

教育用分子軌道計算システム eduDV の開発

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

化学の土台となる電子の本当の姿を理解するには、量子力学に基づく原子や分子の電子状態を理解しなければならない。これを取り扱う量子化学は、理系の大学に入った学生にとって基礎化学の中でも際立って学習が困難な項目である。学生は高等学校で習った電子の惑星モデル（長岡半太郎やラザフォードの原子模型）の概念（図1）を捨て、シュレディンガー方程式を解いて得られる原子軌道関数について学ぶ。しかし初めて目にする記号や方程式に途惑い、その具体的なイメージを抱けずに化学に対する興味を失ってしまう学生も少なくない。

大学教員にとっても、主量子数、方位量子数、磁気量子数で決まる周期表の各元素の原子軌道、およびその原子軌道を線形結合して得られる分子軌道の三次元的なイメージおよびそれらのエネルギー準位について、限られた講義時間内で学生に正確に把握させることは、教科書や黑板への板書だけでは極めて困難である。例えば $2p_x$ 軌道を例にとると、教科書[1]の図（図2）は、本稿で紹介するシステムで描いた図（図3）とはかなり違っている。

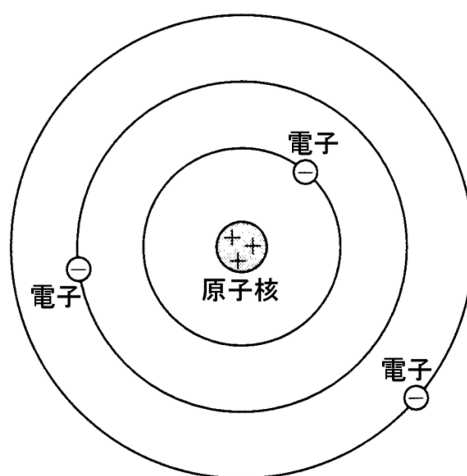


図1 高等学校で学ぶ電子のイメージ

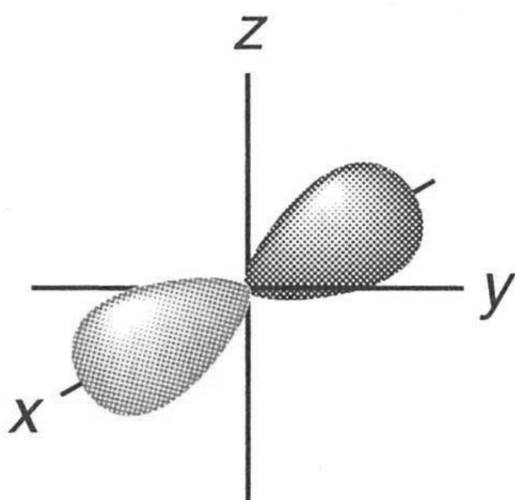


図2 大学の教科書に掲載されている波動関数

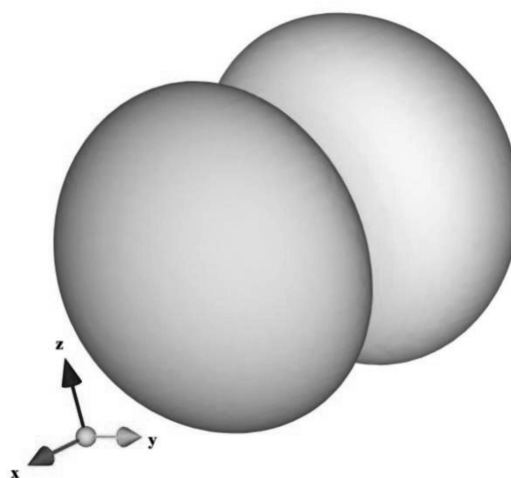


図3 本稿のシステムで計算・表示した波動関数

物性物理や材料科学分野研究の第一線で使われている分子軌道計算プログラムに DV-X α 法がある[2]. 周期表全元素を同じ精度で取り扱うことができ、比較的大きな分子であっても普通のパソコンで短時間かつ精度よく電子状態を計算できる[3]. 最新の実行ファイルはウェブからダウンロードし、教育研究用には無償で使える[4]. さらにシェアウェアである秀丸エディタ[5]をインストールし(アカデミックフリー制度があり、学校内に設置しているパソコンで学生が利用する場合は、申請により適用される)、泉富士夫氏が開発した秀丸エディタマクロ集“DV-X α 法計算支援環境”[6]を組み込むことにより GUI で DV-X α 法が利用できるようになる[7]. 泉富士夫氏、門馬綱一氏が開発した“結晶構造、及び電子・核密度等の三次元可視化プログラム VESTA”[8]をダウンロード[9]・インストールすれば、DV-X α 法で計算した波動関数、電子密度、静電ポテンシャルなどを三次元可視化できるようになる[7].

量子化学計算に熟練した研究者が使用するには以上の環境で十分だが、大学1・2年次生に講義時間内でこれを操作させるのは以下に挙げる理由により困難である.

- ・ CP/M-86 や MS-DOS など、Character-based User Interface(CUI)の OS でパソコンを使っていた世代とは異なり、現在の学生は、最初に触れたパソコンからすでに Windows など Graphical User Interface(GUI)を実装した OS であった世代である. インターネットのWWWブラウザ、ワープロ・表計算ソフト、プレゼンテーションソフトなどは高等学校「情報」の授業および大学での「パソコン入門」系の講義で簡単な操作法は修得しているものの、化学系の学生では unix を扱うこともなく、プログラミングの経験もほとんどない. CUI でコンピュータを操作したという経験がほとんど無いため、簡単な MS-DOS コマンドはもとより、ファイル(テキストファイル、バイナリファイル)やディレクトリ(フォルダ)のツリー構造などの概念が構築されていない学生が多い. Fortran77 も学んだことがないためファイルの入出力、実数型や整数型の書式、ファイルの種類(テキスト、バイナリ)、装置番号というような概念がない. しかし DV-X α 分子軌道計算プログラムの計算環境は、Windows のコマンドプロンプトで作業していく CUI をベースとしたシステムであり、計算作業ディレクトリを作成したりファイルをコピーしたりするなどの必要最低限の MS-DOS コマンドは修得している必要がある. また DV-X α 分子軌道計算プログラム本体は Fortran77 で書かれているため、その入力ファイルをエディタ等で準備するにあたっては、必要最低限の Fortran の書式の概念(実数型・整数型・指数型・文字型変数記述子など)も必要である. これらを授業の中で最初から説明していると、それだけで数時間を要し、情報リテラシーの授業になってしまう(それはそれで意味のある教育ではあるが).

- ・ DV-X α 分子軌道計算プログラムの入力ファイル F01 を作成するのに、直線型の窒素分子、一酸化炭素分子、二酸化炭素分子程度ならまだしも、水分子やアンモニア分子やメタン分子となってくると、その座標を求めるだけでかなりの時間を要する. 例えば三角関数が分かっていない学生が多い場合、まるで数学の幾何の授業のようになってしまう(それはそれで重要な教育ではあるが). パソコン画面上で三次元的に分子の棒球モデルを表示することにより分子を構築して座標を自動出力するなら問題ないであろうが、紙と鉛筆だけで三次元的な分子の座標を自分で算出することができない学生は多い.

- ・ 無機化学や量子化学などの教科書に掲載されている小分子や単核錯体の分子軌道エネルギー準位図には、その分子・錯体の対称性(属する点群)に基づく分子軌道の名称がついている. 学生に点群の指標

表の重要性を実感させるためにも、縮退するはずの分子軌道はきちんと縮退させるためにも、正しい対称軌道(F25)を入れて DV-X α 分子軌道計算を行いたいが、DV-X α 用の対称軌道作成プログラム symOrb (「はじめての電子状態計算[3]」添付 CD-ROM に同梱)を動かすためには Mathematica が必要である。しかし Mathematica は高価であり、学校現場のパソコンにはインストールされていないことが多い(化学系研究室でも持っていないことが多い)。

そこで筆者は、限られた講義時間内で高校生でも大学生でも、何の予備知識もなしに、いきなり周期表元素の原子軌道や、教科書に掲載されている様々な分子の分子軌道を自ら計算して、電子(波動関数)の形状やそのエネルギーを眺めることができる“教育用分子軌道計算システム eduDV” [10]の開発に着手した。今年度はバグフィックス、コンパイラーのバージョンアップに伴う再コンパイル作業を行うと共にマニュアル[11]の整備、論文発表[12]による啓蒙・普及活動に努めた。

マニュアル[11]に従ってダウンロード[13]・インストールすれば環境は整う。岡山理科大学情報処理センターの学生実習用の全パソコンには DV-X α 法[4]、秀丸エディタ[5]、DV-X α 法計算支援環境[6]、VESTA[9]、eduDV[13]がインストールされており、筆者の担当する講義・実習で大いに活用している。

2. 開発環境

情報処理センターより貸与されたノートパソコン(東芝 Dynabook SS 2010 DS86P/2, CPU: Mobile Intel Pentium III 866 MHz, RAM: 256 MB, OS: Windows 2000 Service Pack 4)に Open Watcom Fortran77 compiler (Version 1.9)[14]をインストールした環境を用いた。

3. プログラム構成

教育用分子軌道計算システム eduDV は、以下のプログラム群から構成されており、筆者のウェブサイト[13]よりダウンロードできる。

3-1. Fortran 77 ソースプログラム

01. atom.f	143,202 B	21. cnvchk200.f	2,550 B
02. atomn.f	143,378 B	22. cnvchk250.f	2,550 B
03. c2v12.f	4,253 B	23. cnvchk300.f	2,550 B
04. c2v12n.f	4,369 B	24. cnvchk50.f	2,549 B
05. c2v12s.f	4,365 B	25. cscafix.f	2,693 B
06. c3edfix.f	1,987 B	26. d3h13.f	3,728 B
07. c3v13.f	4,605 B	27. d3h13n.f	3,812 B
08. c3v13n.f	4,721 B	28. d3h13s.f	3,736 B
09. c3v13s.f	4,717 B	29. d4h14.f	4,278 B
10. c8v11.f	3,395 B	30. d4h14n.f	4,291 B
11. c8v111.f	4,290 B	31. d4h14s.f	4,287 B
12. c8v1111.f	4,894 B	32. d6h66.f	5,491 B
13. c8v1111n.f	4,972 B	33. d6h66n.f	5,504 B
14. c8v1111s.f	4,968 B	34. d6h66s.f	5,500 B
15. c8v111n.f	4,369 B	35. d8h12.f	3,628 B
16. c8v111s.f	4,365 B	36. d8h12n.f	3,709 B
17. c8v11n.f	3,476 B	37. d8h12s.f	3,705 B
18. c8v11s.f	3,472 B	38. d8h2.f	3,212 B
19. cnvchk100.f	2,550 B	39. d8h22.f	4,004 B
20. cnvchk150.f	2,550 B	40. d8h22n.f	4,084 B

41. d8h22s.f	4,080 B	63. ml6s.f	4,615 B
42. d8h2n.f	3,239 B	64. molda2dv.f	6,203 B
43. d8h2s.f	3,235 B	65. oh16.f	4,174 B
44. dv2chem3d.f	3,510 B	66. oh166.f	5,454 B
45. dv2daph.f	10,436 B	67. oh166n.f	5,571 B
46. dv2f01.f	7,414 B	68. oh166s.f	5,567 B
47. dv2molda.f	6,724 B	69. oh16n.f	4,239 B
48. endsts.f	3,264 B	70. oh16s.f	4,235 B
49. existf05.f	1,034 B	71. p3edadd.f	2,076 B
50. f01add.f	2,587 B	72. p3edfix.f	2,210 B
51. hlgap.f	2,365 B	73. prests.f	2,874 B
52. hlgaps.f	3,802 B	74. prests2.f	1,336 B
53. ion.f	145,533 B	75. prestsL.f	2,876 B
54. ionn.f	145,534 B	76. pscaadd.f	2,544 B
55. mh2o6.f	6,016 B	77. pscafix.f	2,957 B
56. mh2o6n.f	6,141 B	78. read36.f	13,325 B
57. mh2o6s.f	6,137 B	79. td14.f	3,920 B
58. ml4.f	4,357 B	80. td144.f	4,907 B
59. ml4n.f	4,369 B	81. td144n.f	5,024 B
60. ml4s.f	4,365 B	82. td144s.f	5,020 B
61. ml6.f	4,607 B	83. td14n.f	3,985 B
62. ml6n.f	4,619 B	84. td14s.f	3,981 B

3-2. Open Watcom Fortran 77 Version 1.9 等でコンパイルした実行ファイル

01. atom.exe	34. d6h66s.exe	67. mh2o6.exe
02. atomn.exe	35. d8h12.exe	68. mh2o6n.exe
03. c2v12.exe	36. d8h12n.exe	69. mh2o6s.exe
04. c2v12n.exe	37. d8h12s.exe	70. ml4.exe
05. c2v12s.exe	38. d8h2.exe	71. ml4n.exe
06. c3edfix.exe	39. d8h22.exe	72. ml4s.exe
07. c3v13.exe	40. d8h22n.exe	73. ml6.exe
08. c3v13n.exe	41. d8h22s.exe	74. ml6n.exe
09. c3v13s.exe	42. d8h2n.exe	75. ml6s.exe
10. c8v11.exe	43. d8h2s.exe	76. molda2dv.exe
11. c8v111.exe	44. dv2chem3d.exe	77. ncontrd.exe
12. c8v1111.exe	45. dv2daph.exe	78. ncontrdall.exe
13. c8v1111n.exe	46. dv2f01.exe	79. nmakec04d.exe
14. c8v1111s.exe	47. dv2molda.exe	80. oh16.exe
15. c8v111n.exe	48. endsts.exe	81. oh166.exe
16. c8v111s.exe	49. existf05.exe	82. oh166n.exe
17. c8v11n.exe	50. f01add.exe	83. oh166s.exe
18. c8v11s.exe	51. gcontrd.exe	84. oh16n.exe
19. cnvchk100.exe	52. gcontrdall.exe	85. oh16s.exe
20. cnvchk150.exe	53. gmakec04d.exe	86. p3edadd.exe
21. cnvchk200.exe	54. hcontrd.exe	87. p3edfix.exe
22. cnvchk250.exe	55. hcontrdall.exe	88. prests.exe
23. cnvchk300.exe	56. hlgap.exe	89. prests2.exe
24. cnvchk50.exe	57. hlgaps.exe	90. prestsL.exe
25. cscafix.exe	58. hmakec04d.exe	91. pscaadd.exe
26. d3h13.exe	59. icontrd.exe	92. pscafix.exe
27. d3h13n.exe	60. icontrdall.exe	93. read36.exe
28. d3h13s.exe	61. imakec04d.exe	94. scontrd.exe
29. d4h14.exe	62. ion.exe	95. scontrdall.exe
30. d4h14n.exe	63. ionn.exe	96. smakec04d.exe
31. d4h14s.exe	64. jcontrd.exe	97. td14.exe
32. d6h66.exe	65. jcontrdall.exe	98. td144.exe
33. d6h66n.exe	66. jmakec04d.exe	99. td144n.exe

100. td144s.exe	105. umakec04d.exe	110. xcontrdall.exe
101. td14n.exe	106. wcontrd.exe	111. xmakec04d.exe
102. td14s.exe	107. wcontrdall.exe	112. ycontrd.exe
103. ucontrd.exe	108. wmakec04d.exe	113. ycontrdall.exe
104. ucontrdall.exe	109. xcontrd.exe	114. ymakec04d.exe

※ gcontrd.exe, gcontrdall.exe, gmakec04d.exe, hcontrd.exe, hcontrdall.exe, hmakec04d.exe, icontrd.exe, icontrdall.exe, imakec04d.exe, jcontrd.exe, jcontrdall.exe, jmakec04d.exe, ncontrd.exe, ncontrdall.exe, nmakec04d.exe, scontrd.exe, scontrdall.exe, smakec04d.exe, ucontrd.exe, ucontrdall.exe, umakec04d.exe, wcontrd.exe, wcontrdall.exe, wmakec04d.exe, xcontrd.exe, xcontrdall.exe, xmakec04d.exe, ycontrd.exe, ycontrdall.exe, ymakec04d.exe は、大阪大学の水野正隆先生からご提供（使用許可）いただいたプログラムである。

3-3. Open Watcom Fortran 77 Version 1.9 でのコンパイル実行バッチファイル

01. latom.bat	29. ld4h14.bat	57. lmh2o6s.bat
02. latomn.bat	30. ld4h14n.bat	58. lml4.bat
03. lc2v12.bat	31. ld4h14s.bat	59. lml4n.bat
04. lc2v12n.bat	32. ld6h66.bat	60. lml4s.bat
05. lc2v12s.bat	33. ld6h66n.bat	61. lml6.bat
96. lc3edfix.bat	34. ld6h66s.bat	62. lml6n.bat
07. lc3v13.bat	35. ld8h12.bat	63. lml6s.bat
08. lc3v13n.bat	36. ld8h12n.bat	64. lmolda2dv.bat
09. lc3v13s.bat	37. ld8h12s.bat	65. loh16.bat
10. lc8v11.bat	38. ld8h2.bat	66. loh166.bat
11. lc8v111.bat	39. ld8h22.bat	67. loh166n.bat
12. lc8v1111.bat	40. ld8h22n.bat	68. loh166s.bat
13. lc8v1111n.bat	41. ld8h22s.bat	69. loh16n.bat
14. lc8v1111s.bat	42. ld8h2n.bat	70. loh16s.bat
15. lc8v111n.bat	43. ld8h2s.bat	71. lp3edadd.bat
16. lc8v111s.bat	44. ldv2chem3d.bat	72. lp3edfix.bat
17. lc8v11n.bat	45. ldv2daph.bat	73. lprests.bat
18. lc8v11s.bat	46. ldv2f01.bat	74. lprests2.bat
19. lcnvchk100.bat	47. ldv2molda.bat	75. lprestsL.bat
20. lcnvchk150.bat	48. lendsts.bat	76. lpscaadd.bat
21. lcnvchk200.bat	49. lexistf05.bat	77. lpscafix.bat
22. lcnvchk250.bat	50. lf01add.bat	78. lread36.bat
23. lcnvchk300.bat	51. lhlgap.bat	79. ltd14.bat
24. lcnvchk50.bat	52. lhlgaps.bat	80. ltd144.bat
25. lcscifix.bat	53. lion.bat	81. ltd144n.bat
26. ld3h13.bat	54. lionn.bat	82. ltd144s.bat
27. ld3h13n.bat	55. lmh2o6.bat	83. ltd14n.bat
28. ld3h13s.bat	56. lmh2o6n.bat	84. ltd14s.bat

3-4. プログラム実行バッチファイル

01. a2.bat	15. abcn.bat	29. c8v11.bat
02. a2b2.bat	16. abcs.bat	30. c8v111.bat
03. a2b2n.bat	17. abn.bat	31. c8v1111.bat
04. a2b2s.bat	18. abs.bat	32. c8v1111n.bat
05. a2n.bat	19. atom.bat	33. c8v1111s.bat
06. a2s.bat	20. atomn.bat	34. c8v111n.bat
07. ab.bat	21. atoms.bat	35. c8v111s.bat
08. ab2.bat	22. c2v12.bat	36. c8v11n.bat
09. ab2n.bat	23. c2v12n.bat	37. c8v11s.bat
10. ab2s.bat	24. c2v12s.bat	38. cnvchk100.bat
11. abc.bat	25. c3edfix.bat	39. cnvchk150.bat
12. abcd.bat	26. c3v13.bat	40. cnvchk200.bat
13. abcdn.bat	27. c3v13n.bat	41. cnvchk250.bat
14. abcds.bat	28. c3v13s.bat	42. cnvchk300.bat

43. cnvchk50.bat	65. dv2chem3d.bat	87. molda2dv.bat
44. contrd.bat	66. dv2daph.bat	88. oh16.bat
45. contrdall.bat	67. dv2f01.bat	89. oh166.bat
46. cscafix.bat	68. dv2molda.bat	90. oh166n.bat
47. d3h13.bat	69. endsts.bat	91. oh166s.bat
48. d3h13n.bat	70. existf05.bat	92. oh16n.bat
49. d3h13s.bat	71. f01add.bat	93. oh16s.bat
50. d4h14.bat	72. hlgap.bat	94. p3edadd.bat
51. d4h14n.bat	73. hlgaps.bat	95. p3edfix.bat
52. d4h14s.bat	74. ion.bat	96. prests.bat
53. d6h66.bat	75. ionn.bat	97. prests2.bat
54. d6h66n.bat	76. makec04d.bat	98. prestsL.bat
55. d6h66s.bat	77. makeEduDV.bat	99. pscaadd.bat
56. d8h12.bat	78. mh2o6.bat	100. pscafix.bat.
57. d8h12n.bat	79. mh2o6n.bat	101. read36.bat.
58. d8h12s.bat	80. mh2o6s.bat	102. td14.bat.
59. d8h2.bat	81. ml4.bat	103. td144.bat.
60. d8h22.bat	82. ml4n.bat	104. td144n.bat.
61. d8h22n.bat	83. ml4s.bat	105. td144s.bat.
62. d8h22s.bat	84. ml6.bat	106. td14n.bat.
63. d8h2n.bat	85. ml6n.bat	107. td14s.bat.
64. d8h2s.bat	86. ml6s.bat	

※contrd.bat, contrdall.bat, makec04d.bat は、大阪大学の水野正隆先生からご提供（使用許可）いただいたプログラムである。

3-5. データファイル

01. 1.b05	24. 30.b05	47. 51.b05	70. 72.b05	93. 93.b05
02. 10.b05	25. 31.b05	48. 52.b05	71. 73.b05	94. 94.b05
03. 11.b05	26. 32.b05	49. 53.b05	72. 74.b05	95. atomf
04. 12.b05	27. 33.b05	50. 54.b05	73. 75.b05	96. c2v12
05. 13.b05	28. 34.b05	51. 55.b05	74. 76.b05	97. c3v13
06. 14.b05	29. 35.b05	52. 56.b05	75. 77.b05	98. c8v11
07. 15.b05	30. 36.b05	53. 57.b05	76. 78.b05	99. c8v111
08. 16.b05	31. 37.b05	54. 58.b05	77. 79.b05	100. c8v1111
09. 17.b05	32. 38.b05	55. 59.b05	78. 8.b05	101. d3h13
10. 18.b05	33. 39.b05	56. 6.b05	79. 80.b05	102. d4h14
11. 19.b05	34. 4.b05	57. 60.b05	80. 81.b05	103. d6h66
12. 2.b05	35. 40.b05	58. 61.b05	81. 82.b05	104. d8h12
13. 20.b05	36. 41.b05	59. 62.b05	82. 83.b05	105. d8h2
14. 21.b05	37. 42.b05	60. 63.b05	83. 84.b05	106. d8h22
15. 22.b05	38. 43.b05	61. 64.b05	84. 85.b05	107. mh2o6
16. 23.b05	39. 44.b05	62. 65.b05	85. 86.b05	108. oh16
17. 24.b05	40. 45.b05	63. 66.b05	86. 87.b05	109. oh166
18. 25.b05	41. 46.b05	64. 67.b05	87. 88.b05	110. one
19. 26.b05	42. 47.b05	65. 68.b05	88. 89.b05	111. td14
20. 27.b05	43. 48.b05	66. 69.b05	89. 9.b05	112. td144
21. 28.b05	44. 49.b05	67. 7.b05	90. 90.b05	113. three
22. 29.b05	45. 5.b05	68. 70.b05	91. 91.b05	114. two
23. 3.b05	46. 50.b05	69. 71.b05	92. 92.b05	115. zero

3-6. 秀丸エディタマクロ (秀丸エディタマクロ集 “DV-X α 法計算支援環境” [6]に同梱)

01. eduDV.mac

02. a2.mac	28. atomn.mac	54. mh2o6n.mac
03. a2b2.mac	29. c2v12.mac	55. mh2o6s.mac
04. a2b2menu.mac	30. c2v12menu.mac	56. ml4.mac
05. a2b2n.mac	31. c2v12n.mac	57. ml4menu.mac
06. a2b2s.mac	32. c2v12s.mac	58. ml4n.mac
07. a2menu.mac	33. c3v13.mac	59. ml4s.mac
08. a2n.mac	34. c3v13menu.mac	60. ml6.mac
09. a2s.mac	35. c3v13n.mac	61. ml6menu.mac
10. ab.mac	36. c3v13s.mac	62. ml6n.mac
11. ab2.mac	37. d3h13.mac	63. ml6s.mac
12. ab2menu.mac	38. d3h13menu.mac	64. oh16.mac
13. ab2n.mac	39. d3h13n.mac	65. oh166.mac
14. ab2s.mac	40. d3h13s.mac	66. oh166menu.mac
15. abc.mac	41. d4h14.mac	67. oh166n.mac
16. abcd.mac	42. d4h14menu.mac	68. oh166s.mac
17. abcdmenu.mac	43. d4h14n.mac	69. oh16menu.mac
18. abcdn.mac	44. d4h14s.mac	70. oh16n.mac
19. abcds.mac	45. d6h66.mac	71. oh16s.mac
20. abcmenu.mac	46. d6h66menu.mac	72. td14.mac
21. abcn.mac	47. d6h66n.mac	73. td144.mac
22. abcs.mac	48. d6h66s.mac	74. td144menu.mac
23. abmenu.mac	49. ion.mac	75. td144n.mac
24. abn.mac	50. ionmenu.mac	76. td144s.mac
25. abs.mac	51. ionn.mac	77. td14menu.mac
26. atom.mac	52. mh2o6.mac	78. td14n.mac
27. atommenu.mac	53. mh2o6menu.mac	79. td14s.mac

4. 講義での使用例

Windows パソコンの基本的な操作は学生全員が習得している。パソコン実習室で一人一台のパソコンを用い、講義を進めていく。本学の学生実習用パソコンは起動するたびにハードディスク内容が初期状態に戻るので、秀丸エディタを他用途で使う場合を想定し、DV-X α 法計算支援環境の C:\¥dvxa¥Macro¥SCAT.reg を秀丸エディタで読み込む作業は毎回行う必要がある。秀丸エディタのその他(O)→設定内容の保存/復元(U)... で SCAT.reg を読み込むと、教育用分子軌道計算システム eduDV が実行できる状態になる。

秀丸エディタのウィンドウには、DV-X α 法関係の多種多様なプログラムがボタン(ツールバー、ファンクションキー)、プルダウンメニュー、ポップアップメニュー(ユーザーメニュー)、キーボード・ショートカットという形で登録されており、ユーザーは GUI 操作を通じて一連の計算・可視化を実行できる。講義では eduDV ボタンと VESTA ボタンのみを使う (図 4)。

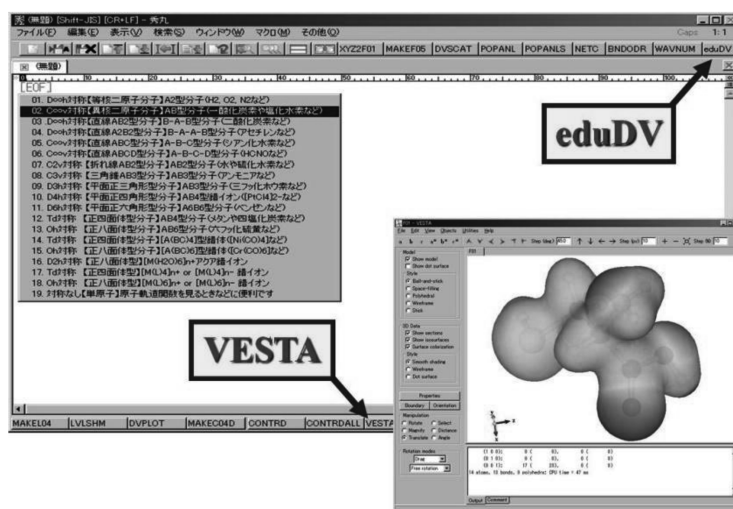


図 4 eduDV ボタンと VESTA ボタン

eduDV ボタンを押すと、20 項目のプルダウンメニュー (図 5) が現れる。eduDV には、単原子、単原子イオン、分子、錯体、錯イオンの形 (点群対称) の違いによる別個のシステムが 20 種類用意されており、システムを選択・起動した後は、必要最低限の情報 (原子番号や原子間距離、必要に応じて結合角や酸化数) を会話形式で入力していくだけで、DV-X α 法本体プログラムおよび各種ユーティリティプログラムが全自動で実行される。対称軌道ファイルがシステムに内蔵されているため、分子軌道の縮退もきちんと取り扱われ、分子軌道には教科書と同様の正式な名称が付与される。

01. D ∞ h対称【等核二原子分子】A $_2$ 型分子(H $_2$, O $_2$, N $_2$ など)...
02. C ∞ v対称【異核二原子分子】AB型分子(一酸化炭素や塩化水素など)...
03. D ∞ h対称【直線AB $_2$ 型分子】B-A-B型分子(二酸化炭素など)...
04. D ∞ h対称【直線A $_2$ B $_2$ 型分子】B-A-A-B型分子(アセチレンなど)...
05. C ∞ v対称【直線ABC型分子】A-B-C型分子(シアン化水素など)...
06. C ∞ v対称【直線ABCD型分子】A-B-C-D型分子(HCNOなど)...
07. C $_2$ v対称【折れ線AB $_2$ 型分子】AB $_2$ 型分子(水や硫化水素など)...
08. C $_3$ v対称【三角錐AB $_3$ 型分子】AB $_3$ 型分子(アンモニアなど)...
09. D $_3$ h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)...
10. D $_4$ h対称【平面正四角型分子】AB $_4$ 型錯イオン([PtCl $_4$] $_2^-$ など)...
11. D $_6$ h対称【平面正六角型分子】A $_6$ B $_6$ 型分子(ベンゼンなど)...
12. 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)...
13. O $_h$ 対称【正八面体型分子】AB $_6$ 型分子(六フッ化硫黄など)...
14. T $_d$ 対称【正四面体型分子】[A(BC) $_4$]型錯体([Ni(CO) $_4$]など)...
15. O $_h$ 対称【正八面体型分子】[A(BC) $_6$]型錯体([Cr(CO) $_6$]など)...
16. D $_2$ h対称【正八面体型】[M(H $_2$ O) $_6$] $_n^+$ アква錯イオン...
17. T $_d$ 対称【正四面体型】[M(L) $_4$] $_n^+$ or [M(L) $_4$] $_n^-$ 錯イオン...
18. O $_h$ 対称【正八面体型】[M(L) $_6$] $_n^+$ or [M(L) $_6$] $_n^-$ 錯イオン...
19. 対称なし【単原子】原子軌道関数を見るときなどに便利です...
20. 対称なし【単原子イオン】原子軌道関数を見るときなどに便利です...

図 5 eduDV のプルダウンメニュー

VESTA ボタンを押すと、原子群の情報 (原子番号と原子座標) に基づいて構造モデルを棒球表示できる。さらに計算した波動関数、電子密度、静電ポテンシャルの三次元ピクセルデータを読み込み、構造モデルに加えて波動関数の等値曲面・断面図や静電ポテンシャルマップ (等電子密度曲面を静電ポテンシャルの大小により彩色した図) などを容易に作成できる。また複数の三次元ピクセルデータを差分・加算表示することも可能で、差電子密度、有効スピン密度などの等値曲面・断面図も描画できる。さらに三次元ピクセルデータを自乗して表示することもできるので、波動関数を自乗することにより電子の発見される確率、すなわち電子密度を計算・表示できる。

5. 学生の反応と教育効果

学生からまず上がる声は、波動関数って美しい! という感想である (図 6)。周期表の全元素の全原子軌道を容易に計算・三次元可視化できるので、炭素の 2p 軌道(3 種類)、銅の 3d 軌道(5 種類)を手始めに、臭素の 4p 軌道(3 種類)、鉛の 6p 軌道(3 種類)、金の 5d 軌道(5 種類)、ウランの 5f 軌道(7 種類)など、手当たり次第に計算して眺めることができる。

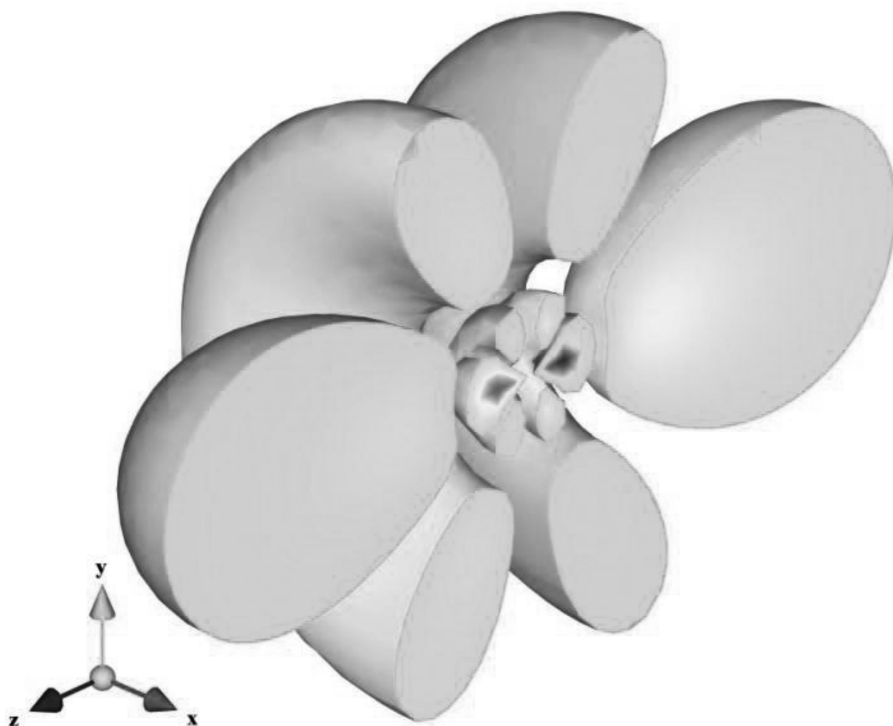


図 6 ウランの 5f $_3$ 原子軌道の等値曲面の断面図

次に学生からあがるのは、教科書と同じ結果の分子軌道計算が簡単にできる！という声である。水素分子はもとより、酸素分子、窒素分子、メタン分子、アセチレン分子、水分子、アンモニア分子、ベンゼン分子など、無機化学や物理化学や量子化学の教科書に載っている分子軌道エネルギー準位図と同じ結果が容易に得られる。しかもその分子軌道それぞれについて、VESTAですべて三次元可視化できる。

例えば岡山理科大学理学部化学科の一年次前期必修講義「コンピュータ入門 I」では、90 分間の講義時間中に、受講生一人一人がまず教育用分子軌道計算システム eduDV の計算環境構築（秀丸エディタにて、eduDV の秀丸エディタマクロ集が利用できるようにする作業）を用い、教育用分子軌道計算システム eduDV を初めて使って、以下の原子・分子の電子状態をすべて自ら計算し、波動関数を VESTA で表示・観察することができた。

1. ネオン原子 (2p_x 軌道)
2. アルゴン原子 (3p_x 軌道)
3. 水(H₂O)分子 (1b₂ 軌道(HOMO), 4a₁ 軌道(LUMO), 静電ポテンシャルマップ)
4. ベンゼン(C₆H₆)分子 (1e_{1g} 軌道(HOMO), 1e_{2u} 軌道(LUMO), 静電ポテンシャルマップ)
5. 六フッ化ウラン(UF₆)分子 (10t_{1u} 軌道(HOMO), 2a_{2u} 軌道(LUMO))

現在の標準的なパソコンは、一昔前の大型計算機に比べて比較にならないほど高性能である。大学にある計算機資源（パソコン）に教育用分子軌道計算システム eduDV その他一式のプログラムを導入することで、基礎化学教育で学生に嫌われがちな量子化学入門を、遊び感覚で正確なイメージの得られる教育内容に変革できる。

参考文献・URL

- [1] 荻野博, 飛田博実, 岡崎雅明, “基本無機化学”, 第 2 版, 東京化学同人, 2006.
- [2] H. Adachi, M. Tsukada, C. Satoko, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **45**, 875 (1978).
- [3] 足立裕彦監修, “はじめての電子状態計算”, 三共出版, 1998.
- [4] <http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html>
- [5] <http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>
- [6] http://homepage.mac.com/fujioizumi/visualization/VENUS.html#assistance_environment
- [7] G. Sakane, K. Momma, F. Izumi, *Bull. Soc. DV-X α* , **21**(1&2), 13 (2008).
- [8] K. Momma, F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **41**, 653 (2008).
- [9] http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html
- [10] 坂根弦太, 日本教育情報学会第 22 回年会 (岡山) 論文集, 2D3, 198 (2006).
- [11] <http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egksakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [12] 坂根弦太, *JUCE Journal* (大学教育と情報), **18** (4), 15 (2010),
http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html
- [13] <http://www.chem.ous.ac.jp/%7Egksakane/fun/index.html#edudv>
- [14] <http://www.openwatcom.org/>