

# 「DV-X $\alpha$ 分子軌道計算法の周辺プログラムに関する研究」

実験教育支援センター（電気系共通実験室担当）

小向康夫

## 1 はじめに

物質の物理的・化学的性質は原子核と電子の挙動がわかれば理解できます。電子の振る舞いはシュレディンガー方程式によって記述されますが、多くの電子から構成される材料についてシュレディンガー方程式を精度良く求めるには膨大な数値計算を必要とします。従来はこれらの数値計算を大型計算機を用いておこなっていましたが、最近ではPC(Personal Computer)の高速化に伴い、個人で計算を行うことが可能になってきました。

DV-X $\alpha$ 分子軌道計算法は、非経験的な分子軌道計算法の一つであり、計算速度が早い、精度が良い、電子遷移の正確な計算ができる、電子スペクトルのピークエネルギーの正確な計算がおこなえるなどの特徴があります。この計算プログラムは現在UNIX及びWindows上で使用できますが、Macintosh上では計算時の実効速度の問題やプログラミングの関係から移植されていません。しかしMacintoshを利用している研究者は多く、データの処理やとりまとめにシームレスな環境を作ることには物質の物理的・化学的性質の研究の助成に繋がると考えられます。

本研究ではMacintosh上でDV-X $\alpha$ 分子軌道計算のデータ処理をおこなうためのプログラムを作成し研究者へ公開・配布すること、また周辺プログラムがMacintosh上での実行可能性を探ることを目的として行いました。

## 2 DV-X $\alpha$ 分子軌道計算法

原子が複数個集まった分子の波動関数は、各原子軌道の波動関数の重ね合わせで記述することによって原子集合体の波動関数を得ることができます。この近似方法は分子軌道法もしくはLCAO(Linear Combination of Atomic Orbital)法と呼ばれ、直観的にもわかりやすいのが特長です。

以下に、今回注目したDV-X $\alpha$ 分子軌道計算法の特長をいくつか例を示します。

- I 水素からアクチノイドまで全元素について、困難なく計算を実行できる。必要であれば、相対論的波動方程式に基づく第一原理計算ができる。
- II 分子軌道エネルギーおよび分子軌道波動関数の正確さが高い。
- III 単純な原子軌道によって構成された分子軌道が求まるので、原子間の相互作用や元素の性質に結びつけて、物質の性質を理解することができる。
- IV クラスタモデルによって、固体の電子構造に等価なものが得られる。
- V 計算時間は、かなり短い。

DV-X $\alpha$ 法は実際に金属や半導体の材料解析や材料設計に広く利用されています。

詳しくは参考文献[1]～[3]を参照してください。

## 3 Macintosh用周辺プログラムの作成

本研究では下記の3点を試みました。

- 1) 波動関数の3次元表示化
- 2) 計算用設定ファイルのGUI化
- 3) Macintosh用Fortranコンパイラを用いた周辺プログラムの実行

以下順を追って内容を簡単に説明します。

## 1) 波動関数の3次元表示化

Windows版のDV-X $\alpha$ 分子軌道計算プログラムでは波動関数を等高線図（プロッターデータ）で出力することができるほか、行列形式で出力することができます。プロッターデータとして出力されたデータは描画プログラムdvplotで2次元表示することができます。今回は3次元表示プログラム

「GLGraph」で表示できるように行列形式のデータを変更するプログラムを作成しました。

（「GLGraph」は3次元表示が可能なプログラムでフリーで配布されています）

プログラムは

- 1 描画用設定ファイルから座標を計算し、行列データに追加する。
- 2 GLGraphで読み込める形式に変換する
- 3 変換したデータをダブルクリックすると自動的に描画プログラムが起動するようにリソースを追加する

という内容で構成されています。

実際に表示している様子を図1に示します。

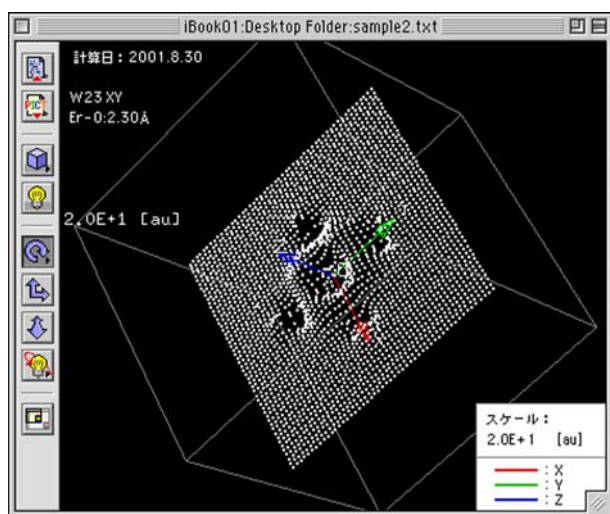


図1

このプログラムはREALbasicにて作成しました。

問題点として変換処理動作が遅い点があげられます。

## 2) 計算用設定ファイルのGUI化

Windows用にコンパイルされているDV-X $\alpha$ 分子軌道計算プログラムは全てコマンドライン上で動作します。計算のための設定ファイル、例えばどの位置にどの原子があるのかとかどのような精度で計算するのかといった内容はテキストデータとして別途用意する必要があります。この設定ファイルの記述方法を誤ると計算は実行できません。そこで、設定ファイルが簡単に行えるようにGUI(Graphical User Interface)化してみました。実際に作成したプログラムの一例を図2に示します。

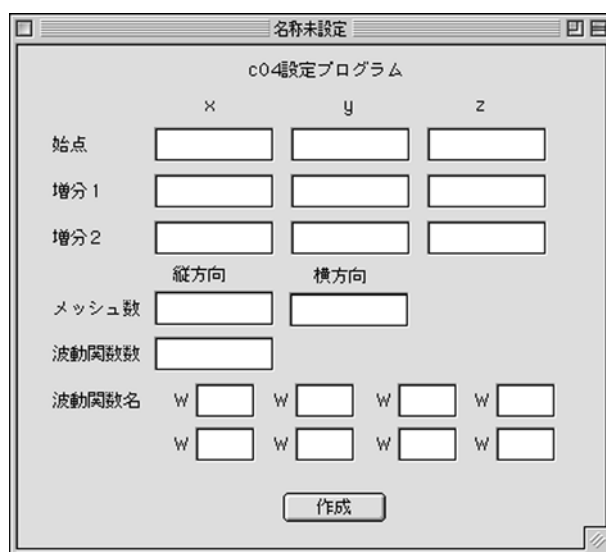


図2

図2は波動関数を描画する時に使用する設定ファイルです。分子軌道計算後、描画する波動関数を選択することによって波動関数を作成することができます。設定ファイル作成後描画用データ作成プログラムを実行することにより波動関数表示のためのデータが出力されます。このプログラムもREALbasicにより作成しています。

### 3) Macintosh用Fortranコンパイラを用いた周辺プログラムの実行

1)、2)で作成したプログラムはWindows上で計算した結果をMacintosh上で利用するプログラムでしたが、波動関数描画用データ作成プログラム等の周辺プログラムをMacintosh上で行うことについて試みました。商用のFortran(Abssoft社製Pro Fortran)を購入しコンパイルを実行してみました。Macintosh上ではコンソール入力がありませんが、実行プログラム動作後入力フィールドができるようにプログラムを変更しました。また一部動作不具合が見られたのでファイルとしてデータを入力するように形式を変更しました。問題点としては計算の途中で1時的に作成するファイルがうまく読み込めないことやWindows上でのバッチファイルに当たる部分の工夫が必要であることですが、インターフェース部分を作成することによってこの問題を解決することができました。波動関数描画用データ作成のプログラム等の移植は可能でした。

## 4 まとめ

今回の試みによってDV-X $\alpha$ 分子軌道法にて計算した結果をMacintosh上で利用可能にしました。具体的には波動関数の3次元表示化を行いました。また波動関数の描画用データ作成等の周辺プログラムをMacintosh上で行うことについての可能性示しました。計算のための各種設定ファイルの作成をGUI化しました。

2001年10月現在、Apple社が製造しているPC(Macintosh)はUNIXベースのOSが採用されており、オープンソース化が行われている。上記の環

境ではFortranやC言語のコンパイラがフリーで入手できる環境になることが予想される。今回の研究では分子軌道計算自体の移植は行っていないが、今後はOSの変更にとまなうプログラムの変更と実行速度の改善とともに、新しい環境にあわせて移植を続けていきたいと考えています。

## 5 謝辞

本研究は(財)慶応工学会、平成12年度研究援助費を頂いて行いました。ご協力いただいたみなさまに深く感謝するとともに厚く御礼申し上げます。

## 6 参考文献

- [1]小和田善之他 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
- [2]足立裕彦,田中功 量子材料科学の初歩 三共出版
- [3]足立裕彦 量子材料科学入門-DV-X $\alpha$ 法からのアプローチ 三共出版
- [4]わたなべけんいち他 REALbasic使いへの道 ソフトバンクパブリッシング
- [5]浦昭二 FORTRAN77入門 培風館
- [6]中松博英 応用物理,62(11)(1993)1138
- [7]物理学事典 培風館