000000	1	3 1.732051	-1	3 1.000000	1	4 -1.732051
-1	4	1.000000						
4	5	1						
-2	2	4.000000	2	3 -1.732051	-2	3 1.000000	2	4 1.732051
-2	4	1.000000						
4	3	1						
-3	2	4.000000	-3	3 -2.000000	-3	4 -2.000000		
4	5	1						
-4	2	4.000000	4	3 1.732051	-4	3 1.000000	4	4 -1.732051
-4	4	1.000000						
5	4	1						
5	3	-1.732051	-5	3 3.000000	5	4 1.732051	-5	4 3.000000
5	4	1						
4	3	-1.732051	-4	3 3.000000	4	4 1.732051	-4	4 3.000000
5	2	1						
3	3	3.464102	3	4 -3.464102				
5	4	1						
2	3	-1.732051	-2	3 -3.000000	2	4 1.732051	-2	4 -3.000000
5	4	1						
1	3	-1.732051	-1	3 3.000000	1	4 1.732051	-1	4 3.000000
5	2	1						
0	3	3.464102	0	4 -3.464102				
5	5	1						
-1	2	4.000000	1	3 1.732051	-1	3 1.000000	1	4 -1.732051
-1	4	1.000000						
5	5	1						
-2	2	4.000000	2	3 -1.732051	-2	3 1.000000	2	4 1.732051
-2	4	1.000000						
5	3	1						

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8
-3      2  4. 000000  -3      3 -2. 000000  -3      4 -2. 000000
 5      5      1
-4      2  4. 000000      4      3  1. 732051  -4      3  1. 000000      4      4 -1. 732051
-4      4  1. 000000
 5      5      1
-5      2  4. 000000      5      3  1. 732051  -5      3  1. 000000      5      4 -1. 732051
-5      4  1. 000000

```

```

      sym0rb v2.3d
** Nsym, IsymI, JsymI **

```

```

4
1  1  1  1
1  1  2  0

```

C3v with angular momentum= {{0, 5}, {0, 5}}

Number of atoms= 4
 Equivalent atoms
 a01

a02 a03 a04

```

Positions of atoms
0      0      Hold[0.38103]  1
Hold[0.93753]  0      0      2
-Hold[0.93753]  Sqrt[3] Hold[0.93753]
-----
2      2      0      3
-Hold[0.93753]  -(Sqrt[3] Hold[0.93753])
-----
2      2      0      4

```

```

C3v Positions of atoms
4
0.0000000000  0.0000000000  0.3810300000  1  1
0.9375300000  0.0000000000  0.0000000000  2  2
-0.4687650000  0.8119247968  0.0000000000  2  3
-0.4687650000 -0.8119247968  0.0000000000  2  4
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8

```

対称ブロックごとに、球面調和関数の線形結合の形で対称軌道が記述してある。例えば、

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8
0      3      1
0      2  2. 000000  0      3  2. 000000  0      4  2. 000000
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8

```

は、 $2.0y_{00}^{(2)} + 2.0y_{00}^{(3)} + 2.0y_{00}^{(3)}$ と読むことができ(係数 $\times y_{lm}^{(原子の番号)}$, l =方位量子数, m =磁気量子数),
2番目の原子の s 軌道(係数 2.0) + 3番目の原子の s 軌道(係数 2.0) + 3番目の原子の s 軌道(係数 2.0)
 という意味である。

今回、追記した g 軌道の箇所を例に挙げると、

	1	2	3	4	5	6	7	8
4	5	1						
4	2	2.000000	4	3	-1.000000	-4	3	1.732051
-4	4	-1.732051					4	4
	1	2	3	4	5	6	7	8

は、 $2.0y_{44}^{(2)} - 1.0y_{44}^{(3)} + \sqrt{3.0}y_{4-4}^{(3)} - 1.0y_{44}^{(4)} - \sqrt{3.0}y_{4-4}^{(4)}$ と読むことができ、2 番目の原子の g 軌道($m=4$)(係数 2.0) - 3 番目の原子の g 軌道($m=4$)(係数 1.0) + 3 番目の原子の g 軌道($m=-4$)(係数 $\sqrt{3.0}$) - 4 番目の原子の g 軌道($m=4$)(係数 1.0) - 4 番目の原子の g 軌道($m=-4$)(係数 $\sqrt{3.0}$) という意味である。

h 軌道の箇所を例に挙げると,

	1	2	3	4	5	6	7	8
5	5	1						
5	2	2.000000	5	3 -1.000000	-5	3 1.732051	5	4 -1.000000
-5	4	-1.732051						

は、 $2.0y_{55}^{(2)} - 1.0y_{55}^{(3)} + \sqrt{3.0}y_{5-5}^{(3)} - 1.0y_{55}^{(4)} - \sqrt{3.0}y_{5-5}^{(4)}$ と読むことができ、2 番目の原子の h 軌道($m=5$)(係数 2.0) - 3 番目の原子の h 軌道($m=5$)(係数 1.0) + 3 番目の原子の h 軌道($m=-5$)(係数 $\sqrt{3.0}$) - 4 番目の原子の h 軌道($m=5$)(係数 1.0) - 4 番目の原子の h 軌道($m=-5$)(係数 $\sqrt{3.0}$) という意味である。

今回、g 軌道と h 軌道を追記した F25 は以下の通り (表 1).

表 1. F25 を改定した eduDV のプログラム一覧

No.	F25	点群	プログラム名	分子の例
1	c2v12	C _{2v}	c2v12, c2v12n, c2v12s	H ₂ O, H ₂ S, O ₃ , SO ₂ , NO ₂ , SF ₂ , SCl ₂ , ClO ₂
2	c3v13	C _{3v}	c3v13, c3v13n, c3v13s	NH ₃ , PH ₃ , AsH ₃ , SbH ₃ , NF ₃ , PF ₃ , AsF ₃
3	d2h24	D _{2h}	d2h24, d2h24n, d2h24s	C ₂ H ₄ , C ₂ F ₄ , C ₂ Cl ₄ , N ₂ O ₄ (気相), N ₂ O ₄ (固相)
4	d3d26	D _{3d}	d3d26, d3d26n, d3d26s	C ₂ H ₆ , C ₂ F ₆
5	d3h13	D _{3h}	d3h13, d3h13n, d3h13s	BF ₃ , BCl ₃ , BBr ₃ , BI ₃
6	d4h14	D _{4h}	d4h14, d4h14n, d4h14s	[PtCl ₄] ²⁻ , [PdCl ₄] ²⁻ , [AuCl ₄] ⁻
7	d6h66	D _{6h}	d6h66, d6h66n, d6h66s	C ₆ H ₆ , C ₆ F ₆ , C ₆ Cl ₆ , C ₆ Br ₆ , C ₆ I ₆
8	td14	T _d	td14, td14n, td14s, ml4, ml4n, ml4s	CH ₄ , CF ₄ , CCl ₄ , CBr ₄ , SiH ₄ , [CoCl ₄] ²⁻
9	oh16	O _h	oh16, oh16n, oh16s, ml6, ml6n, ml6s	SF ₆ , SeF ₆ , MoF ₆ , TeF ₆ , WF ₆ , [CrF ₆] ³⁻
10	td144	T _d	td144, td144n, td144s	[Ni(CO) ₄]
11	oh166	O _h	oh166, oh166n, oh166s	[Cr(CO) ₆], [V(CO) ₆], [Mo(CO) ₆], [W(CO) ₆]
12	mh2o6	D _{2h}	mh2o6, mh2o6n, mh2o6s	[Co(H ₂ O) ₆] ²⁺ , [Co(H ₂ O) ₆] ³⁺ , [Ni(H ₂ O) ₆] ²⁺

6. まとめ

教育用分子軌道計算システム eduDV で、周期表の全元素（原子番号 1 の水素(H)から原子番号 172 のウンセプトビウム(Usb)まで）を対象として対称軌道を用いた分子軌道計算をする際、基底関数として方位量子数 $l=4$ の g 軌道(5g 軌道, 6g 軌道, 7g 軌道, ...)および方位量子数 $l=5$ の h 軌道(6h 軌道, 7h 軌道, 8h 軌道, ...)が使えるようになった。拡張周期表（まだ人類が発見していない未知の超重元素の領域まで論理的に発展させた周期表で、何種類か提案されている）における第 8 周期以降の元素を含む DV- $X\alpha$ 分子軌道計算で、5g 軌道は占有軌道（電子が入っている原子軌道）として用いるが、LUMO 以降の空軌道（分子軌道）の精度を上げる目的で、6g 軌道, 6h 軌道などの空軌道（電子が入っていない原子軌道）を基底関数として含めることがある。その場合、7i 軌道（方位量子数 $l=6$ ）の使用も想定されるが、対称軌道作成プログラム symOrb[22] が方位量子数 $l=6$ に対応しておらず、i 軌道を含めた対称軌道を作成することは、現段階では難しい。なお、DV- $X\alpha$ 分子軌道計算プログラムは、使用可能な方位量子数の制約はなく、対称軌道を使わない分子軌道計算であれば、7i 軌道も問題なく基底関数として使用できる。

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, “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>
- [11] 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 (2015), <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>

- [12] 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
- [13] Hirohiko Adachi, Masaru Tsukada, Chikatoshi Satoko, “Discrete variational X α cluster calculations. I. Application to metal clusters”, *Journal of the Physical Society of Japan*, **45**(3), 875-883 (1978).
- [14] 足立裕彦, “量子材料化学入門—DV-X α 法からのアプローチ”, 三共出版 1991 年.
- [15] 坂根弦太, “DV-X α 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[M₀₃X₄(H₂O)₉]⁴⁺ (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).
- [16] 坂根弦太, “混合金属クラスター錯体の分子軌道計算—DV-X α 法による[M₀₃MS₄(H₂O)₁₀]⁴⁺ (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).
- [17] 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[Mo₄S₄(H₂O)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).
- [18] 坂根弦太, “モリブデン錯体の DV-X α 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).
- [19] 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 α 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.
- [20] 坂根弦太, “DV-X α 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).
- [21] 坂根弦太, “DV-X α 法による[MoCl₆]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).
- [22] 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 α 分子軌道計算への入門■”, 三共出版 1998 年.
- [23] 小和田善之, 山田善信, “はじめての電子状態計算 ■DV-X α 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>
- [24] 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>
- [25] 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 α method, http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance_environment
- [26] 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>
- [27] 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
- [28] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>