

教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (10)

坂根 弦太* (岡山理科大学 理学部 化学科)

森 義裕 (岡山理科大学 非常勤講師)

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[5-13], 最新版のプログラム一式[14], マニュアル[15], 論文[16], 書籍[17, 18]を公開している.

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, 17, 18]は, eduDV[1-18], DV- $X\alpha$ 法[17-32], 秀丸エディタ[33], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[34], VESTA[35, 36]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) すべ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すべてに 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 eduDV で計算できる分子は, 対称性を有し, 分子軌道計算時に対称性軌道を使用するもののみであったが, 昨年度, 対称性のない分子を eduDV に登録する方法, すなわち文献やデータベースより得た分子の原子間距離・角度等の情報から Z 行列[37]を作成し, Open Babel[38]により gzmat 書式を xyz 書式に変換, xyz2f01 により xyz 書式を f01 書式に変換し, f01 ファイルを eduDV に登録する方法を開拓した[13]. 今年度はこの方法により, 改訂 5 版 化学便覧 基礎編 II [39]の表 16.2「単体および無機分子の構造定数」に掲載されている化合物のうち, 対称性のない分子を eduDV に組み込んだので報告する.

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 10, 64-bit) に Open Watcom Fortran77 compiler (V2)[40]をインストールした環境を用いた.

3. 化学便覧 基礎編 II 表 16.2

改訂 5 版 化学便覧 基礎編 II [39]の表 16.2「単体および無機分子の構造定数」に掲載されている化合物は 223 種類である. これら 223 種類の化合物を, その分子の属する点群で整理した. その分子が eduDV のデータ自動入力機能「Auto-eduDV」[8]に, すでに登録済みであるか否かも示した. なお, 「対称なし」に分類した分子の中には, C_s 点群に属する分子が含まれている.

1. $D_{\infty h}$	BO ₂ 【未登録】	CO ₂ 【登録済】	CS ₂ 【登録済】	C ₃ O ₂ 【未登録】
	CaBr ₂ 【未登録】	CaCl ₂ 【未登録】	CdBr ₂ 【未登録】	CdCl ₂ 【未登録】
	CdI ₂ 【未登録】	HgCl ₂ 【登録済】	CgI ₂ 【未登録】	KrF ₂ 【登録済】
	N ₃ 【未登録】	XeF ₂ 【登録済】	ZnBr ₂ 【未登録】	ZnCl ₂ 【未登録】

*Corresponding author: 岡山市 北区 理大町 1-1, gsakane@chem.ous.ac.jp

2. $C_{\infty v}$	BClO 【未登録】 BHO 【未登録】 CsOH 【未登録】 HCNO 【登録済】 N ₂ O 【未登録】 SCSe 【未登録】	BCIS 【未登録】 BHS 【未登録】 FCN 【登録済】 ICN 【未登録】 OCS 【未登録】 SCTe 【未登録】	BFH ⁺ 【未登録】 BrCN 【登録済】 HCN 【登録済】 KOH 【未登録】 OCSe 【未登録】	BFO 【未登録】 ClCN 【登録済】 HNC 【未登録】 N ₂ H ⁺ 【未登録】 RbOH 【未登録】
3. C_2	H ₂ O ₂ 【未登録】 O ₂ F ₂ 【未登録】	H ₂ SO ₄ 【未登録】 S ₂ Br ₂ 【未登録】	H ₂ S ₂ 【未登録】 S ₂ Cl ₂ 【未登録】	N ₂ H ₄ 【未登録】
4. C_{2v}	BF ₂ H 【未登録】 COF ₂ 【未登録】 GeCl ₂ 【登録済】 H ₂ S 【登録済】 NO ₂ Cl 【未登録】 PF ₂ 【未登録】 SCL ₂ 【登録済】 SO ₂ Cl ₂ 【未登録】 SiF ₂ 【登録済】	BrF ₃ 【未登録】 ClF ₃ 【未登録】 GeF ₂ 【登録済】 NF ₂ 【未登録】 NO ₂ F 【未登録】 PH ₂ 【未登録】 SF ₂ 【登録済】 SO ₂ F ₂ 【未登録】 Si ₂ H ₂ 【未登録】	COBr ₂ 【未登録】 ClO ₂ 【登録済】 H ₂ O 【登録済】 NH ₂ 【未登録】 OF ₂ 【登録済】 PO ₂ 【未登録】 SOF ₄ 【未登録】 S ₂ O ₂ 【未登録】	COCl ₂ 【未登録】 Cl ₂ O 【登録済】 H ₂ O ⁺ 【未登録】 NO ₂ 【登録済】 O ₃ 【登録済】 PbCl ₂ 【未登録】 SO ₂ 【登録済】 SeO ₂ 【登録済】
5. C_{3v}	AsBr ₃ 【登録済】 AsI ₃ 【登録済】 CClF ₃ 【未登録】 GeBrH ₃ 【未登録】 LuCl ₃ 【登録済】 PBr ₃ 【登録済】 POCl ₃ 【未登録】 SbCl ₃ 【登録済】 SiClH ₃ 【未登録】 SiH ₃ I 【未登録】	AsCl ₃ 【登録済】 BH ₃ NH ₃ 【未登録】 CCl ₃ F 【未登録】 GeClH ₃ 【未登録】 NCl ₃ 【登録済】 PCl ₃ 【登録済】 POF ₃ 【未登録】 SbH ₃ 【登録済】 SiFH ₃ 【未登録】 VCl ₃ O 【未登録】	AsF ₃ 【登録済】 BiBr ₃ 【登録済】 CF ₃ I 【未登録】 GeFH ₃ 【未登録】 NF ₃ 【登録済】 PF ₃ 【登録済】 PrI ₃ 【登録済】 SiBF ₃ 【未登録】 SiF ₃ H 【未登録】	AsH ₃ 【登録済】 BiCl ₃ 【登録済】 GdI ₃ 【登録済】 H ₃ O ⁺ 【未登録】 NH ₃ 【登録済】 PH ₃ 【登録済】 ReClO ₃ 【登録済】 SiBH ₃ 【未登録】 SiH ₃ 【未登録】
6. C_{4v}	BrF ₅ 【未登録】 WF ₄ O 【未登録】	IF ₅ 【未登録】	MoCl ₄ O 【未登録】	WClF ₅ 【未登録】
7. D_{2h}	Al ₂ Cl ₆ 【未登録】	B ₂ H ₆ 【未登録】	Li ₂ Cl ₂ 【未登録】	N ₂ O ₄ 【登録済】
8. D_{3d}	Ge ₂ H ₆ 【未登録】 Si ₂ H ₆ 【未登録】	Se ₆ 【未登録】	Si ₂ Cl ₆ 【未登録】	Si ₂ F ₆ 【未登録】

9. D_{4d} S₈ 【未登録】

10. D _{3h}	BBr ₃ 【登録済】	BCl ₃ 【登録済】	BF ₃ 【登録済】	BI ₃ 【登録済】
	B ₃ H ₃ O ₃ 【未登録】	B ₃ H ₆ B ₃ 【未登録】	Fe(CO) ₅ 【未登録】	GaF ₃ 【未登録】
	GaI ₃ 【未登録】	H ₃ ⁺ 【未登録】	NbCl ₅ 【未登録】	PCl ₅ 【未登録】
	PF ₅ 【未登録】	SO ₃ 【未登録】	SeO ₃ 【未登録】	VF ₅ 【未登録】

11. D_{4h} XeF₄ 【未登録】

12. T _d	CBr ₄ 【登録済】	CCl ₄ 【登録済】	CF ₄ 【登録済】	GeBr ₄ 【登録済】
	GeCl ₄ 【登録済】	GeH ₄ 【登録済】	HfCl ₄ 【登録済】	Ni(CO) ₄ 【登録済】
	OsO ₄ 【登録済】	P ₄ 【未登録】	P ₄ O ₆ 【未登録】	RuF ₄ 【登録済】
	SiCl ₄ 【登録済】	SiF ₄ 【登録済】	SiH ₄ 【登録済】	SnCl ₄ 【登録済】
	SnH ₄ 【登録済】	ThCl ₄ 【登録済】	ThF ₄ 【登録済】	TiBr ₄ 【登録済】
	TiCl ₄ 【登録済】	VCl ₄ 【登録済】	XeO ₄ 【登録済】	ZrCl ₄ 【登録済】
	ZrF ₄ 【登録済】			

13. O _h	Cr(CO) ₆ 【登録済】	IrF ₆ 【登録済】	Mo(CO) ₆ 【登録済】	MoF ₆ 【登録済】
	NpF ₆ 【登録済】	OsF ₆ 【登録済】	PuF ₆ 【登録済】	ReF ₆ 【登録済】
	SF ₆ 【登録済】	SeF ₆ 【登録済】	UF ₆ 【登録済】	V(CO) ₆ 【登録済】
	W(CO) ₆ 【登録済】	WF ₆ 【登録済】	XeF ₆ 【未登録】	

14. 属する点群なし (C _s を含む)	BF ₂ OH 【未登録】	COCIF 【未登録】	ClOH 【未登録】
	FOH 【未登録】	FO ₂ 【未登録】	HNCO 【未登録】
	HNCS 【未登録】	HNO 【未登録】	HNO ₂ 【未登録】
	HNSO 【未登録】	HN ₃ 【未登録】	HSO 【未登録】
	NClH ₂ 【未登録】	NF ₂ CN 【未登録】	NH ₂ F 【未登録】
	NH ₂ NO ₂ 【未登録】	NH ₂ OH 【未登録】	NOCl 【未登録】
	NSCl 【未登録】	N ₂ O ₃ 【未登録】	O(SiH ₃) ₂ 【未登録】
	S(SiH ₃) ₂ 【未登録】	S ₂ O 【未登録】	SOCl ₂ 【未登録】
	SeOF ₂ 【未登録】		SOF ₂ 【未登録】

対称性のない分子 (C_s点群に属する分子を含む) は 32 種類であった。今回はこのうち、(1)イソシア
ン酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3]), (2)イソチオシアン酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6]),
(3)ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6]), (4)亜硝酸(nitrous acid, HNO₂, CAS[7782-77-6]), (5)硝酸
(nitric acid, HNO₃, CAS[7697-37-2]), (6)アジ化水素(hydrogen azide, HN₃, CAS[7782-79-8]), (7)ヒドロペルオ
キシラジカル(hydroperoxyl radical, HO₂, CAS[3170-83-0]), (8)モノクロラミン(monochloramine, NClH₂,
CAS[10599-90-3]), (9)ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH₂OH, CAS[7803-49-8]), (10)塩化ニトロシル

(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6]), (11)フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5]), (12)三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N₂O₃, CAS[10544-73-7]), (13)一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S₂O, CAS[20901-21-7])を eduDV に登録する. これら 13 種類の分子はいずれも C_s 点群に属しているが, 今回は対称性軌道を使用せずに eduDV で分子軌道計算を行うこととする.

4. f01 の作成

化学便覧[39]に掲載されている分子の構造定数(原子間距離・角度の情報)から Z 行列[37]を作成した. その後, Open Babel[38]で gzmat 書式を xyz 書式に変換, xyz2f01 で xyz 書式を f01 書式に変換した.

4-1. イソシアン酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3])

イソシアン酸(図 1)の構造定数は, 表 1 に示す通りである.

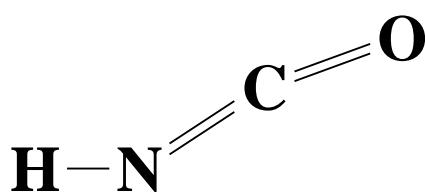


図 1. イソシアン酸

(O は H に対してトランス)

表 1. イソシアン酸の構造定数

N—H	0.995 Å
N—C	1.214 Å
C—O	1.166 Å
∠HNC	124 °
∠NCO	173 °

イソシアン酸の Z 行列を図 2 に, xyz ファイルを図 3 に, f01 ファイルを図 4 に, VESTA 画像を図 5 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 isocyanic acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 O 1 ↓
6 N ↓
7 C 1 r1 ↓
8 O 2 r2 1 a1 ↓
9 H 1 r3 2 a2 3 a3 ↓
10 Variables: ↓
11 r1= 1.214 ↓
12 r2= 1.166 ↓
13 r3= 0.995 ↓
14 a1= 173 ↓
15 a2= 124 ↓
16 a3= 180 ↓
17 ↓

```

図 2. イソシアン酸の Z 行列

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	6	2	1.21400	0.00000	0.00000	↓
4	8	3	2.37131	0.00000	0.14210	↓
5	1	4	-0.55640	0.00000	-0.82489	↓
6						↓
7	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
8						↓
9	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
10	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
11	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
12	10000	Sample point	(<100000, = 0 Autoset)			↓

図 4. イソシアン酸の f01 ファイル

```

1 4 ↓
2 isocyanic acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000 ↓
4 C 1.21400 0.00000 0.00000 ↓
5 O 2.37131 0.00000 0.14210 ↓
6 H -0.55640 0.00000 -0.82489 ↓

```

図 3. イソシアン酸の xyz ファイル

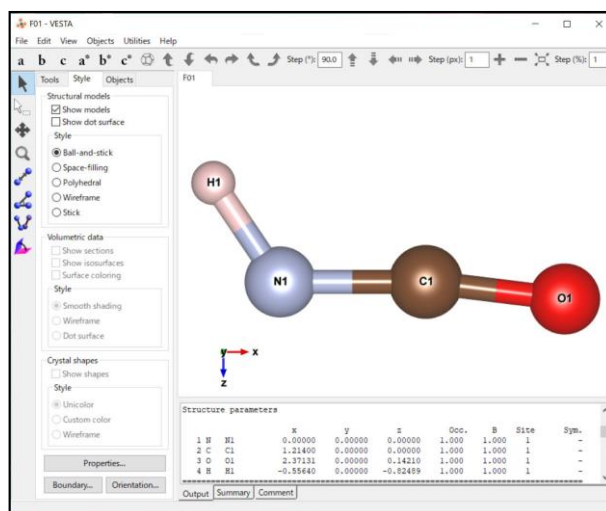


図 5. イソシアン酸の VESTA 画像

4-2. イソチオシアン酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])

イソチオシアン酸 (図 6) の構造定数は, 表 2 に示す通りである.

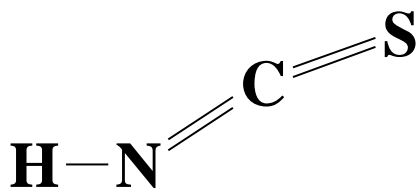


図 6. イソチオシアン酸
(S は H に対してトランス)

表 2. イソチオシアン酸の構造定数

N—H	0.993 Å
N—C	1.207 Å
C—S	1.567 Å
∠HNC	132 °
∠NCS	174 °

イソチオシアン酸の Z 行列を図 7 に, xyz ファイルを図 8 に, f01 ファイルを図 9 に, VESTA 画像を図 10 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 isothiocyanic acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 0 1 ↓
6 N ↓
7 C 1 r1 ↓
8 S 2 r2 1 a1 ↓
9 H 1 r3 2 a2 3 a3 ↓
10 Variables: ↓
11 r1= 1.207 ↓
12 r2= 1.567 ↓
13 r3= 0.993 ↓
14 a1= 174 ↓
15 a2= 132 ↓
16 a3= 180 ↓
17 ↓

```

図 7. イソチオシアン酸の Z 行列

1	Z	NEQ	X	Y	Z	
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	6	2	1.20700	0.00000	0.00000	↓
4	16	3	2.76542	0.00000	0.16380	↓
5	1	4	-0.66445	0.00000	-0.73794	↓
6						↓
7	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
8						↓
9	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
10	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
11	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
12	10000	Sample point	(<100000,	= 0 Autoset)		↓

図 9. イソチオシアン酸の f01 ファイル

```

1 4 ↓
2 isothiocyanic acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000 ↓
4 C 1.20700 0.00000 0.00000 ↓
5 S 2.76542 0.00000 0.16380 ↓
6 H -0.66445 0.00000 -0.73794 ↓

```

図 8. イソチオシアン酸の xyz ファイル

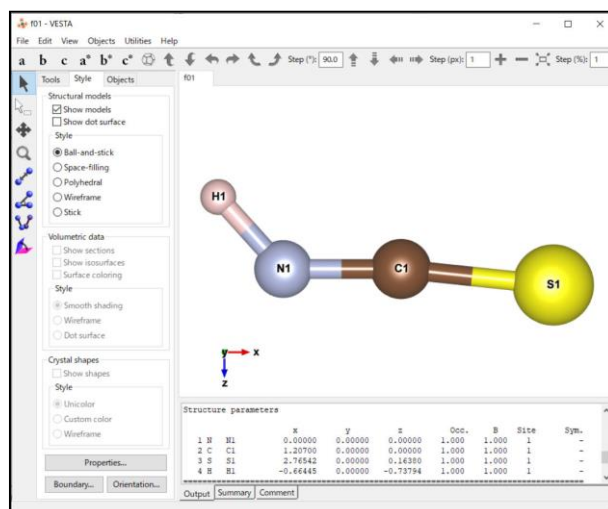


図 10. イソチオシアン酸の VESTA 画像

4-3. ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6])

ニトロキシル (図 11) の構造定数は, 表 3 に示す通りである.

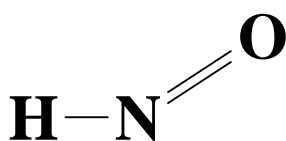


図 11. ニトロキシル

表 3. ニトロキシルの構造定数

N—H	1.063 Å
N—O	1.212 Å
∠HNO	108.6 °

ニトロキシルの Z 行列を図 1 2 に, xyz ファイルを図 1 3 に, f01 ファイルを図 1 4 に, VESTA 画像を図 1 5 に示す。

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitroxyl #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 H↓
7 N 1 r1↓
8 0 2 r2 1 a1↓
9 Variables:↓
10 r1= 1.063↓
11 r2= 1.212↓
12 a1= 108.6↓
13 ↓

```

図 1 2. ニトロキシルの Z 行列

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	1	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	7	2	1.06300	0.00000	0.00000	↓
4	8	3	1.44958	0.00000	1.14870	↓
5						↓
6	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1↓
7						↓
8	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
9	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
10	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
11	7500	Sample point	(<100000, = 0 Autoset)			↓

図 1 4. ニトロキシルの f01 ファイル

```

1 3↓
2 nitroxyl #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 H 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 N 1.06300 0.00000 0.00000↓
5 O 1.44958 0.00000 1.14870↓

```

図 1 3. ニトロキシルの xyz ファイル

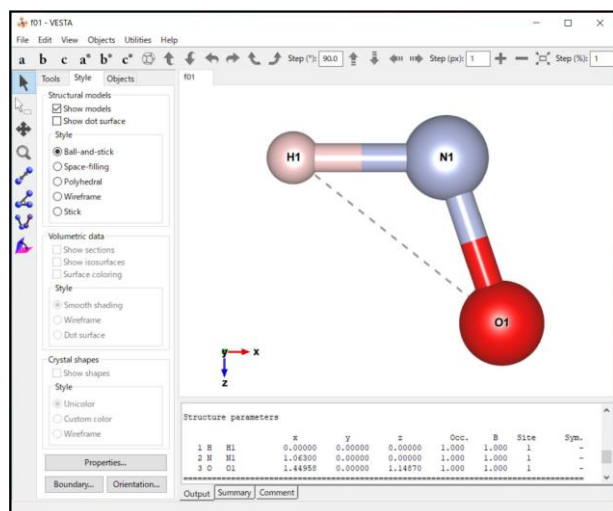


図 1 5. ニトロキシルの VESTA 画像

4-4. 亜硝酸(nitrous acid, HNO₂, CAS[7782-77-6])

亜硝酸は s-トランス形, s-シス形の二種類がある (図 1 6)。それらの構造定数は, 表 4 に示す通りである。

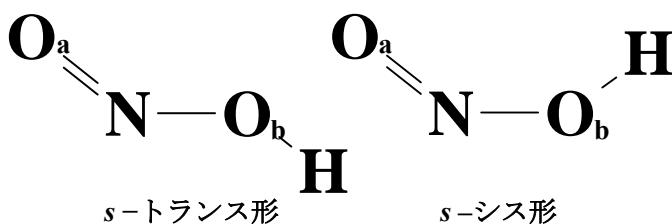


図 1 6. 亜硝酸

表 4. 亜硝酸の構造定数

	s-トランス形	s-シス形
O _b —H	0.947 Å	0.975 Å
N—O _b	1.441 Å	1.397 Å
N—O _a	1.173 Å	1.190 Å
∠O _a NO _b	110.5 °	113.5 °
∠NO _b H	102.1 °	104.4 °

s-トランス形の亜硝酸の Z 行列を図 1 7 に, s-シス形の亜硝酸の Z 行列を図 1 8 に示す。

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitrous acid(s-trans) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 N↓
7 0 1 r1↓
8 H 2 r2 1 a1↓
9 0 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 Variables:↓
11 r1= 1.441↓
12 r2= 0.947↓
13 r3= 1.173↓
14 a1= 102.1↓
15 a2= 110.5↓
16 a3= 180↓
17 ↓

```

図 1 7. s-トランス形の亜硝酸の Z 行列

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitrous acid(s-cis) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 N↓
7 0 1 r1↓
8 H 2 r2 1 a1↓
9 0 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 Variables:↓
11 r1= 1.397↓
12 r2= 0.975↓
13 r3= 1.190↓
14 a1= 104.4↓
15 a2= 113.5↓
16 a3= 0↓
17 ↓

```

図 1 8. s-シス形の亜硝酸の Z 行列

s -トランス形の亜硝酸の xyz ファイルを図 1 9 に, s -シス形の亜硝酸の xyz ファイルを図 2 0 に示す.

```

1 4↓
2 nitrous acid(s-trans) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N      0.00000      0.00000      0.00000↓
4 O      1.44100      0.00000      0.00000↓
5 H      1.63951      0.00000      0.92596↓
6 O     -0.41079      0.00000     -1.09872↓

```

図 1 9. s -トランス形の亜硝酸の xyz ファイル

```

1 4↓
2 nitrous acid(s-cis) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N      0.00000      0.00000      0.00000↓
4 O      1.39700      0.00000      0.00000↓
5 H      1.63947      0.00000      0.94437↓
6 O     -0.47451      0.00000      1.09130↓

```

図 2 0. s -シス形の亜硝酸の xyz ファイル

s -トランス形の亜硝酸の f01 ファイルを図 2 1 に, s -シス形の亜硝酸の f01 ファイルを図 2 2 に示す.

```

1 | Z ||NEQ|| X || Y || Z |↓
2 | 7 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000↓
3 | 8 | 2 | 1.44100 | 0.00000 | 0.00000↓
4 | 1 | 3 | 1.63951 | 0.00000 | 0.92596↓
5 | 8 | 4 | -0.41079 | 0.00000 | -1.09872↓
6 |-----|↓
7 |NEQ|| CHG ||U/D|| RD || VD | 1↓
8 |-----|↓
9 | 0 | Unit | (0: Angstrom 1: Atomic)↓
10 | 0 | Spin | (0: Non-spin 1: Spin )↓
11 | 0 | M.P. | (0: No 1: Yes )↓
12 |10000 | Sample point (<100000, = 0 Autoset)↓

```

図 2 1. s -トランス形の亜硝酸の f01 ファイル

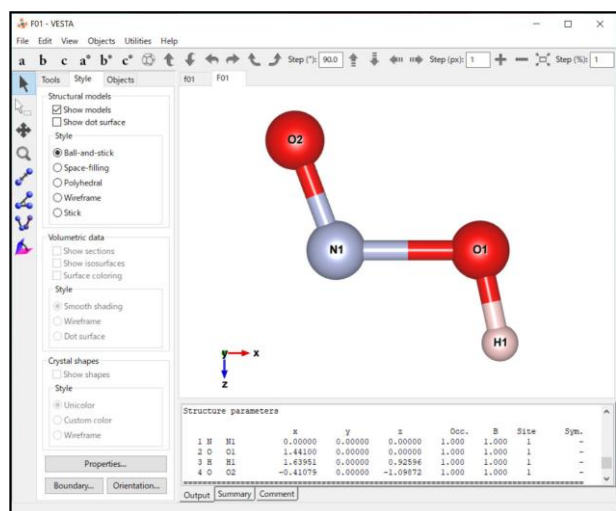
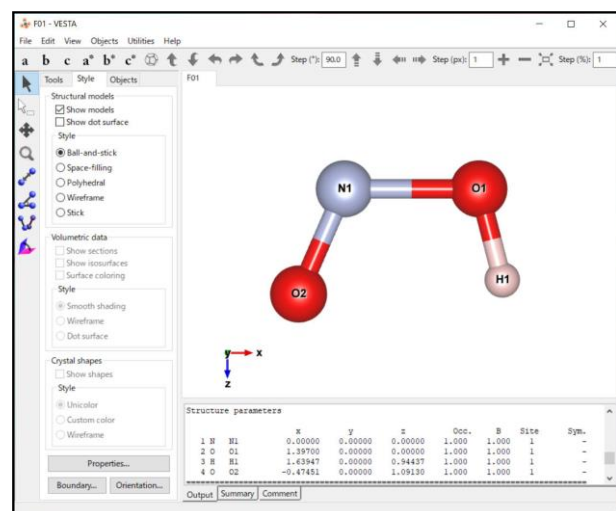
```

1 | Z ||NEQ|| X || Y || Z |↓
2 | 7 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000↓
3 | 8 | 2 | 1.39700 | 0.00000 | 0.00000↓
4 | 1 | 3 | 1.63947 | 0.00000 | 0.94437↓
5 | 8 | 4 | -0.47451 | 0.00000 | 1.09130↓
6 |-----|↓
7 |NEQ|| CHG ||U/D|| RD || VD | 1↓
8 |-----|↓
9 | 0 | Unit | (0: Angstrom 1: Atomic)↓
10 | 0 | Spin | (0: Non-spin 1: Spin )↓
11 | 0 | M.P. | (0: No 1: Yes )↓
12 |10000 | Sample point (<100000, = 0 Autoset)↓

```

図 2 2. s -シス形の亜硝酸の f01 ファイル

s -トランス形の亜硝酸の VESTA 画像を図 2 3 に, s -シス形の亜硝酸の VESTA 画像を図 2 4 に示す.

図 2 3. s -トランス形の亜硝酸の VESTA 画像図 2 4. s -シス形の亜硝酸の VESTA 画像

4-5. 硝酸(nitric acid, HNO₃, CAS[7697-37-2])

硝酸(図 2 5)の構造定数は, 表 5 に示す通りである.

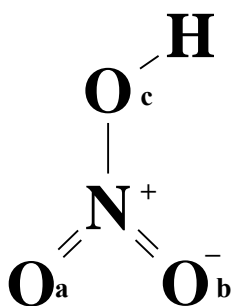


図 2 5. 硝酸(平面形)

表 5. 硝酸の構造定数

O _c —H	0.941 Å
N—O _c	1.410 Å
N—O _a	1.198 Å
N—O _b	1.213 Å
∠HO _c N	102.6 °
∠O _c NO _a	114.1 °
∠O _c NO _b	115.7 °

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitric acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 O 1↓
6 N↓
7 O 1 r1↓
8 H 2 r2 1 a1↓
9 O 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 O 1 r4 2 a4 3 a5↓
11 Variables:↓
12 r1= 1.410↓
13 r2= 0.941↓
14 r3= 1.198↓
15 r4= 1.213↓
16 a1= 102.6↓
17 a2= 114.1↓
18 a3= 180↓
19 a4= 115.7↓
20 a5= 0↓
21 ↓

```

図 2 6. 硝酸の Z 行列

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	8	2	1.41000	0.00000	0.00000	↓
4	1	3	1.61527	0.00000	0.91834	↓
5	8	4	-0.48918	0.00000	-1.09358	↓
6	8	5	-0.52603	0.00000	1.09301	↓
7						↓
8	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1↓
9	1	1.00000				
10	5	-1.00000				
11						↓
12	0	Unit	(0: Angstrom 1: Atomic)		↓	
13	0	Spin	(0: Non-spin 1: Spin)		↓	
14	0	M. P.	(0: No 1: Yes)		↓	
15	12500	Sample point (<100000, = 0 Autoset)				↓

図 2 8. 硝酸の f01 ファイル

硝酸の Z 行列を図 2 6 に, xyz ファイルを図 2 7 に, f01 ファイルを図 2 8 に, VESTA 画像を図 2 9 に示す。

```

1 5↓
2 nitric acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 O 1.41000 0.00000 0.00000↓
5 H 1.61527 0.00000 0.91834↓
6 O -0.48918 0.00000 -1.09358↓
7 O -0.52603 0.00000 1.09301↓

```

図 2 7. 硝酸の xyz ファイル

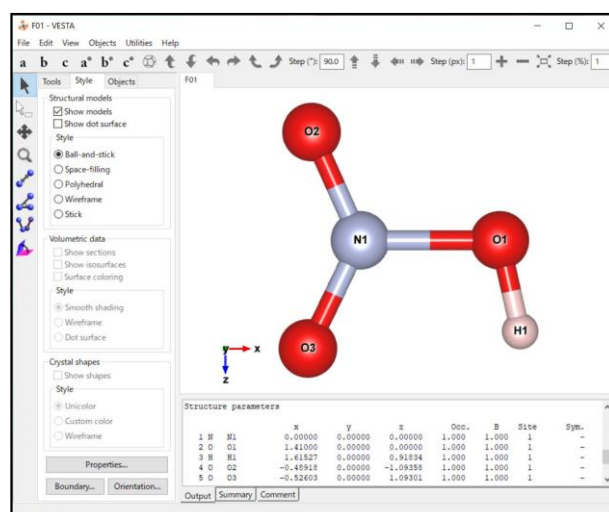


図 2 9. 硝酸の VESTA 画像

4-6. アジ化水素(hydrogen azide, HN₃, CAS[7782-79-8])

アジ化水素 (図 3 0) の構造定数を表 6 に示す。Z 行列を図 3 1 に, xyz ファイルを図 3 2 に示す。

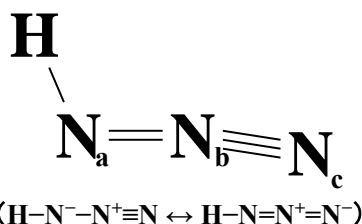


図 3 0. アジ化水素 (トランス形)

表 6. アジ化水素の構造定数

H—N _a	1.02 Å
N _a —N _b	1.243 Å
N _b —N _c	1.134 Å
∠HN _a N _b	109 °
∠N _a N _b N _c	171 °

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 hydrogen azide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 O 1↓
6 N↓
7 N 1 r1↓
8 N 2 r2 1 a1↓
9 H 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 Variables:↓
11 r1= 1.243↓
12 r2= 1.134↓
13 r3= 1.02↓
14 a1= 171↓
15 a2= 109↓
16 a3= 180↓
17 ↓

```

図 3 1. アジ化水素の Z 行列

```

1 4↓
2 hydrogen azide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 N 1.24300 0.00000 0.00000↓
5 N 2.36304 0.00000 0.17740↓
6 H -0.33208 0.00000 -0.96443↓

```

図 3 2. アジ化水素の xyz ファイル

アジ化水素の f01 ファイルを図 3 3 に, VESTA 画像を図 3 4 に示す.

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓	
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓	
3	7	2	1.24300	0.00000	0.00000	↓	
4	7	3	2.36304	0.00000	0.17740	↓	
5	1	4	-0.33208	0.00000	-0.96443	↓	
6	↓						
7	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1 ↓	
8	↓						
9	0	Unit	(0: Angstrom		1: Atomic)	↓	
10	0	Spin	(0: Non-spin		1: Spin)	↓	
11	0	M. P.	(0: No		1: Yes)	↓	
12	10000	Sample point (<100000, = 0 Autoset)					↓

図 3 3. アジ化水素の f01 ファイル

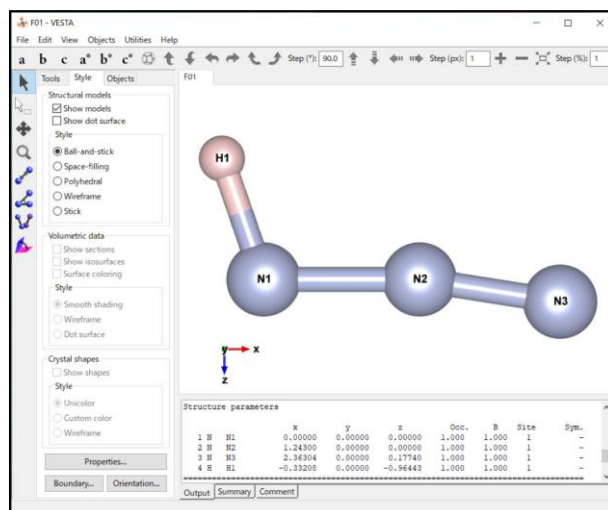


図 3 4. アジ化水素の VESTA 画像

4-7. ヒドロペルオキシラジカル(hydroperoxyl radical, HO₂, CAS[3170-83-0])

ヒドロペルオキシラジカル (図 3 5) の構造定数は, 表 7 に示す通りである.

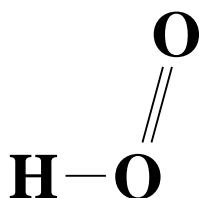


図 3 5. ヒドロペルオキシラジカル

表 7. ヒドロペルオキシラジカルの構造定数

O—H	0.971 Å
O—O	1.3305 Å
∠HOO	104.3 °

ヒドロペルオキシラジカルの Z 行列を図 3 6 に, xyz ファイルを図 3 7 に, f01 ファイルを図 3 8 に, VESTA 画像を図 3 9 に示す.

1	#CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.
2	↓
3	hydroperoxyl radical #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4	↓
5	0 1↓
6	H↓
7	0 1 r1↓
8	0 2 r2 1 a1↓
9	Variables:↓
10	r1= 0.971↓
11	r2= 1.3305↓
12	a1= 104.3↓
13	↓

図 3 6. ヒドロペルオキシラジカルの Z 行列

1	3↓
2	hydroperoxyl radical #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3	H 0.00000 0.00000 0.00000↓
4	O 0.97100 0.00000 0.00000↓
5	O 1.29963 0.00000 1.28928↓

図 3 7. ヒドロペルオキシラジカルの xyz ファイル

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	1	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	8	2	0.97100	0.00000	0.00000	↓
4	8	3	1.29963	0.00000	1.28928	↓
5						
6	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1 ↓
7						
8	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)	↓	
9	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)	↓	
10	0	M. P.	(0: No	1: Yes)	↓	
11	7500	Sample point	(<100000, = 0 Autoset) ↓			

図 3 8. ヒドロペルオキシラジカルの f01 ファイル

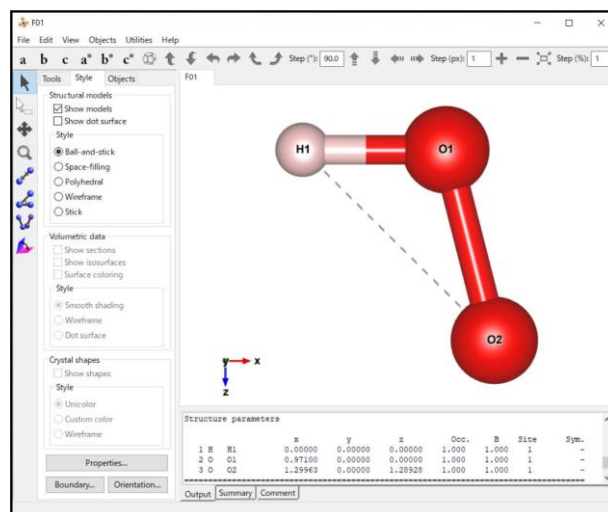


図 3 9. ヒドロペルオキシラジカルの VESTA 画像

4-8. モノクロラミン(monochloramine, NClH_2 , CAS[10599-90-3])

モノクロラミン (図 4 0) の構造定数を表 8 に示す。

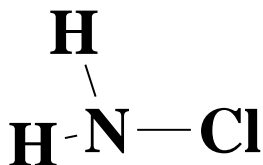


図 4 0. モノクロラミン

表 8. モノクロラミンの構造定数

N—H	1.017 Å
N—Cl	1.748 Å
∠HNCI	103.7 °
∠HNH	107 °

2つの平面, $\triangle\text{H-N-Cl}$ のなす角度 (二面角) は,

$$2 \left(90 - \cos^{-1} \left(\frac{1.017 \sin \left(\frac{107}{2} \right)}{1.017 \cos(90 - (180 - 103.7))} \right) \right) = 111.6645433$$

と算出した。

モノクロラミンの Z 行列を図 4 1 に, xyz ファイルを図 4 2 に, f01 ファイルを図 4 3 に, VESTA 画像を図 4 4 に示す。

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 monochloramine #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 0 1 ↓
6 N ↓
7 Cl 1 r1 ↓
8 H 1 r2 2 a1 ↓
9 H 1 r2 2 a1 3 a2 ↓
10 Variables: ↓
11 r1= 1.748 ↓
12 r2= 1.017 ↓
13 a1= 103.7 ↓
14 a2= 111.6645433 ↓

```

図 4 1. モノクロラミンの Z 行列

	Z	NEQ	X	Y	Z
1	7	1	0.00000	0.00000	0.00000
2	17	2	1.74800	0.00000	0.00000
3	1	3	-0.24086	0.00000	-0.98807
4	1	4	-0.24086	-0.91827	0.36477

	NEQ	CHG	U/D	RD	VD
1	0	Unit	(0: Angstrom 1: Atomic)		
2	0	Spin	(0: Non-spin 1: Spin)		
3	0	M.P.	(0: No 1: Yes)		
4	10000	Sample point	(<100000, = 0 Autoset)		

図 4 3. モノクロラミンの f01 ファイル

```

1 4 ↓
2 monochloramine #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000 ↓
4 Cl 1.74800 0.00000 0.00000 ↓
5 H -0.24086 0.00000 -0.98807 ↓
6 H -0.24086 -0.91827 0.36477 ↓

```

図 4 2. モノクロラミンの xyz ファイル

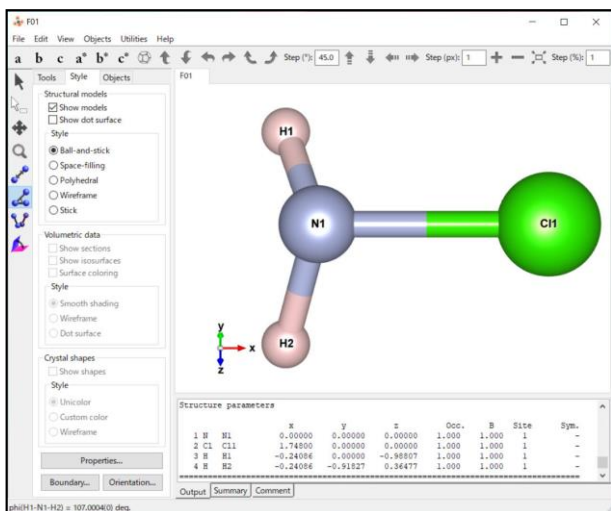


図 4 4. モノクロラミンの VESTA 画像

4-9. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH_2OH , CAS[7803-49-8])

ヒドロキシルアミン (図 4 5) の構造定数を表 9 に示す。

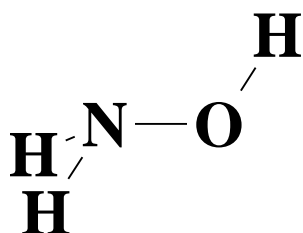


図 4 5. ヒドロキシルアミン
(H-N-H の二等分線と O-H は
トランスの位置にある)

表 9. ヒドロキシルアミンの構造定数

N-H	1.02 Å
N-O	1.453 Å
O-H	0.962 Å
∠HNH	107 °
∠HNO	103.3 °
∠NOH	101.4 °

2つの平面, $\triangle H-N-O$ のなす角度 (二面角) は,

$$2 \left(90 - \cos^{-1} \left(\frac{1.02 \sin \left(\frac{107}{2} \right)}{1.02 \cos(90 - (180 - 103.3))} \right) \right) = 111.3823359$$

と算出した.

ヒドロキシルアミンの Z 行列を図 4 6 に, xyz ファイルを図 4 7 に, f01 ファイルを図 4 8 に, VESTA 画像を図 4 9 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 hydroxylamine #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 O 1↓
6 N↓
7 O 1 r1↓
8 H 1 r2 2 a1↓
9 H 1 r2 2 a1 3 a2↓
10 X 1 r3 3 a3 4 a4↓
11 H 2 r4 1 a5 5 a6↓
12 Variables:↓
13 r1= 1.453↓
14 r2= 1.02↓
15 r3= 1↓
16 r4= 0.962↓
17 a1= 103.3↓
18 a2= 111.3823359↓
19 a3= 53.5↓
20 a4= 0↓
21 a5= 101.4↓
22 a6= 180↓
23 ↓

```

図 4 6. ヒドロキシルアミンの Z 行列

```

1 | Z | |NEQ| | X | | Y | | Z | ↓
2 | 7 | 1 | 0.00000 | 0.00000 | 0.00000 ↓
3 | 8 | 2 | 1.45300 | 0.00000 | 0.00000 ↓
4 | 1 | 3 | -0.23465 | 0.00000 | -0.99264 ↓
5 | 1 | 4 | -0.23465 | -0.92432 | 0.36191 ↓
6 | 1 | 5 | 1.64315 | 0.77895 | 0.53154 ↓
7 | ↓
8 | |NEQ| | CHG | |U/D| | RD | | VD | | 1 ↓
9 | ↓
10 | 0 | Unit | (0: Angstrom | 1: Atomic) ↓
11 | 0 | Spin | (0: Non-spin | 1: Spin ) ↓
12 | 0 | M.P. | (0: No | 1: Yes ) ↓
13 | 12500 | Sample point (<100000, = 0 Autoset) ↓

```

図 4 8. ヒドロキシルアミンの f01 ファイル

```

1 5↓
2 hydroxylamine #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 O 1.45300 0.00000 0.00000↓
5 H -0.23465 0.00000 -0.99264↓
6 H -0.23465 -0.92432 0.36191↓
7 H 1.64315 0.77895 0.53154↓

```

図 4 7. ヒドロキシルアミンの xyz ファイル

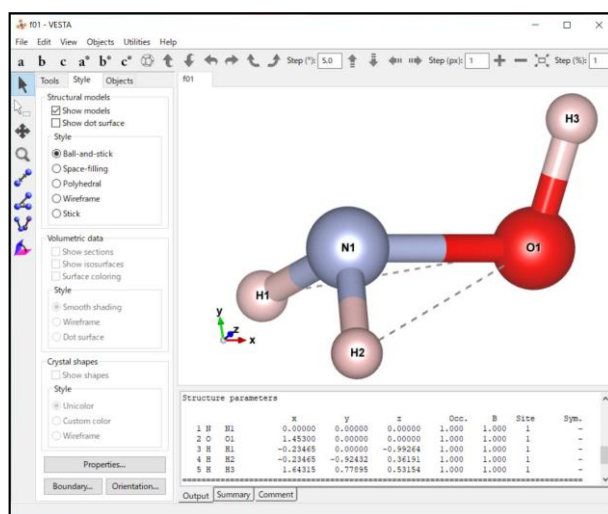


図 4 9. ヒドロキシルアミンの VESTA 画像

4-10. 塩化ニトロシル(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6])

塩化ニトロシル (図 5 0) の構造定数は, 表 1 0 に示す通りである.

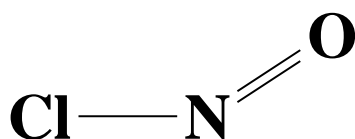


図 5 0. 塩化ニトロシル

表 1 0. 塩化ニトロシルの構造定数

N—Cl	1.9745 Å
N—O	1.1336 Å
∠ONCl	113.32 °

塩化ニトロシルの Z 行列を図 5 1 に, xyz ファイルを図 5 2 に, f01 ファイルを図 5 3 に, VESTA 画像を図 5 4 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 nitrosyl chloride #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 0 1 ↓
6 Cl ↓
7 N 1 r1 ↓
8 0 2 r2 1 a1 ↓
9 Variables: ↓
10 r1= 1.9745 ↓
11 r2= 1.1336 ↓
12 a1= 113.32 ↓
13 ↓

```

図 5 1. 塩化ニトロシルの Z 行列

	Z	NEQ	X	Y	Z
2	17	1	0.00000	0.00000	0.00000 ↓
3	7	2	1.97450	0.00000	0.00000 ↓
4	8	3	2.42325	0.00000	1.04099 ↓

	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	
8	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
9	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
10	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
11	7500	Sample point	(<100000, = 0 Autoset)			↓

図 5 3. 塩化ニトロシルの f01 ファイル

```

1 3 ↓
2 nitrosyl chloride #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
3 Cl 0.00000 0.00000 0.00000 ↓
4 N 1.97450 0.00000 0.00000 ↓
5 O 2.42325 0.00000 1.04099 ↓

```

図 5 2. 塩化ニトロシルの xyz ファイル

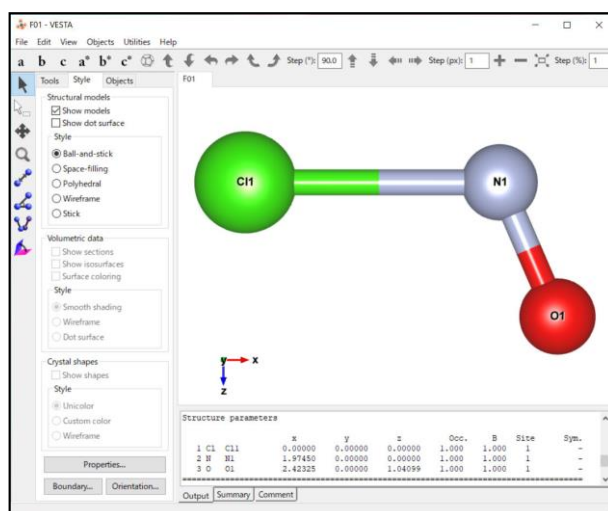


図 5 4. 塩化ニトロシルの VESTA 画像

4-11. フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5])

フッ化ニトロシル (図 5 5) の構造定数は, 表 1 1 に示す通りである.

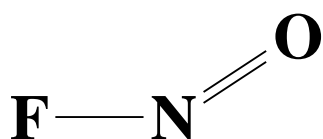


図 5 5. フッ化ニトロシル

表 1 1. フッ化ニトロシルの構造定数

O—N	1.1315 Å
N—F	1.5167 Å
∠FNO	109.92 °

フッ化ニトロシルの Z 行列を図 5 6 に, xyz ファイルを図 5 7 に, f01 ファイルを図 5 8 に, VESTA 画像を図 5 9 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitrosyl fluoride #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 F↓
7 N 1 r1↓
8 0 2 r2 1 a1↓
9 Variables:↓
10 r1= 1.5167↓
11 r2= 1.1315↓
12 a1= 109.92↓
13 ↓

```

図 5 6. フッ化ニトロシルの Z 行列

```

1 | Z || NEQ || X || Y || Z || ↓
2 | 9 1 0.0000 0.0000 0.0000↓
3 | 7 2 1.5167 0.0000 0.0000↓
4 | 8 3 1.9022 0.0000 1.0638↓
5 | ↓
6 | NEQ || CHG || U/D || RD || VD | 1↓
7 | ↓
8 | 0 Unit (0: Angstrom 1: Atomic)↓
9 | 0 Spin (0: Non-spin 1: Spin )↓
10 | 0 M.P. (0: No 1: Yes )↓
11 | 7500 Sample point (<100000, = 0 Autoset)↓

```

図 5 8. フッ化ニトロシルの f01 ファイル

```

1 3↓
2 nitrosyl fluoride #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 F 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 N 1.51670 0.00000 0.00000↓
5 O 1.90221 0.00000 1.06380↓

```

図 5 7. フッ化ニトロシルの xyz ファイル

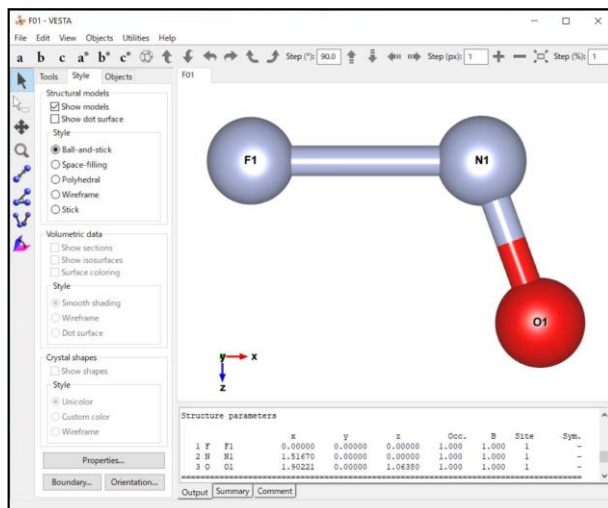


図 5 9. フッ化ニトロシルの VESTA 画像

4-12. 三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N_2O_3 , CAS[10544-73-7])

三酸化二窒素 (図 6 0) の構造定数は, 表 1 2 に示す通りである.

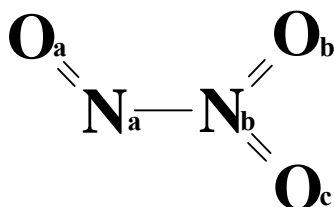


図 6 0. 三酸化二窒素

表 1 2. 三酸化二窒素の構造定数

$\text{N}_a - \text{N}_b$	1.864 Å
$\text{N}_a - \text{O}_a$	1.142 Å
$\text{N}_b - \text{O}_b$	1.202 Å
$\text{N}_b - \text{O}_c$	1.217 Å
$\angle \text{O}_a \text{N}_a \text{N}_b$	105.1 °
$\angle \text{N}_a \text{N}_b \text{O}_b$	112.7 °
$\angle \text{N}_a \text{N}_b \text{O}_c$	117.5 °

三酸化二窒素の Z 行列を図 6 1 に, xyz ファイルを図 6 2 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 dinitrogen trioxide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 N↓
7 N 1 r1↓
8 0 2 r2 1 a1↓
9 0 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 0 2 r4 1 a4 4 a5↓
11 Variables:↓
12 r1= 1.864↓
13 r2= 1.202↓
14 r3= 1.142↓
15 r4= 1.217↓
16 a1= 112.7↓
17 a2= 105.1↓
18 a3= 0↓
19 a4= 117.5↓
20 a5= 180↓
21 ↓

```

図 6 1. 三酸化二窒素の Z 行列

```

1 5↓
2 dinitrogen trioxide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 N 0.00000 0.00000 0.00000↓
4 N 1.86400 0.00000 0.00000↓
5 O 2.32786 0.00000 1.10889↓
6 O -0.29750 0.00000 1.10257↓
7 O 2.42595 -0.00000 -1.07949↓

```

図 6 2. 三酸化二窒素の xyz ファイル

三酸化二窒素の f01 ファイルを図 6 3 に、
VESTA 画像を図 6 4 に示す。

1	Z	NEQ	X	Y	Z	
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	7	2	1.86400	0.00000	0.00000	↓
4	8	3	2.32786	0.00000	1.10889	↓
5	8	4	-0.29750	0.00000	1.10257	↓
6	8	5	2.42595	0.00000	-1.07949	↓
7						↓
8	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
9						↓
10	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
11	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
12	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
13	12500	Sample point	(<100000,	= 0 Autoset)		↓

図 6 3. 三酸化二窒素の f01 ファイル

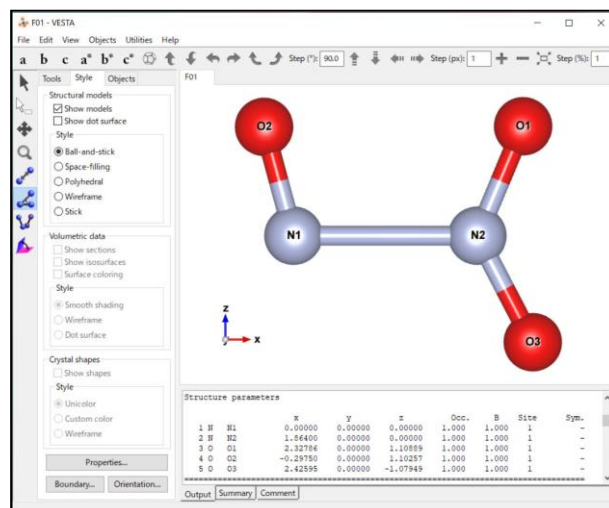


図 6 4. 三酸化二窒素の VESTA 画像

4-13. 一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S₂O, CAS[20901-21-7])

一酸化二硫黄 (図 6 5) の構造定数は、表 1 3 に示す通りである。

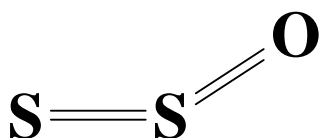


図 6 5. 一酸化二硫黄

表 1 3. 一酸化二硫黄の構造定数

S—S	1.8842 Å
S—O	1.4562 Å
∠SSO	117.88 °

一酸化二硫黄の Z 行列を図 6 6 に、xyz ファイルを図 6 7 に、f01 ファイルを図 6 8 に、VESTA 画像を図 6 9 に示す。

1	#CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.
2	↓
3	disulfur monoxide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)
4	↓
5	0 1↓
6	S↓
7	S 1 r1↓
8	0 2 r2 1 a1↓
9	Variables:↓
10	r1= 1.8842↓
11	r2= 1.4562↓
12	a1= 117.88↓
13	↓

図 6 6. 一酸化二硫黄の Z 行列

1	3↓
2	disulfur monoxide #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)
3	S 0.00000 0.00000 0.00000↓
4	S 1.88420 0.00000 0.00000↓
5	O 2.56515 0.00000 1.28718↓

図 6 7. 一酸化二硫黄の xyz ファイル

1	Z	NEQ	X	Y	Z	
2	16	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	16	2	1.88420	0.00000	0.00000	↓
4	8	3	2.56515	0.00000	1.28718	↓
5						↓
6	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
7						↓
8	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
9	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
10	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
11	7500	Sample point	(<100000,	= 0 Autoset)		↓

図 6 8. 一酸化二硫黄の f01 ファイル

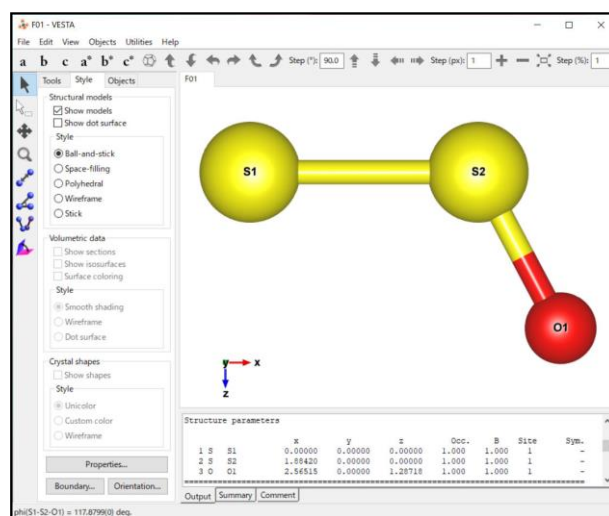


図 6 9. 一酸化二硫黄の VESTA 画像

5. eduDV メニューの改変

対称性軌道を使わない分子軌道計算を eduDV[1-18]に組み込むため、以下のファイルを改変、もしくは新規作成した。

5-1. eduDV.mac

```
1 $s = searchbuffer:↓
2 #f = searchoption:↓
3 ↓
4 menu↓
5 "01. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (二原子分子) ...",↓
6 "02. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (単体および無機分子) ...",↓
7 "03. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (有機化合物) ...",↓
8 "04. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (錯体) ...",↓
9 "05. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (有機金属化合物) ...",↓
10 "06. 点群で分子を選択 (構造定数自動入力) ...",↓
11 "07. 点群で分子を選択 (構造定数会話式手入力) ...",↓
12 "08. 孤立原子 (情報自動入力) ...",↓
13 "09. 孤立原子 (情報会話式手入力) ...",↓
14 "10. 孤立イオン (情報自動入力) ...",↓
15 "11. 孤立イオン (情報会話式手入力) ...",↓
16 ↓
17 if(result=1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥01menu.mac":↓
18 else if(result=2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02menu.mac":↓
19 else if(result=3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥03menu.mac":↓
20 else if(result=4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥04menu.mac":↓
21 else if(result=5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥05menu.mac":↓
22 else if(result=6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥06menu.mac":↓
23 else if(result=7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥07menu.mac":↓
24 else if(result=8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥08menu.mac":↓
25 else if(result=9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥09menu.mac":↓
26 else if(result=10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥10menu.mac":↓
27 else if(result=11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥11menu.mac":↓
28 setsearch $s, #f:↓
29 ↓
```

図 70. eduDV.mac (秀丸エディタマクロ)

昨年度の報告[13]で計画したとおり、eduDV のトップメニューを改変した。eduDV.mac を図 70 に、秀丸エディタ[33]で eduDV.mac を実行した画面を図 71 に示す。

01. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (二原子分子) ...
02. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (単体および無機分子) ...
03. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (有機化合物) ...
04. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (錯体) ...
05. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (有機金属化合物) ...
06. 点群で分子を選択 (構造定数自動入力) ...
07. 点群で分子を選択 (構造定数会話式手入力) ...
08. 孤立原子 (情報自動入力) ...
09. 孤立原子 (情報会話式手入力) ...
10. 孤立イオン (情報自動入力) ...
11. 孤立イオン (情報会話式手入力)...

図 71. eduDV のトップメニュー

5-2. 02menu.mac

```
1 $s = searchbuffer:↓
2 #f = searchoption:↓
3 ↓
4 menu↓
5 "02-001. イソシアヌ酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3])",↓
6 "02-002. イソチオシアヌ酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])",↓
7 "02-003. ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6])",↓
8 "02-004. 亜硝酸(nitrous acid, HNO2, CAS[7782-77-6])",↓
9 "02-005. 硝酸(nitric acid, HNO3, CAS[7697-37-2])",↓
10 "02-006. アジ化水素(hydrogen azide, HN3, CAS[7782-79-8])",↓
11 "02-007. ヒドロペルオキシラジカル(hydroperoxyl radical, HO2, CAS[3170-83-0])",↓
12 "02-008. モノクロラミン(monochloramine, NClH2, CAS[10599-90-3])",↓
13 "02-009. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH2OH, CAS[7803-49-8])",↓
14 "02-010. 塩化ニトロシル(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6])",↓
15 "02-011. フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5])",↓
16 "02-012. 三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N2O3, CAS[10544-73-7])",↓
17 "02-013. 一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S2O, CAS[20901-21-7])",↓
18 "【次の頁へ】",↓
19 ↓
20 if(result=1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-001.mac":↓
21 else if(result=2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-002.mac":↓
22 else if(result=3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-003.mac":↓
23 else if(result=4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-004.mac":↓
24 else if(result=5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-005.mac":↓
25 else if(result=6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-006.mac":↓
26 else if(result=7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-007.mac":↓
27 else if(result=8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-008.mac":↓
28 else if(result=9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-009.mac":↓
29 else if(result=10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-010.mac":↓
30 else if(result=11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-011.mac":↓
31 else if(result=12)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-012.mac":↓
32 else if(result=13)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02-013.mac":↓
33 else if(result=14)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02menu-2.mac":↓
34 setsearch $s, #f:↓
35 endmacro:↓
```

図 72. 02menu.mac (秀丸エディタマクロ)

図 71 のトップメニューの「02. 化合物名 (化学式) で分子を選択 (単体および無機分子) ...」をクリックすると、02menu.mac が実行される。02menu.mac を図 72 に、実行画面を図 73 に示す。

- 02-001. イソシアヌ酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3])
- 02-002. イソチオシアヌ酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])
- 02-003. ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6])
- 02-004. 亜硝酸(nitrous acid, HNO2, CAS[7782-77-6])
- 02-005. 硝酸(nitric acid, HNO3, CAS[7697-37-2])
- 02-006. アジ化水素(hydrogen azide, HN3, CAS[7782-79-8])
- 02-007. ヒドロペルオキシラジカル(hydroperoxyl radical, HO2, CAS[3170-83-0])
- 02-008. モノクロラミン(monochloramine, NClH2, CAS[10599-90-3])
- 02-009. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH2OH, CAS[7803-49-8])
- 02-010. 塩化ニトロシル(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6])
- 02-011. フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5])
- 02-012. 三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N2O3, CAS[10544-73-7])
- 02-013. 一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S2O, CAS[20901-21-7])
- 【次の頁へ】

図 73. 02menu.mac 実行画面

5-3. 02-009.mac

図 73 の画面で「02-009. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH₂OH, CAS[7803-49-8])」をクリックすると、02-009.mac が実行される。02-009.mac を図 74 に、実行画面を図 75 に示す。

```

1 $s = searchbuffer;↓
2 #f = searchoption;↓
3 ↓
4 menu↓
5 “ノンスピン(Nonspin)版 (通常はこちら)”↓
6 “スピン(Spin Polarization)版 (スピン分極を考慮に入れた計算)”↓
7 ↓
8 if(result==1)execmacro macrodir + “¥¥eduDV¥¥02-009-n.mac”;↓
9 else if(result==2)execmacro macrodir + “¥¥eduDV¥¥02-009-s.mac”;↓
10 setsearch $s, #f;↓
11 endmacro;↓

```

図 7 4. 02-009.mac (秀丸エディタマクロ)

5-4. 02-009-n.mac

```

1 $s = searchbuffer;↓
2 #f = searchoption;↓
3 ↓
4 loadll hidemurdir + “¥¥DengakuDLL.dll”; // 田楽DLLのロード↓
5 if (!result) {↓
6   message “DengakuDLL.dllをロードできませんでした。”;↓
7 }
8 ↓
9 $path_dvdir = getenv(“dvdir”);↓
10 $dirname = “02-001_” + year + month + day + hour + minute + second;↓
11 if (!dllfunc(“MKDIR”, “/p” + $path_dvdir + “¥¥CALC¥¥” + $dirname)) {↓
12   message “新規フォルダの作成に失敗しました。”;↓
13 }
14 ↓
15 if (!dllfunc(“SETCURDIR”, $path_dvdir + “¥¥CALC¥¥” + $dirname)) {↓
16   message “新規フォルダに移動できませんでした。”;↓
17 }
18 ↓
19 //シェルオブジェクトの作成↓
20 #n = createobject(“WScript.Shell”);↓
21 if (#n == 0) {↓
22   message “オブジェクトの作成に失敗しました。”;↓
23 }
24 ↓
25 //カレントフォルダの変更↓
26 setpropstr #n, “CurrentDirectory”, $path_dvdir + “¥¥CALC¥¥” + $dirname;↓
27 if (!result) {↓
28   message “カレントディレクトリの変更に失敗しました。”;↓
29 }
30 ↓
31 runsync2 $path_dvdir + “¥¥EXEC¥¥MENU-N.BAT 02 009”; // menu-n 02 009 の実行↓
32 readonlyopenfile “02-009_time.txt”;↓
33 openfile “f06z”;↓
34 openfile “f26”;↓
35 readonlyopenfile “bllist.out”;↓
36 readonlyopenfile “f08e”;↓
37 readonlyopenfile “F08E.hlgap”;↓
38 readonlyopenfile “F08E.hlgaps”;↓
39 readonlyopenfile “f08p”;↓
40 readonlyopenfile “F08P_S”;↓
41 readonlyopenfile “i08”;↓
42 openfile “f01”;↓
43 setsearch $s, #f;↓
44 endmacro;↓

```

図 7 6. 02-009-n.mac (秀丸エディタマクロ)

5-5. menu-n.bat, menu-s.bat

図 7 6 の 02-009-n.mac の 30 行目で、menu-n.bat が実行される。この時、二つの引数が menu-n.bat に渡される。

menu-n.bat 02 009

一つ目の引数は図 7 1 のトップメニューのメニュー番号、二つ目の引数は図 7 3 のメニューにおけるメニュー番号である。それぞれの引数は menu-n.bat の中で、%1, %2 として記述して使用できる。

図 7 5 のメニューで「スピン(Spin Polarization)版 (スピン分極を考慮に入れた計算)」をクリックした場合は 02-009-s.mac (本論文に内容は掲載していない) が実行されるが、その 30 行目

runsnc2 \$path_dvdir + “¥¥EXEC¥¥MENU-S.BAT 02 009”; // menu-s 02 009 の実行
では menu-s.bat が実行される。この時も menu-n.bat と同様、二つの引数が渡される。

menu-s.bat 02 009

図 7 8 に menu-n.bat を示す。

ノンスピン(Nonspin)版 (通常はこちら)
スピン(Spin Polarization)版 (スピン分極を考慮に入れた計算)

図 7 5. 02-009.mac 実行画面

図 7 5 の画面で「ノンスピン(Nonspin)版 (通常はこちら)」をクリックすると、02-009-n.mac が実行される。02-009-n.mac を図 7 6 に、実行後の秀丸エディタ画面を図 7 7 に示す。

図 7 7. 02-009-n.mac 実行後の秀丸エディタ画面

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----
001 @echo off
002 if exist f01 goto err1
003 if exist f25 goto err2
004 copy %dvd%Ydata%1-%2-n.txt f01
005 call %dvd%YexecYmakef05scfs
006 call %dvd%YexecYexistf05
007 if exist F05exist.txt goto fexist
008 goto err3
009 :fexist
010 del F05exist.txt
011 echo *****
012 echo          d          DDDD V V
013 echo          d          D D V V
014 echo eee          ddd u u D D V V
015 echo e a d          d u u D D V V
016 echo eeee          d d u u D D V V
017 echo e          d d u u D D V V
018 echo eeee          ddd uuu DDDD V
019 echo *****
020 echo NN N          ooo nnn S S pppp i          nnn
021 echo NN N          o o n n n S p p ii          n n
022 echo NN N          o o n n n S p p i          n n
023 echo NN N          o o n n n S p p i          n n
024 echo NN N          o o n n n S pppp i          n n
025 echo NN N          o o n n n S p          i          n n
026 echo N N          ooo n n SSS p          iii          n n
027 echo *****
028 echo SSS CCC A          TTTTT sss          t aaaa r rr          t
029 echo S S C C A A          T sss          t aaaa r rr          t
030 echo S C A A          T s s s ttttt a rr          r ttttt
031 echo S C A A          T s          t aaaa r          t
032 echo S C A A          T s          t a a r          t
033 echo S S C C A A          T s s t t a a r          t t
034 echo SSS CCC A A          T sss          t aa a r          t
035 echo *****
036 echo [%1-%2-Nonspin DV-Xalpha(SCAT) start] > %1-%2_time.txt
037 time < %dvd%YdataYreturn.key | find " " >> %1-%2_time.txt
038 goto scatrun
039 :scatrun
040 call %dvd%YexecYdvscat
041 if exist converge.bat goto del1
042 goto cont1
043 :del1
044 del converge.bat
045 goto cont1
046 :cont1
047 if exist convd.txt goto del2
048 goto cont2
049 :del2
050 del convd.txt
051 goto cont2
052 :cont2
053 if exist notconv.txt goto del3
054 goto cont3
055 :del3
056 del notconv.txt
057 goto cont3
058 :cont3
059 call %dvd%YexecYcnvchk150
060 call converge.bat
061 if exist convd.txt goto cont4
062 if exist notconv.txt goto cont4
063 del converge.bat
064 goto scatrun
065 :cont4
066 echo [%1-%2-Nonspin DV-Xalpha(SCAT) end] >> %1-%2_time.txt
067 time < %dvd%YdataYreturn.key | find " " >> %1-%2_time.txt
068 echo *****
069 echo SSS CCC A          TTTTT          d
070 echo S S C C A A          T          nnnn          d
071 echo S C A A          T          eee          n n dddd
072 echo S C A A          T          e e e          n n d d
073 echo S C A A          T          e e e          n n d d
074 echo S S C C A A          T          e          n n d d
075 echo SSS CCC A A          T          eeee          n n dddd
076 echo *****
077 del converge.bat
078 echo *****
079 echo CCC OOO NN N TTTTT RRRR DDDD A L L
080 echo C C O O NN N T R R D D A A L L
081 echo C C O O NN N T R R D D A A L L
082 echo C C O O NN N T RRRR D D A A L L
083 echo C C O O NN N T R R D D A A A A L L
084 echo C C O O NN N T R R D D A A L L
085 echo CCC OOO NN N T R R DDDD A A LLLL LLLL
086 echo *****
087 call %dvd%YexecYcontdall
088 dir/w *.sca
089 echo *****
090 echo NN N EEEEE TTTTT CCC
091 echo NN N E          T C C
092 echo NN N E          T C C
093 echo NN N EEEEE T C C
094 echo NN N E          T C C
095 echo NN N E          T C C
096 echo NN N EEEEE T CCC
097 echo *****
098 call %dvd%YexecYnetc
099 echo *****
100 echo BBBB NN N DDDD OOO DDDD RRRR
101 echo B B NN N D D O O D D R R
102 echo B B NN N D D O O D D R R
103 echo BBBB NN N D D O O D D RRRR
104 echo B B NN N D D O O D D R R
105 echo B B NN N D D O O D D R R
106 echo BBBB NN N DDDD OOO DDDD R R
107 echo *****
108 call %dvd%YexecYbndodr
109 echo *****
110 echo PPPP OOO PPPP A NN N L SSS
111 echo P P O O P P A A NN N L S S
112 echo P P O O P P A A NN N L S
113 echo PPPP O O PPPP A A NN N L S
114 echo P O O P AAAAA NN N L S
115 echo P O O P A A NN N L S S
116 echo P OOO P A A N N LLLL SSS
117 echo *****
118 call %dvd%YexecYpopanls
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----
119 rename F08P F08P S
120 echo *****
121 echo PPPP OOO PPPP A NN N L
122 echo P P O O P P A A NN N L
123 echo P P O O P P A A NN N L
124 echo PPPP O O PPPP A A NN N L
125 echo P O O P AAAAA NN N L
126 echo P O O P A A NN N L
127 echo P OOO P A A N N LLLL
128 echo *****
129 call %dvd%YexecYpopanl
130 echo *****
131 echo A TTTT L IIIII SSS TTTT
132 echo A A T L I S S T
133 echo A A T L I S S T
134 echo A A T L I S S T
135 echo AAAAA T L I S S T
136 echo A A T L I S S T
137 echo A A T LLLL IIIII SSS T
138 echo *****
139 call %dvd%YexecYatlist >atlist.out
140 echo *****
141 echo BBBB L L IIIII SSS TTTT
142 echo B B L L I S S T
143 echo B B L L I S S T
144 echo BBBB L L I S S T
145 echo B B L L I S S T
146 echo B B L L I S S T
147 echo BBBB LLLL LLLL IIIII SSS T
148 echo *****
149 call %dvd%YexecYbllist >bllist.out
150 echo *****
151 echo PPPP RRRR EEEEE SSS TTTT SSS
152 echo P P R R E S S T S S
153 echo P P R R E S T S S
154 echo PPPP RRRR EEEE S T S
155 echo P R R E S T S
156 echo P R R E S T S
157 echo P R R EEEEE SSS T SSS
158 echo *****
159 call %dvd%YexecYprests
160 echo *****
161 echo W W A V V NN N U U M M
162 echo W W A V V NN N U U M M
163 echo W W A V V NN N U U M M
164 echo W W A V V NN N U U M M
165 echo W W AAAAA V V NN N U U M M
166 echo W W A A V V NN N U U M M
167 echo W W A A V N N U U M M
168 echo *****
169 call %dvd%YexecYwavnum <%dvd%YdataYzero
170 echo *****
171 echo M M A K K EEEEE L 000 4
172 echo MM MM A A K K E L 0 0 44
173 echo M M A A K K E L 0 0 4 4
174 echo M M A A K K EEEE L 0 0 4 4
175 echo M M AAAAA K K E L 00 0 44444
176 echo M M A A K K E L 0 0 4
177 echo M M A A K K EEEEE LLLL 000 4
178 echo *****
179 call %dvd%YexecYmakel04 <%dvd%YdataYthree
180 echo *****
181 echo L V V L SSS H H M M
182 echo L V V L S S H H M M
183 echo L V V L S H H M M
184 echo L V V L S HHHH M M
185 echo L V V L S H H M M
186 echo L V V L S S H H M M
187 echo LLLL V LLLL SSS H H M M
188 echo *****
189 call %dvd%YexecYlvshtm
190 echo *****
191 echo H H L GGG A PPPP
192 echo H H L G G A P P
193 echo H H L G A A P P
194 echo HHHHH L GGG A A PPPP
195 echo H H L G G AAAAA P
196 echo H H L G G A A P
197 echo H H LLLL GGG A A P
198 echo *****
199 call %dvd%YexecYhlgap
200 echo *****
201 echo H H L GGG A PPPP SSS
202 echo H H L G G A A P P S S
203 echo H H L G A A P P S
204 echo HHHHH L GGG A A PPPP S
205 echo H H L G G AAAAA P S
206 echo H H L G G A A P S S
207 echo H H LLLL GGG A A P SSS
208 echo *****
209 call %dvd%YexecYhlgaps
210 type f08e
211 type f08e
212 if exist notconv.txt goto notconv
213 del convd.txt
214 goto end
215 :notconv
216 echo *****
217 echo *****
218 echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING **
219 echo *****
220 echo *** SCAT (NonSpin version) has not been converged yet. ***
221 echo *****
222 echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING **
223 echo *****
224 del notconv.txt
225 goto end
226 :err1
227 echo ***ERROR*** f01 already exist
228 goto end
229 :err2
230 echo ***ERROR*** f25 already exist
231 goto end
232 :err3
233 echo ***ERROR*** F05 not exist
234 goto end
235 :end
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----

```

図 7 8. menu-n.bat

5-6. 02-009-n.txt, 02-009-s.txt

図 7 8 の menu-n.bat の 4 行目が実行されると, 02-009-n.txt が f01 にコピーされる.

```
copy %dvd%YdataY%1-%2-n.txt f01
```

ここで%1 は 02, %2 は 009 である. 02-009-n.txt を図 7 9 に, 02-009-s.txt を図 8 0 に示す.

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	8	2	1.45300	0.00000	0.00000	↓
4	1	3	-0.23465	0.00000	-0.99264	↓
5	1	4	-0.23465	-0.92432	0.36191	↓
6	1	5	1.64315	0.77895	0.53154	↓
7						↓
8	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
9						↓
10	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
11	0	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
12	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
13	12500	Sample point	<100000, = 0 Autoset)			

図 7 9. 02-009-n.txt

1	Z	NEQ	X	Y	Z	↓
2	7	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	8	2	1.45300	0.00000	0.00000	↓
4	1	3	-0.23465	0.00000	-0.99264	↓
5	1	4	-0.23465	-0.92432	0.36191	↓
6	1	5	1.64315	0.77895	0.53154	↓
7						↓
8	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
9						↓
10	0	Unit	(0: Angstrom	1: Atomic)		↓
11	1	Spin	(0: Non-spin	1: Spin)		↓
12	0	M.P.	(0: No	1: Yes)		↓
13	12500	Sample point	<100000, = 0 Autoset)			

図 8 0. 02-009-s.txt

02-009-n.txt (図 7 9) の 11 行目では Spin = 0 となっているのに対し, 02-009-s.txt (図 8 0) の 11 行目では Spin = 1 となっている。

6. おわりに

化学便覧[39]に掲載されている分子の構造定数より, 13 種類の無機分子の原子座標を計算し, eduDV[1-18]に組み込んだ。筆者らは本学理学部化学科, 理学部応用物理学科, 理学部生物化学科, 理学部臨床生命科学科, 理学部動物学科, 生物地球学部生物地球学科の「化学基礎実験」, および本学工学部電気電子システム学科, 工学部知能機械工学科, 工学部工学プロジェクトコースの「化学実験」を担当しているが, これらの実験科目の中で, 今回組み込んだ 13 種類の無機分子のうちのいくつかを, 学生が実際に取り扱っている[41]。

(1) 実験テーマ: 金属と強酸, 強塩基との反応

実験内容: 亜鉛または銅が入った試験管に希硝酸または濃硝酸を加えると反応する。

eduDV 登録: 硝酸(nitric acid, HNO₃, CAS[7697-37-2])

(2) 実験テーマ: 第 3 属陽イオンの反応と系統的分離確認法 (陽イオンの系統分離)

実験内容: Fe³⁺を含む溶液にチオシアン酸アンモニウムを加えると, 色が血赤色になる。

eduDV 登録: イソチオシアン酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])

(3) 実験テーマ: *o*-フェナントロリンを用いる鉄(II)イオン Fe²⁺の定量 (吸光光度法分析)

実験内容: Fe²⁺を含む溶液に, 塩酸ヒドロキシルアミン水溶液, *o*-フェナントロリン水溶液, 酢酸-酢酸ナトリウム緩衝液を加え, 分光光度計で $\lambda = 510 \text{ nm}$ の吸光度を測定し, 検量線により Fe²⁺の濃度を決定する。

eduDV 登録: ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH₂OH, CAS[7803-49-8])

将来的には「化学基礎実験」, 「化学実験」の実験テーマの一つとして「分子の量子化学計算」を取り上げることを検討している。本学情報処理センターのパソコン実習室のすべてのパソコンには eduDV がインストールしてあり, 実験科目でも利用できる。実験科目で実際に取り扱った試薬の分子を, 学生自ら eduDV で電子状態計算することにより, 分子レベルで試薬の性質が理解できる可能性がある。

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, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (8)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **38**, 1-20 (2017).
- [13] 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (9)”, *岡山理科大学情報処理センター研究報告*, **39**, 1-20 (2018).
- [14] 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>
- [15] 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 (2018), <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [16] 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
- [17] 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.
- [18] 아다치 히로히코, 오가사와라 카즈요시, 코와다 요시유키, 사카네 겐타, 미즈노 마사타카, 역자: 김양수, 김영민, 송호준, 조덕용, “신판 처음 배우는 전자상태 계산 (DV- $X\alpha$ 분자궤도법 입문)”, 전북대학교출판문화원 (全北大学出版文化院), 2019 年.
- [19] 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).

- [20] 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.
- [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] 足立裕彦, 森永正彦, 那須三郎, “金属材料の量子化学と量子合金設計”, 三共出版 1997 年.
- [23] 足立裕彦, 田中功, “量子材料学の初歩”, 三共出版 1998 年.
- [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] 足立裕彦, “量子材料化学の基礎”, 三共出版 2017 年.
- [26] 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 $[\text{Mo}_3\text{X}_4(\text{H}_2\text{O})_9]^{4+}$ (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).
- [27] 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 $[\text{Mo}_3\text{MS}_4(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{4+}$ (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).
- [28] 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).
- [29] 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).
- [30] 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).
- [31] 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).
- [32] “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 2.04,
http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/dvxa_assistance_environment_2.html
- [33] 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>
- [34] 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
- [35] 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>
- [36] 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
- [37] Tim Clark 著, 大澤映二, 田辺和俊, 水野正城, 杉江正昭 共訳, “計算化学ガイドブック－3 大分子計算プログラムの解説”, 丸善 1988 年.
- [38] Open Babel: The Open Source Chemistry Toolbox, http://openbabel.org/wiki/Main_Page
- [39] 日本化学会編, “改定 5 版 化学便覧 基礎編 II”, 丸善 2004 年.
- [40] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>
- [41] 佐藤幸子, 青木宏之, 高原周一, 坂根弦太, “岡山理科大学 理科教育センター 化学実験－手引きと演習－第 10 版”, 岡山理科大学 理科教育センター 化学系 2018 年.