

## 分子軌道解析支援 3D 描画システム

## —希ガスのマトリックスへの適用事例—

○中貴俊<sup>1</sup>、秦野やす世<sup>1</sup>、宮崎慎也<sup>1</sup>、山本茂義<sup>2</sup>、野呂武司<sup>3</sup>、舘脇洋<sup>4</sup><sup>1</sup> 中京大学情報理工学部 (〒470-0393 愛知県豊田市貝津町床立 101)<sup>2</sup> 中京大学国際教養学部 (〒466-8666 愛知県名古屋市昭和区八事本町 101-2)<sup>3</sup> 北海道大学大学院理学研究科 (〒060-0810 北海道札幌市北区北 10 条西 8 丁目)<sup>4</sup> 名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科 (〒467-8501 名古屋市瑞穂区瑞穂町山の畑 1)

## 【緒言】

本研究では、分子軌道計算を行う前段階の研究用ツールとして、分子模型を組み立てるような感覚で任意の位置に適切な原子軌道関数 (Atomic Orbital: AO) (ガウス型基底関数または水素様原子軌道関数) を複数配置して、その密度関数を 3D 描画するシステム (AO 密度集合の 3D 描画システム) を開発した。このシステムは AO 間の重なりを観察することにより、平衡核間距離の予測や、化学結合の性質の判断が可能か否か模索することを目的としたシステムである。拡張 Hückel 法や最小基底関数を使えば、MO を比較的容易に得ることが可能だが、パラメータが完備されていない場合や SCF の収束が困難である場合があり、特に、大型分子、遷移金属、重元素などは容易ではない。本研究により提案するシステムは経験的パラメータの設定が不要で、基底関数も自由に選ぶことができ、計算機資源を気にせず利用でき、適用範囲は広いと考えられる。

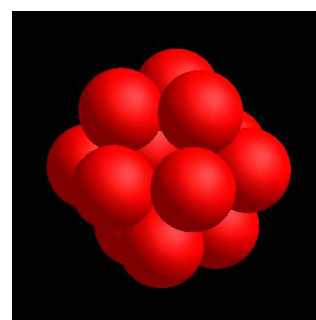


図 1 Ne マトリックス (hcp)

分子模型を描く場合、通常結合原子は接触するように描く。このときの原子球の半径をどのように決めるかが問題になる。例えば図 1 のような結晶中の 2 原子間の距離は 2 原子の半径の和として書かれる。今回提案する方法は、“原子のファンデアワールス半径 (avdwr)” を He 分子の平衡核間距離の半分の位置における He の電場と同じ電場の大きさを与える距離とする。この半径を使用して、電子密度関数の等値面を描くことにより、原子球を表現する[9]。

我々は、分子軌道描画プログラムシステム MOOTIC (Molecular Orbital Observation Tool with Iso-surface and Cloud) を開発してきた。Gaussian により得られた分子軌道データによる精細な等値面表示、分子軌道を変化させた際のリアルタイムな高速な雲表示・雲等値面表示など、描画機能を数種類備えており、利用者は最適な描画方法を切り替えて分子軌道関数を表示できるものである[1]。本研究では、ある複数の原子における、任意の原子軌道を任意の位置に配置することで、各原子同士の電子密度が重なる様子の可視化を目的とした AO 密度集合 3D 描画システムを実現する[2,3]。前回報告時からのシステムの追加・改善点として、2 種類の等値面を表示することが可能な機能の追加や等値面描画時の高速化などがある。本システムの機能はのちに MOOTIC に統合する予定である。

## 【方法】

本システムは我々が開発し公開している分子軌道描画システム MOOTIC プロジェクト[4]の一部として進めている。原子の電子密度関数の等値面表示部分の処理においては Marching Cubes 法[5]に基づいた等値面構成処理を用いており、MOOTIC[3]の等値面表示部と同様のアルゴリズムで描画される。既存の MOOTIC では、Gaussian から得られた分子軌道または電子密度関数の CUBE 形式のファイルを入力データとして用いているが、本研究の AO 密度集合 3D 描画システムでは、AO の  $n$  (主量子数)、 $l$  (方位量子数)、 $m$  (磁気量子数)、基底関数の情報、および配置する原子の、位置座標値を入力することのみで軌道関数の等値面表示を実現する。また、AO の等値面を可視化させるために量子数、配置位置、GTF 基底関数の情報が必要とするが、共著者の舘脇が自身のホームページ上に、GTF の指数の値と結合係数の格納されたデータファイル(以下 GTF ファイル)を公開している[6]。角度成分は球面調和関数を実数化したものを使っている。いわゆる"spherical GTF"であり、通常分子軌道計算に用いる Cartesian GTF ではないので注意されたい。本システムでは GTF ファイルのフォーマットに準じ、初期配置位置と初期表示量子数を追記したファイルフォーマットで GTF 基底関数の情報の入力としている。GTF ファイルには AO 軌道算出に必要な各量子数における適切なパラメータが記述されている。本システムでは GTF

ファイルに記述されている AO の中から任意の軌道を選択し任意の位置に配置できる。

本システムは Microsoft .NET Framework[7]を利用した.NET アプリケーションとして C#言語で開発し、3次元の原子軌道モデルの描画には OpenGL[8]を用いている。

本システムにおいて AO の等値面は、閉曲線・閉曲面の内部に電子の何% (占拠率) 含まれているのかのパラメータを、設定ファイルから読み込み、システム内部でこの占拠率に対する電子密度の値を算出し AO の等値面の値としている[2,3]。より正確な AO の等値面の値を算出するためには離散間隔を十分に細かくとる必要があり、これに伴い描く AO のポリゴン数も増加するため、描画にかかる時間も増加する。しかしながら、モデルの描画にあたり、描画モデルが規則性のある形状をしているようなケースの多くは極端に細かな離散間隔を必要とはしない。そこで今回の改善では、等値面算出と描画とは別の離散間隔を用いることで描画にかかる時間の短縮を図った。本システムでは現在、占拠率に対する電子密度の値を算出するために  $160 \times 160 \times 160$  の大きさのボリュームデータとなる離散間隔を用い、AO モデルの描画のために  $32 \times 32 \times 32$  の大きさのボリュームデータとなる離散間隔を用いている。また、本研究においては隣接する各原子の密度関数の重なりの様子を判断することが重要であるため、透過処理による AO モデルの半透明表示を行っている。また原子が多重に重なっている場合など、本来観察したい箇所への妨げになっているような原子を、ユーザの任意で非表示にするなどの操作が可能となっている。

## 【結果】

本システムでは原子の軌道の種類や任意の電子密度の値での等値面を描くことが可能となっている。そこで、本システムを用いて、希ガスマトリックス (hcp) の中心希ガス電子を Cu 原子で置き換えた場合に各原子同士の電子密度がどのように重なるかを見る試み (可視化) を行った (図 2)。原子結合現象の解析において、各々の原子に帯びる電子の影響範囲が重要な要素の一つであり、この影響範囲としてファンデアワールス半径”を用いる手法が有用とされる。図 2 では、”原子価半径” (各々の原子における小さい球面) と我々が定める”原子の半径 (avdwr)”[9] (各々の原子における大きい球面) を用いて描画している。

図 2 の(左)は中心の Cu の電荷分布が周りの Ne の原子価半径の中まで入り込み、Cu 原子と強く相互作用しており、これに比べて図 2 の(右)で示される Ar マトリックス中の Cu はやや弱い摂動を受けていることが観察される。

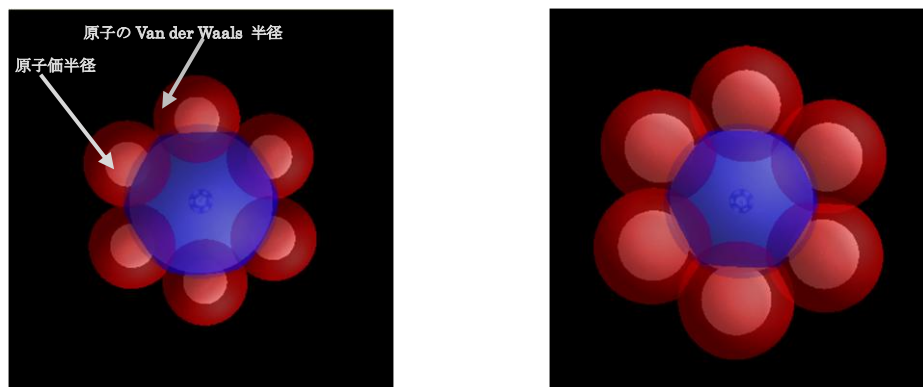


図 2 Ne(6)+Cu (左), Ar(6)+Cu (右)

## 参考文献

- [1] 中貴俊,山本茂義,秦野やす世,遠藤守,山田雅之,宮崎慎也, 分子骨格操作に伴う分子軌道変化の等値面リアルタイム描画システム, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, Vol.6, No.4, pp. 245–252, 2007.6
- [2] 中 貴俊, 秦野やす世, 山本茂義, 舘脇 洋, 遠藤 守, 山田雅之, 宮崎慎也, 原子軌道密度集合による分子軌道解析支援 3D 描画システムの開発, 電子情報通信学会, 信学技報, vol. 108, no. 128, MVE2008-44, pp.101-106, 2008.07
- [3] 若松 秀明, 中 貴俊, 山本 茂義, 秦野 やす世, 舘脇 洋, 宮崎 慎也 : 原子・分子軌道関数の描画システム - MOOTIC の拡張 -, 第 30 回情報化学討論会予稿集, J11, 京都, 2007.11
- [4] MOOTIC プログラム公開ページ <http://www.om.sist.chukyo-u.ac.jp/main/research/molecule/>
- [5] W. E. Lorensen et al.: Marching Cubes: A High Resolution 3D Surface Construction Algorithm, *CG*, .21(4), 163-169 1987.
- [6] Tatewaki's home page <http://www.nsc.nagoya-cu.ac.jp/~htatewak/index.html>
- [7] Microsoft .NET Framework <http://www.microsoft.com/japan/msdn/netframework/>
- [8] J. Neider J, T. Davis T, and M. Woo: *OpenGL Programming Guide*, (Addison-Wesley, 1993).
- [9] 秦野 やす世, 中 貴俊, 舘脇 洋, 山本 茂義, 野呂 武司, van der Waals 半径 (球) と分子軌道解析支援 3D 描画システム, 第 3 回分子科学討論会 2009 名古屋, 2009.9