

目 次

1. 教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (8)	1
理学部 化学科	坂根 弦太
2. 高感度磁化率測定装置の冷却系と温度モニタリングの改良.....	21
情報処理センター	畠山 唯達
理学部 化学科	満身 稔

教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (8)

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[5-11], 最新版のプログラム一式[12]とマニュアル[13], および論文[14]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[1-14], DV- $X\alpha$ 法[15-25], 秀丸エディタ[26], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[27], VESTA[28, 29]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. eduDV, VESTA を含んだ“DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境”の使い方については, 書籍として出版した[30].

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.

教育用分子軌道計算システム eduDV に含まれる 64 個のプログラムのうち, 孤立原子計算プログラム atom, atomn および孤立イオン計算プログラム ion, ionn は, 原子番号 1 番の水素(${}^1\text{H}$)から 118 番のオガネソン(${}_{118}\text{Og}$)まで周期表(表 1)の全元素に対応している[11]が, 残りの 60 個のプログラムは, 原子番号 1 番の水素(${}^1\text{H}$)から原子番号 94 番のプルトニウム(${}_{94}\text{Pu}$)までにしか対応していなかった. 今回, これら 60 個のプログラムすべてを拡張し, 原子番号 95 番のアメリシウム(${}_{95}\text{Am}$)から 118 番のオガネソン(${}_{118}\text{Og}$)までにも対応したので報告する.

表 1. 周期表

1																	18
H											2						He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

*1	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

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)[31]をインストールした環境を用いた。

3. 開発プログラム・ファイル

eduDV の 60 種類のプログラムを改訂する (周期表の全元素に対応させる) にあたり, 修正・開発したプログラム・ファイルは以下の通りである。

3-1. Fortran 77 プログラム (C:\%dvxa%\scat%*.f)

c2v12.f	c2v12n.f	c2v12s.f	c3v13.f	c3v13n.f	c3v13s.f
c8v11.f	c8v111.f	c8v1111.f	c8v1111n.f	c8v1111s.f	c8v1111n.f
c8v111s.f	c8v11n.f	c8v11s.f	d2h24.f	d2h24n.f	d2h24s.f
d3d26.f	d3d26n.f	d3d26s.f	d3h13.f	d3h13n.f	d3h13s.f
d4h14.f	d4h14n.f	d4h14s.f	d6h66.f	d6h66n.f	d6h66s.f
d8h12.f	d8h12n.f	d8h12s.f	d8h2.f	d8h22.f	d8h22n.f
d8h22s.f	d8h2n.f	d8h2s.f	mh2o6.f	mh2o6n.f	mh2o6s.f
m14.f	m14n.f	m14s.f	m16.f	m16n.f	m16s.f
oh16.f	oh166.f	oh166n.f	oh166s.f	oh16n.f	oh16s.f
td14.f	td144.f	td144n.f	td144s.f	td14n.f	td14s.f

3-2. Fortran 77 プログラムコンパイル用バッチファイル (C:\%dvxa%\lscat%*.bat)

lc2v12.bat	lc2v12n.bat	lc2v12s.bat	lc3v13.bat	lc3v13n.bat	lc3v13s.bat
lc8v11.bat	lc8v111.bat	lc8v1111.bat	lc8v1111n.bat	lc8v1111s.bat	lc8v1111n.bat
lc8v111s.bat	lc8v11n.bat	lc8v11s.bat	ld2h24.bat	ld2h24n.bat	ld2h24s.bat
ld3d26.bat	ld3d26n.bat	ld3d26s.bat	ld3h13.bat	ld3h13n.bat	ld3h13s.bat
ld4h14.bat	ld4h14n.bat	ld4h14s.bat	ld6h66.bat	ld6h66n.bat	ld6h66s.bat
ld8h12.bat	ld8h12n.bat	ld8h12s.bat	ld8h2.bat	ld8h22.bat	ld8h22n.bat
ld8h22s.bat	ld8h2n.bat	ld8h2s.bat	lmh2o6.bat	lmh2o6n.bat	lmh2o6s.bat
lml4.bat	lml4n.bat	lml4s.bat	lml6.bat	lml6n.bat	lml6s.bat
loh16.bat	loh166.bat	loh166n.bat	loh166s.bat	loh16n.bat	loh16s.bat
ltd14.bat	ltd144.bat	ltd144n.bat	ltd144s.bat	ltd14n.bat	ltd14s.bat

3-3. Fortran 77 プログラム実行ファイル (C:\%dvxa%\object%*.exe)

c2v12.exe	c2v12n.exe	c2v12s.exe	c3v13.exe	c3v13n.exe	c3v13s.exe
c8v11.exe	c8v111.exe	c8v1111.exe	c8v1111n.exe	c8v1111s.exe	c8v1111n.exe
c8v111s.exe	c8v11n.exe	c8v11s.exe	d2h24.exe	d2h24n.exe	d2h24s.exe
d3d26.exe	d3d26n.exe	d3d26s.exe	d3h13.exe	d3h13n.exe	d3h13s.exe
d4h14.exe	d4h14n.exe	d4h14s.exe	d6h66.exe	d6h66n.exe	d6h66s.exe
d8h12.exe	d8h12n.exe	d8h12s.exe	d8h2.exe	d8h22.exe	d8h22n.exe
d8h22s.exe	d8h2n.exe	d8h2s.exe	mh2o6.exe	mh2o6n.exe	mh2o6s.exe
m14.exe	m14n.exe	m14s.exe	m16.exe	m16n.exe	m16s.exe
oh16.exe	oh166.exe	oh166n.exe	oh166s.exe	oh16n.exe	oh16s.exe
td14.exe	td144.exe	td144n.exe	td144s.exe	td14n.exe	td14s.exe

3-4. 実行用バッチファイル (C:\%dvxa%\exec%*.bat)

a2.bat	a2b2.bat	a2b2n.bat	a2b2n_AUTO.bat	a2b2s.bat
a2b2s_AUTO.bat	a2n.bat	a2n_AUTO.bat	a2s.bat	a2s_AUTO.bat
ab.bat	ab2.bat	ab2n.bat	ab2n_AUTO.bat	ab2s.bat
ab2s_AUTO.bat	abc.bat	abcd.bat	abcdn.bat	abcdn_AUTO.bat
abcds.bat	abcds_AUTO.bat	abcn.bat	abcn_AUTO.bat	abcs.bat
abcs_AUTO.bat	abn.bat	abn_AUTO.bat	abs.bat	abs_AUTO.bat
c2v12.bat	c2v12n.bat	c2v12n_AUTO.bat	c2v12s.bat	c2v12s_AUTO.bat
c3v13.bat	c3v13n.bat	c3v13n_AUTO.bat	c3v13s.bat	c3v13s_AUTO.bat
c8v11.bat	c8v111.bat	c8v1111.bat	c8v1111n.bat	c8v1111s.bat
c8v111n.bat	c8v111s.bat	c8v11n.bat	c8v11s.bat	d2h24.bat

d2h24n.bat	d2h24n_AUTO.bat	d2h24s.bat	d2h24s_AUTO.bat	d3d26.bat
d3d26n.bat	d3d26n_AUTO.bat	d3d26s.bat	d3d26s_AUTO.bat	d3h13.bat
d3h13n.bat	d3h13n_AUTO.bat	d3h13s.bat	d3h13s_AUTO.bat	d4h14.bat
d4h14n.bat	d4h14n_AUTO.bat	d4h14s.bat	d4h14s_AUTO.bat	d6h66.bat
d6h66n.bat	d6h66n_AUTO.bat	d6h66s.bat	d6h66s_AUTO.bat	d8h12.bat
d8h12n.bat	d8h12s.bat	d8h2.bat	d8h22.bat	d8h22n.bat
d8h22s.bat	d8h2n.bat	d8h2s.bat	mh2o6.bat	mh2o6n.bat
mh2o6n_AUTO.bat	mh2o6s.bat	mh2o6s_AUTO.bat	m14.bat	m14n.bat
m14n_AUTO.bat	m14s.bat	m14s_AUTO.bat	m16.bat	m16n.bat
m16n_AUTO.bat	m16s.bat	m16s_AUTO.bat	oh16.bat	oh166.bat
oh166n.bat	oh166n_AUTO.bat	oh166s.bat	oh166s_AUTO.bat	oh16n.bat
oh16n_AUTO.bat	oh16s.bat	oh16s_AUTO.bat	td14.bat	td144.bat
td144n.bat	td144n_AUTO.bat	td144s.bat	td144s_AUTO.bat	td14n.bat
td14n_AUTO.bat	td14s.bat	td14s_AUTO.bat		

3-5. 秀丸エディタマクロ (C:\ydvxa\Macros\eduDV*.mac)

a2.mac	a2b2.mac	a2b2menu.mac	a2b2n.mac	a2b2n_C2H2.mac
a2b2n_Hg2I2.mac	a2b2n_menu.mac	a2b2s.mac	a2b2s_C2H2.mac	a2b2s_Hg2I2.mac
a2b2s_menu.mac	a2menu.mac	a2n.mac	a2n_Br2.mac	a2n_C12.mac
a2n_F2.mac	a2n_H2.mac	a2n_I2.mac	a2n_menu.mac	a2n_N2.mac
a2n_O2.mac	a2s.mac	a2s_Br2.mac	a2s_C12.mac	a2s_F2.mac
a2s_H2.mac	a2s_I2.mac	a2s_menu.mac	a2s_N2.mac	a2s_O2.mac
ab.mac	ab2.mac	ab2menu.mac	ab2n.mac	ab2n_CO2.mac
ab2n_CS2.mac	ab2n_HgCl2.mac	ab2n_KrF2.mac	ab2n_menu.mac	ab2n_XeF2.mac
ab2s.mac	ab2s_CO2.mac	ab2s_CS2.mac	ab2s_HgCl2.mac	ab2s_KrF2.mac
ab2s_menu.mac	ab2s_XeF2.mac	abc.mac	abcd.mac	abcdmenu.mac
abcdn.mac	abcdn_HCNO.mac	abcdn_menu.mac	abcds.mac	abcds_HCNO.mac
abcds_menu.mac	abcmenu.mac	abcn.mac	abcn_BrCN.mac	abcn_C1CN.mac
abcn_FCN.mac	abcn_HCN.mac	abcn_menu.mac	abcs.mac	abcs_BrCN.mac
abcs_C1CN.mac	abcs_FCN.mac	abcs_HCN.mac	abcs_menu.mac	abmenu.mac
abn.mac	abn_CO.mac	abn_HBr.mac	abn_HCl.mac	abn_HF.mac
abn_HI.mac	abn_menu.mac	abn_NO.mac	abs.mac	abs_CO.mac
abs_HBr.mac	abs_HCl.mac	abs_HF.mac	abs_HI.mac	abs_menu.mac
abs_NO.mac	AUTOa2.mac	AUTOa2b2.mac	AUTOab.mac	AUTOab2.mac
AUTOabc.mac	AUTOabcd.mac	AUTOc2v12.mac	AUTOc3v13.mac	AUTOd2h24.mac
AUTOd3d26.mac	AUTOd3h13.mac	AUTOd4h14.mac	AUTOd6h66.mac	AUTOmh2o6.mac
AUTOm14.mac	AUTOm16.mac	AUTOoh16.mac	AUTOoh166.mac	AUTOtd14.mac
AUTOtd144.mac	c2v12.mac	c2v12menu.mac	c2v12n.mac	c2v12n_C12O.mac
c2v12n_C1O2.mac	c2v12n_GeCl2.mac	c2v12n_GeF2.mac	c2v12n_H2O.mac	c2v12n_H2S.mac
c2v12n_menu.mac	c2v12n_NO2.mac	c2v12n_O3.mac	c2v12n_OF2.mac	c2v12n_SC12.mac
c2v12n_SeO2.mac	c2v12n_SF2.mac	c2v12n_SiF2.mac	c2v12n_SO2.mac	c2v12s.mac
c2v12s_C12O.mac	c2v12s_C1O2.mac	c2v12s_GeCl2.mac	c2v12s_GeF2.mac	c2v12s_H2O.mac
c2v12s_H2S.mac	c2v12s_menu.mac	c2v12s_NO2.mac	c2v12s_O3.mac	c2v12s_OF2.mac
c2v12s_SC12.mac	c2v12s_SeO2.mac	c2v12s_SF2.mac	c2v12s_SiF2.mac	c2v12s_SO2.mac
c3v13.mac	c3v13menu.mac	c3v13n.mac	c3v13n_AsBr3.mac	c3v13n_AsCl3.mac
c3v13n_AsF3.mac	c3v13n_AsH3.mac	c3v13n_AsI3.mac	c3v13n_BiBr3.mac	c3v13n_BiCl3.mac
c3v13n_GdI3.mac	c3v13n_LuCl3.mac	c3v13n_menu.mac	c3v13n_NC13.mac	c3v13n_NF3.mac
c3v13n_NH3.mac	c3v13n_PBr3.mac	c3v13n_PC13.mac	c3v13n_PF3.mac	c3v13n_PH3.mac
c3v13n_PrI3.mac	c3v13n_SbCl3.mac	c3v13n_SbH3.mac	c3v13s.mac	c3v13s_AsBr3.mac
c3v13s_AsCl3.mac	c3v13s_AsF3.mac	c3v13s_AsH3.mac	c3v13s_AsI3.mac	c3v13s_BiBr3.mac
c3v13s_BiCl3.mac	c3v13s_GdI3.mac	c3v13s_LuCl3.mac	c3v13s_menu.mac	c3v13s_NC13.mac
c3v13s_NF3.mac	c3v13s_NH3.mac	c3v13s_PBr3.mac	c3v13s_PC13.mac	c3v13s_PF3.mac
c3v13s_PH3.mac	c3v13s_PrI3.mac	c3v13s_SbCl3.mac	c3v13s_SbH3.mac	d2h24.mac
d2h24menu.mac	d2h24n.mac	d2h24n_C2Cl4.mac	d2h24n_C2F4.mac	d2h24n_C2H4.mac
d2h24n_menu.mac	d2h24n_N2O4s.mac	d2h24n_N2O4v.mac	d2h24s.mac	d2h24s_C2Cl4.mac
d2h24s_C2F4.mac	d2h24s_C2H4.mac	d2h24s_menu.mac	d2h24s_N2O4s.mac	d2h24s_N2O4v.mac
d3d26.mac	d3d26menu.mac	d3d26n.mac	d3d26n_C2F6.mac	d3d26n_C2H6.mac

d3d26n_menu.mac	d3d26s.mac	d3d26s_C2F6.mac	d3d26s_C2H6.mac	d3d26s_menu.mac
d3h13.mac	d3h13menu.mac	d3h13n.mac	d3h13n_BBr3.mac	d3h13n_BC13.mac
d3h13n_BF3.mac	d3h13n_BI3.mac	d3h13n_menu.mac	d3h13s.mac	d3h13s_BBr3.mac
d3h13s_BC13.mac	d3h13s_BF3.mac	d3h13s_BI3.mac	d3h13s_menu.mac	d4h14.mac
d4h14menu.mac	d4h14n.mac	d4h14n_AuCl4.mac	d4h14n_menu.mac	d4h14n_PdCl4.mac
d4h14n_PtCl4.mac	d4h14s.mac	d4h14s_AuCl4.mac	d4h14s_menu.mac	d4h14s_PdCl4.mac
d4h14s_PtCl4.mac	d6h66.mac	d6h66menu.mac	d6h66n.mac	d6h66n_C6Br6.mac
d6h66n_C6Cl6.mac	d6h66n_C6F6.mac	d6h66n_C6H6.mac	d6h66n_C6I6.mac	d6h66n_menu.mac
d6h66s.mac	d6h66s_C6Br6.mac	d6h66s_C6Cl6.mac	d6h66s_C6F6.mac	d6h66s_C6H6.mac
d6h66s_C6I6.mac	d6h66s_menu.mac	mh2o6.mac	mh2o6menu.mac	mh2o6n.mac
mh2o6n_CoH2O62p.mac	mh2o6n_CoH2O63p.mac	mh2o6n_CrH2O62p.mac	mh2o6n_CrH2O63p.mac	mh2o6n_CrH2O63p.mac
mh2o6n_FeH2O62p.mac	mh2o6n_FeH2O63p.mac	mh2o6n_menu.mac	mh2o6n_MnH2O62p.mac	mh2o6n_MnH2O62p.mac
mh2o6n_NiH2O62p.mac	mh2o6n_RuH2O63p.mac	mh2o6n_TiH2O63p.mac	mh2o6n_TiH2O64p.mac	mh2o6n_TiH2O64p.mac
mh2o6n_VH2O62p.mac	mh2o6n_VH2O63p.mac	mh2o6n_ZnH2O62p.mac	mh2o6s.mac	mh2o6s.mac
mh2o6s_CoH2O62p.mac	mh2o6s_CoH2O63p.mac	mh2o6s_CrH2O62p.mac	mh2o6s_CrH2O63p.mac	mh2o6s_CrH2O63p.mac
mh2o6s_FeH2O62p.mac	mh2o6s_FeH2O63p.mac	mh2o6s_menu.mac	mh2o6s_MnH2O62p.mac	mh2o6s_MnH2O62p.mac
mh2o6s_NiH2O62p.mac	mh2o6s_RuH2O63p.mac	mh2o6s_TiH2O63p.mac	mh2o6s_TiH2O64p.mac	mh2o6s_TiH2O64p.mac
mh2o6s_VH2O62p.mac	mh2o6s_VH2O63p.mac	mh2o6s_ZnH2O62p.mac		
m14.mac	m14menu.mac	m14n.mac	m14n_CoBr42m.mac	m14n_CoCl42m.mac
m14n_CoI42m.mac	m14n_menu.mac	m14s.mac	m14s_CoBr42m.mac	m14s_CoCl42m.mac
m14s_CoI42m.mac	m14s_menu.mac	m16.mac	m16menu.mac	m16n.mac
m16n_CrBr63m.mac	m16n_CrCl63m.mac	m16n_CrF63m.mac	m16n_CrI63m.mac	m16n_menu.mac
m16n_NhCl63m.mac	m16s.mac	m16s_CrBr63m.mac	m16s_CrCl63m.mac	m16s_CrF63m.mac
m16s_CrI63m.mac	m16s_menu.mac	m16s_NhCl63m.mac	oh16.mac	oh166.mac
oh166menu.mac	oh166n.mac	oh166n_CrCO6.mac	oh166n_menu.mac	oh166n_MoCO6.mac
oh166n_VCO6.mac	oh166n_WCO6.mac	oh166s.mac	oh166s_CrCO6.mac	oh166s_menu.mac
oh166s_MoCO6.mac	oh166s_VCO6.mac	oh166s_WCO6.mac	oh16menu.mac	oh16n.mac
oh16n_IrF6.mac	oh16n_menu.mac	oh16n_MoF6.mac	oh16n_NpF6.mac	oh16n_OsF6.mac
oh16n_PuF6.mac	oh16n_ReF6.mac	oh16n_SeF6.mac	oh16n_SF6.mac	oh16n_TeF6.mac
oh16n_UF6.mac	oh16n_WF6.mac	oh16s.mac	oh16s_IrF6.mac	oh16s_menu.mac
oh16s_MoF6.mac	oh16s_NpF6.mac	oh16s_OsF6.mac	oh16s_PuF6.mac	oh16s_ReF6.mac
oh16s_SeF6.mac	oh16s_SF6.mac	oh16s_TeF6.mac	oh16s_UF6.mac	oh16s_WF6.mac
td14.mac	td144.mac	td144menu.mac	td144n.mac	td144n_menu.mac
td144n_NiCO4.mac	td144s.mac	td144s_menu.mac	td144s_NiCO4.mac	td14menu.mac
td14n.mac	td14n_CBr4.mac	td14n_CCl4.mac	td14n_CF4.mac	td14n_CH4.mac
td14n_GeBr4.mac	td14n_GeCl4.mac	td14n_GeH4.mac	td14n_HfCl4.mac	td14n_menu.mac
td14n_OsO4.mac	td14n_RuO4.mac	td14n_SiCl4.mac	td14n_SiF4.mac	td14n_SiH4.mac
td14n_SnCl4.mac	td14n_SnH4.mac	td14n_ThCl4.mac	td14n_ThF4.mac	td14n_TiBr4.mac
td14n_TiCl4.mac	td14n_VCl4.mac	td14n_XeO4.mac	td14n_ZrCl4.mac	td14n_ZrF4.mac
td14s.mac	td14s_CBr4.mac	td14s_CCl4.mac	td14s_CF4.mac	td14s_CH4.mac
td14s_GeBr4.mac	td14s_GeCl4.mac	td14s_GeH4.mac	td14s_HfCl4.mac	td14s_menu.mac
td14s_OsO4.mac	td14s_RuO4.mac	td14s_SiCl4.mac	td14s_SiF4.mac	td14s_SiH4.mac
td14s_SnCl4.mac	td14s_SnH4.mac	td14s_ThCl4.mac	td14s_ThF4.mac	td14s_TiBr4.mac
td14s_TiCl4.mac	td14s_VCl4.mac	td14s_XeO4.mac	td14s_ZrCl4.mac	td14s_ZrF4.mac

3-6. データファイル (C:\¥dvxa¥data¥*)

a2b2_C2H2.txt	a2b2_Hg2I2.txt	a2_Br2.txt	a2_C12.txt	a2_F2.txt
a2_H2.txt	a2_I2.txt	a2_N2.txt	a2_O2.txt	ab2_CO2.txt
ab2_CS2.txt	ab2_HgCl2.txt	ab2_KrF2.txt	ab2_XeF2.txt	abcd_HCNO.txt
abc_BrCN.txt	abc_ClCN.txt	abc_FCN.txt	abc_HCN.txt	ab_CO.txt
ab_HBr.txt	ab_HCl.txt	ab_HF.txt	ab_HI.txt	ab_NO.txt
c2v12	c2v12_C12O.txt	c2v12_C1O2.txt	c2v12_GeCl2.txt	c2v12_GeF2.txt
c2v12_H2O.txt	c2v12_H2S.txt	c2v12_NO2.txt	c2v12_O3.txt	c2v12_OF2.txt
c2v12_SCl2.txt	c2v12_SeO2.txt	c2v12_SF2.txt	c2v12_SiF2.txt	c2v12_SO2.txt
c3v13	c3v13_AsBr3.txt	c3v13_AsCl3.txt	c3v13_AsF3.txt	c3v13_Ash3.txt
c3v13_AsI3.txt	c3v13_BiBr3.txt	c3v13_BiCl3.txt	c3v13_GdI3.txt	c3v13_LuCl3.txt
c3v13_NCl3.txt	c3v13_NF3.txt	c3v13_NH3.txt	c3v13_PBr3.txt	c3v13_PC13.txt

```

c3v13_PF3.txt      c3v13_PH3.txt      c3v13_PrI3.txt      c3v13_SbCl3.txt      c3v13_SbH3.txt
c8v11              c8v111             c8v1111             d2h24                d2h24_C2Cl4.txt
d2h24_C2F4.txt     d2h24_C2H4.txt     d2h24_N2O4s.txt     d2h24_N2O4v.txt     d3d26
d3d26_C2F6.txt     d3d26_C2H6.txt     d3h13              d3h13_BBr3.txt     d3h13_BC13.txt
d3h13_BF3.txt      d3h13_BI3.txt      d4h14              d4h14_AuCl4.txt     d4h14_PdCl4.txt
d4h14_PtCl4.txt    d6h66              d6h66_C6Br6.txt    d6h66_C6Cl6.txt     d6h66_C6F6.txt
d6h66_C6H6.txt     d6h66_C6I6.txt     d8h12              d8h2                d8h22
mh2o6              mh2o6_CoH2O62p.txt mh2o6_CoH2O63p.txt  mh2o6_CrH2O62p.txt
mh2o6_CrH2O63p.txt mh2o6_FeH2O62p.txt mh2o6_FeH2O63p.txt  mh2o6_MnH2O62p.txt
mh2o6_NiH2O62p.txt mh2o6_RuH2O63p.txt mh2o6_TiH2O63p.txt  mh2o6_TiH2O64p.txt
mh2o6_VH2O62p.txt  mh2o6_VH2O63p.txt  mh2o6_ZnH2O62p.txt
ml4_CoBr42m.txt    ml4_CoCl42m.txt     ml4_CoI42m.txt     ml6_CrBr63m.txt     ml6_CrCl63m.txt
ml6_CrF63m.txt     ml6_CrI63m.txt     ml6_NhCl63m.txt    oh16                 oh166
oh166_CrCO6.txt    oh166_MoCO6.txt     oh166_VCO6.txt     oh166_WCO6.txt     oh16_IrF6.txt
oh16_MoF6.txt      oh16_NpF6.txt      oh16_OsF6.txt     oh16_PuF6.txt     oh16_ReF6.txt
oh16_SeF6.txt      oh16_SF6.txt       oh16_TeF6.txt     oh16_UF6.txt       oh16_WF6.txt
td14               td144              td144_NiCO4.txt    td14_CBr4.txt      td14_CC14.txt
td14_CF4.txt       td14_CH4.txt       td14_GeBr4.txt     td14_GeCl4.txt     td14_GeH4.txt
td14_HfCl4.txt     td14_OsO4.txt      td14_RuO4.txt     td14_SiCl4.txt     td14_SiF4.txt
td14_SiH4.txt      td14_SnCl4.txt     td14_SnH4.txt     td14_ThCl4.txt     td14_ThF4.txt
td14_TiBr4.txt     td14_TiCl4.txt     td14_VC14.txt     td14_XeO4.txt     td14_ZrCl4.txt     td14_ZrF4.txt

```

4. 内蔵構造データを利用する場合の変更点

eduDV のデータ自動入力機能「Auto-eduDV」[8]にヘキサクロリドニホニウム酸(III)酸イオン $[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$ の構造データ(表2)を追加した。

表2. ヘキサクロリドニホニウム酸(III)酸イオン $[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$ の構造データ

使用プログラム : ml6, ml6n, ml6s	対称軌道 : c:¥dvxa¥data¥oh16
Mの原子番号 : 113	Mの酸化数 : 3.0
Lの原子番号 : 17	Lの酸化数 : -1.0
M-Lの原子間距離 (Å) : 2.5	

5. 原子番号, 原子間距離, 原子間角度, 酸化数を手入力する場合の変更点

5.1. $D_{\infty h}$ 対称【等核二原子分子】 A_2 型分子(H_2 , O_2 , N_2 など)

プログラム d8h2n を起動し, ノンスピン版の scat で水素分子(H_2)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図1に示す. 会話形式で原子番号を1, 原子間距離を0.7414 Å と入力した.

```

*** Program D(infinity)h2n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for A2 type Homonuclear Diatomic Molecule (e. g. N2)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom A, Z = ? 1

Input Distance (angstrom), A - A = ? 0.7414

```

図1. プログラム d8h2n で水素分子(H_2)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが, 今回の改訂で95から118までも入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, ニホニウム分子(Nh_2)でも計算できる.

5.2. $C_{\infty v}$ 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)

プログラム c8v11n を起動し、ノンスピンの scat で塩化水素分子(HCl)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 2 に示す。会話形式で原子番号を 1 と 17, 原子間距離を 1.2746 Å と入力した。

```
*** Program C(infinity)v11n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for AB type Linear Heteronuclear Diatomic Molecule (e. g. CO)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of atom B, Z = ? 17
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.2746
```

図 2. プログラム c8v2n で塩化水素分子(HCl)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として異核二原子分子の電子状態を計算できる。

5.3. $D_{\infty h}$ 対称【直線 AB_2 型分子】B-A-B 型分子(二酸化炭素など)

プログラム d8h12n を起動し、ノンスピンの scat で二酸化炭素分子(CO_2)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 3 に示す。会話形式で原子番号を 6 と 8, 原子間距離を 1.1600 Å と入力した。

```
*** Program D(infinity)h12n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for AB2 type Linear Triatomic Molecule (e. g. CO2)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.1600
```

図 3. プログラム d8h12n で二酸化炭素分子(CO_2)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 AB_2 (B-A-B) 型分子 ($D_{\infty h}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.4. $D_{\infty h}$ 対称【直線 A_2B_2 型分子】B-A-A-B 型分子(アセチレンなど)

プログラム d8h22n を起動し、ノンスピンの scat でアセチレン分子($H-C\equiv C-H$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 4 に示す。会話形式で原子番号を 6 と 1, 原子間距離は炭素-炭素間を 1.2024 Å, 炭素-水素間を 1.0625 Å と入力した。


```

*** Program D(infinity)h22n (Continuous Group) NON-SPIN version ***
*** for A2B2 type Linear Tetraatomic Molecule (e. g. C2H2)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.2024
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0625

```

図4. プログラム d8h22n でアセチレン分子(H-C≡C-H)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 $A_2B_2(B-A-A-B)$ 型分子 ($D_{\infty h}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.5. $C_{\infty v}$ 対称【直線 ABC 型分子】A-B-C 型分子(シアン化水素など)

プログラム c8v111n を起動し、ノンスピンの scat でシアン化水素分子(HCN)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図5に示す。会話形式で原子番号を1, 6, 7, 水素-炭素間距離を1.0650 Å, 炭素-窒素間距離を1.1532 Åと入力した。

```

*** Program C(infinity)v111n (Continuous Group) NON-SPIN version***
*** for ABC type Linear Triatomic Molecule (e. g. HCN)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 7
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.0650
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.1532

```

図5. プログラム c8v111n でシアン化水素分子(HCN)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 ABC 型分子 ($C_{\infty v}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.6. $C_{\infty v}$ 対称【直線 ABCD 型分子】A-B-C-D 型分子(HCNO など)

プログラム c8v1111n を起動し、ノンスピンの scat で HCNO 分子の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図6に示す。会話形式で原子番号を1, 6, 7, 8, 水素-炭素原子間距離を1.027 Å, 炭素

—窒素原子間距離を 1.168 Å, 窒素—酸素原子間距離を 1.199 Å と入力した。

```
*** Program C(infinity)v1111n (Continuous Group) NON-SPIN version***
*** for ABCD type Linear Tetraatomic Molecule (e. g. HCNO)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom A, Z = ? 1
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom C, Z = ? 7
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom D, Z = ? 8
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.027
Input Distance (angstrom), B - C = ? 1.168
Input Distance (angstrom), C - D = ? 1.199
```

図6. プログラム c8v1111n で HCNO 分子を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として直線 ABCD 型分子 ($C_{\infty v}$ 対称) の電子状態を計算できる。

5.7. C_{2v} 対称 【折れ線 AB_2 型分子】 AB_2 型分子(水や硫化水素など)

プログラム c2v12n を起動し、ノンスピンの scat で水分子(H_2O)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図7に示す。会話形式で原子番号を8と1, 酸素—水素原子間距離を 0.9579 Å, 水素—酸素—水素原子間角度を 104.50° と入力した。

```
*** Program C2v12n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB2 type molecule (e. g. H2O)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 8
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - B = ? 0.9579
Input Angle (degree) ( 0 deg. < Angle < 180 deg.), B-A-B = ? 104.50
```

図7. プログラム c2v12n で水分子(H_2O)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として折れ

線 AB_2 型分子 (C_{2v} 対称) の電子状態を計算できる.

5.8. C_{3v} 対称 【三角錐 AB_3 型分子】 AB_3 型分子(アンモニアなど)

プログラム c3v13n を起動し, ノンスピン版の scat でアンモニア分子(NH_3)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 8 に示す. 会話形式で原子番号を 7 と 1, 窒素-水素原子間距離を 1.012 Å, 水素-窒素-水素原子間角度を 106.7° と入力した.

```
*** Program C3v13n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB3 type molecule (e. g. NH3)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 7
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.012
Input Angle (degree) ( 0 deg. < Angle < 120 deg.), B-A-B = ? 106.7
```

図 8. プログラム c3v13n でアンモニア分子(NH_3)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 までも入力できるようになった. 原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として三角錐 AB_3 型分子 (C_{3v} 対称) の電子状態を計算できる.

5.9. D_{2h} 対称 【エチレン型(平面)分子】 A_2B_4 型分子(エチレンなど)

プログラム d2h24n[6]を起動し, ノンスピン版の scat でエチレン分子($H_2C=CH_2$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 9 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 炭素-炭素原子間距離を 1.339 Å, 炭素-水素原子間距離を 1.087 Å, 水素-炭素-水素原子間角度を 117.4° と入力した.

```
*** Program D2h24 (symOrb NON-SPIN version)
*** for A2B4 type molecule (e. g. C2H4)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - A = ? 1.339
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.087
Input Angle (degree) ( 0 deg. < Angle < 180 deg.), B-A-B = ? 117.4
```

図 9. プログラム d2h24n でエチレン分子($H_2C=CH_2$)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてエチレン型(A_2B_4 型)分子 (D_{2h} 対称) の電子状態を計算できる。

5.10. D_{3d} 対称 【エタン型(ねじれ形)分子】 A_2B_6 型分子(エタンなど)

プログラム d3d26n[7]を起動し、ノンスピンの scat でエタン分子(C_2H_6) (ねじれ形) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図10に示す。会話形式で原子番号を6と1, 炭素-炭素原子間距離を1.5351 Å, 炭素-水素原子間距離を1.0940 Å, 炭素-炭素-水素原子間角度を111.17° と入力した。

```
*** Program D3d26 (symOrb NON-SPIN version)
*** for A2B6 type molecule (e. g. C2H6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - A = ? 1.5351
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.0940
Input Angle (degree) ( 90 deg. < Angle < 180 deg.), A-A-B = ? 111.17
```

図10. プログラム d3d26n でエタン分子(C_2H_6) (ねじれ形配座) を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離と原子間角度さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてエタン型 (A_2B_6 型) (ねじれ形配座) 分子 (D_{3d} 対称) の電子状態を計算できる。

5.11. D_{3h} 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)

プログラム d3h13n を起動し、ノンスピンの scat で三フッ化ホウ素分子(BF_3)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図11に示す。会話形式で原子番号を5と9, ホウ素-フッ素原子間距離を1.3070 Åと入力した。

```
*** Program D3h13n (symOrb NON-SPIN version)
*** for AB3 type Molecule (e. g. BF3)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 5
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 9
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.3070
```

図11. プログラム d3h13n で三フッ化ホウ素分子(BF_3)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として平面正三角形 AB_3 型分子 (D_{3h} 対称) の電子状態を計算できる。

5.12. D_{4h} 対称 【平面正方形型イオン】 AB_4 型錯イオン ($[PtCl_4]^{2-}$ など)

プログラム d4h14n を起動し、ノンスピンの scat でテトラクロリド白金 (II) 酸イオン ($[Pt^{II}Cl_4]^{2-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 2 に示す。会話形式で原子番号を 78、白金の酸化数を 2、原子番号を 17、塩素の酸化数を -1、白金-塩素原子間距離を 2.308 Å と入力した。

```
*** Program D4h14n (symOrb NON-SPIN version) *** for [AB4]n+ or [AB4]n-
ype Complex Ion (e. g. [PtCl4]2-)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 78
Input Charge (Oxidation Number) of Central Atom A = ? 2
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal atom B, Z = ? 17
Input Charge (Oxidation Number) of Terminal Atom B = ? -1
Input Distance (angstrom), A - B = ? 2.308
```

図 1 2. プログラム d4h14n でテトラクロリド白金 (II) 酸イオン ($[Pt^{II}Cl_4]^{2-}$) を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として平面正方形 $[AB_4]^{n+/n-}$ 型錯イオン (D_{4h} 対称) の電子状態を計算できる (例えば、テトラクロリドダームスタチウム (II) 酸イオン ($[Ds^{II}Cl_4]^{2-}$) やテトラクロリドレントゲニウム (III) 酸イオン ($[Rg^{III}Cl_4]$) など)。

5.13. D_{6h} 対称 【平面正六角形型分子】 A_6B_6 型分子 (ベンゼン など)

プログラム d6h66n を起動し、ノンスピンの scat でベンゼン分子 (C_6H_6) の電子状態を計算する際のコ

```
*** Program D6h66n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A6B6 type Molecule (e. g. C6H6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Inner Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - A = ? 1.399
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.101
```

図 1 3. プログラム d6h66n でベンゼン分子 (C_6H_6) を計算する

マンドプロンプト画面を図 1 3 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 炭素-炭素原子間距離を 1.399 Å, 炭素-水素原子間距離を 1.101 Å と入力した.

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として平面正六角形型 (A_6B_6 型) 分子 (D_{6h} 対称) の電子状態を計算できる.

5.14. 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)

プログラム td14n を起動し, ノンスピン版の scat でメタン分子(CH_4)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 4 に示す. 会話形式で原子番号を 6 と 1, 原子間距離を 1.0870 Å と入力した.

```
*** Program Td14n (sym0rb NON-SPIN version)
*** for AB4 type Molecule (e. g. CH4)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.0870
```

図 1 4. プログラム td14n でメタン分子(CH_4)を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが, 今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった. 原子間距離さえ仮定できれば, 周期表の全元素を対象として正四面体型 (AB_4 型) 分子 (T_d 対称) の電子状態を計算できる.

5.15. O_h 対称 【正八面体型分子】 AB_6 型分子(六フッ化硫黄や六フッ化ウランなど)

プログラム oh16n を起動し, ノンスピン版の scat で六フッ化ウラン分子(UF_6)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 5 に示す. 会話形式で原子番号を 92 と 9, 原子間距離を 1.9962 Å と入力した.

```
*** Program Oh16n (sym0rb NON-SPIN version)
*** for AB6 type molecule (e. g. SF6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of central atom A, Z = ? 92
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of terminal atom B, Z = ? 9
Input Distance (angstrom), A - B = ? 1.9962
```

図 1 5. プログラム oh16n で六フッ化ウラン分子(UF_6)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 (AB_6 型) 分子 (O_h 対称) の電子状態を計算できる。

5.16. T_d 対称 【正四面体型分子】 $[A(BC)_4]$ 型錯体($[Ni(CO)_4]$ など)

プログラム td144n を起動し、ノンスピンの scat でテトラカルボニルニッケル錯体分子($[Ni(CO)_4]$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図16に示す。会話形式で原子番号を28, 6, 8, ニッケル-炭素原子間距離を1.838 Å, 炭素-酸素原子間距離を1.141 Åと入力した。

```
*** Program Td144n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A(BC)4 type Molecule (e. g. Ni(CO)4)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 28
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Middle Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.838
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.141
```

図16. プログラム td144n でテトラカルボニルニッケル錯体分子($[Ni(CO)_4]$)を計算する

これまでは原子番号として1から94までしか入力できなかったが、今回の改訂で95から118までも入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正四面体型 $A(BC)_4$ 型分子 (T_d 対称) の電子状態を計算できる。

5.17. O_h 対称 【正八面体型分子】 $[A(BC)_6]$ 型錯体($[Cr(CO)_6]$ など)

```
*** Program Oh166n (symOrb NON-SPIN version)
*** for A(BC)6 type Molecule (e. g. Cr(CO)6)

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom A, Z = ? 24
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Middle Atom B, Z = ? 6
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom C, Z = ? 8
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.92
Input Distance(angstrom), B - C = ? 1.16
```

図17. プログラム oh166n でヘキサカルボニルクロム錯体分子($[Cr(CO)_6]$)を計算する

プログラム oh166n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサカルボニルクロム錯体分子($[\text{Cr}(\text{CO})_6]$)の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 7 に示す。会話形式で原子番号を 24, 6, 8, クロム-炭素原子間距離を 1.92 Å, 炭素-酸素原子間距離を 1.16 Å と入力した。

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 $\text{A}(\text{BC})_6$ 型分子 (O_h 対称) の電子状態を計算できる。

5.18. D_{2h} 対称 【正八面体型イオン】 $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{n+}$ アクア錯イオン

プログラム mh2o6n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサアクア亜鉛 (II) イオン ($[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 1 8 に示す。会話形式で原子番号を 30, 亜鉛-酸素原子間距離を 2.097 Å, 亜鉛の酸化数を 2 と入力した。

```
*** Program MH206n (symOrb NON-SPIN version) *** for [M(H2O)6]n+ type Aqua Complex Cation
*** Bond Distance (angstrom) O-H = 0.9579
*** Bond Angle (degree) H-O-H = 104.50
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Metal Atom M, Z = ? 30
Input Distance(angstrom), M - O (OH2) = ? 2.097
Input Oxidation Number of Metal Atom, [M(H2O)6]n+, n = ? 2
```

図 1 8. プログラム mh2o6n でヘキサアクア亜鉛 (II) イオン ($[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象としてヘキサアクア金属錯陽イオン ($[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_6]^{n+}$) (D_{2h} 対称) の電子状態を計算できる。

5.19. T_d 対称 【正四面体型イオン】 $[\text{M}(\text{L})_4]^{n+}$ or $[\text{M}(\text{L})_4]^{n-}$ 錯イオン

```
*** Program ML4n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML4]n+ or [ML4]n- type Complex Ion
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 27
Input Charge(Oxidation Number) of Central Atom M = ? 2
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 17
Input Charge(Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance(angstrom), M - L = ? 2.254
```

図 1 9. プログラム ml4n でテトラクロリドコバルト (II) 酸イオン ($[\text{Co}^{\text{II}}\text{Cl}_4]^{2-}$) を計算する

プログラム ml4n を起動し、ノンスピンの scat でテトラクロリドコバルト (II) 酸イオン ($[\text{Co}^{\text{II}}\text{Cl}_4]^{2-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 19 に示す。会話形式で原子番号を 27, コバルトの酸化数を 2, 原子番号を 17, 塩素の酸化数を -1, コバルト-塩素原子間距離を 2.254 Å と入力した。

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正四面体型 (ML₄型) 錯イオン (M = 金属イオン, L = 配位子) (T_d対称) の電子状態を計算できる。

5.20. O_h対称 【正八面体型イオン】 [M(L)₆]ⁿ⁺ or [M(L)₆]ⁿ⁻ 錯イオン

プログラム ml6n を起動し、ノンスピンの scat でヘキサヨージドクロム (III) 酸イオン ($[\text{Cr}^{\text{III}}\text{I}_6]^{3-}$) の電子状態を計算する際のコマンドプロンプト画面を図 20 に示す。会話形式で原子番号を 24, クロムの酸化数を 3, 原子番号を 53, ヨウ素の酸化数を -1, クロム-ヨウ素原子間距離を 2.782 Å と入力した。

```
*** Program ML6n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML6]n+ or [ML6]n- type Complex Ion

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 24
Input Charge(Oxidation Number) of Central Atom M = ? 3
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 53
Input Charge(Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance(angstrom), M - L = ? 2.782
```

図 20. プログラム ml6n でヘキサヨージドクロム (III) 酸イオン ($[\text{Cr}^{\text{III}}\text{I}_6]^{3-}$) を計算する

これまでは原子番号として 1 から 94 までしか入力できなかったが、今回の改訂で 95 から 118 まで入力できるようになった。原子間距離さえ仮定できれば、周期表の全元素を対象として正八面体型 (ML₆型) 錯イオン (M = 金属イオン, L = 配位子) (O_h対称) の電子状態を計算できる。

6. 計算例

プログラム ml6n でヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン ($[\text{Nh}^{\text{III}}\text{Cl}_6]^{3-}$) の電子状態を計算した。MSCF= SCFS[20], ニホニウム原子の使用原子軌道 (基底関数) は 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p, 6d, 7s, 7p, 塩素原子の使用原子軌道 (基底関数) は 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, サンプル点数は 20000 点, 原子軌道数は 25, 全電子数は 218 である。ニホニウムイオン, 塩化物イオンの初期電子配置[9]は $_{113}\text{Nh}^{3+}$: 1s²2s²2p⁶3s²3p⁶3d¹⁰4s²4p⁶4d¹⁰4f¹⁴5s²5p⁶5d¹⁰5f¹⁴6s²6p⁶6d¹⁰7s⁰7p⁰, $_{17}\text{Cl}$: 1s²2s²2p⁶3s²3p⁶3d⁰ とした。

DV-Xα 法のための統合支援環境[4, 30]で, 上方ツールバーの右端の[eduDV]ボタンを押し, 現れたプルダウンメニューの[20. O_h対称 【正八面体型イオン】 [M(L)₆]ⁿ⁺ or [M(L)₆]ⁿ⁻ 錯イオン...]を選び (図 21), ノンスピンの ml6n を起動した (図 22)。

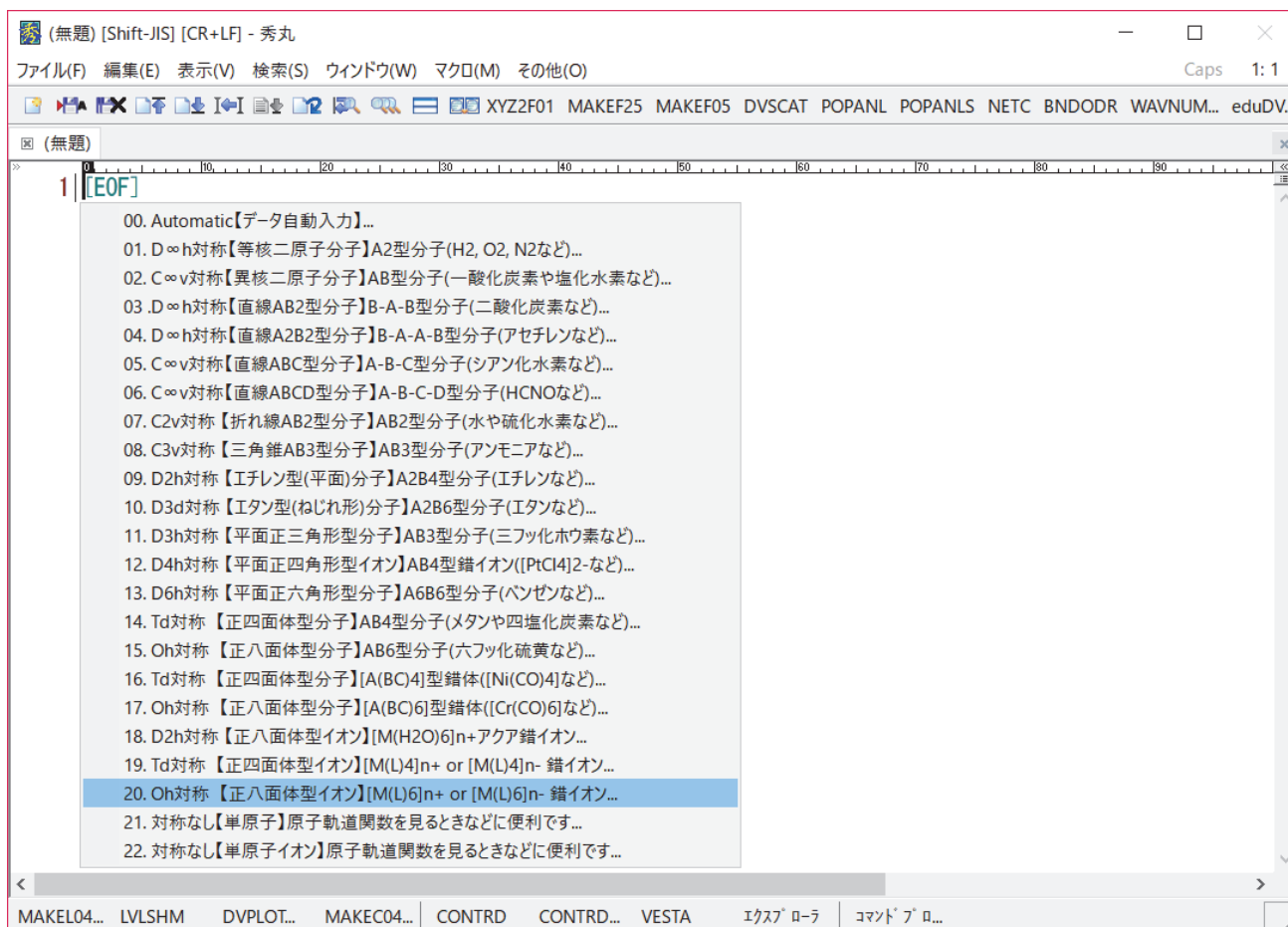


図 2 1. [20. Oh 対称【正八面体型イオン】[M(L)₆]ⁿ⁺ or [M(L)₆]ⁿ⁻ 錯イオン...] を選択する

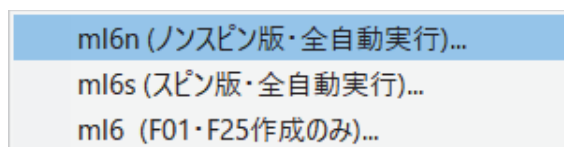


図 2 2. ノンスピ版 ml6n を起動する

```

*** Program ML6n (symOrb NON-SPIN version)
*** for [ML6]n+ or [ML6]n- type Complex Ion

Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Central Atom M, Z = ? 113
Input Charge (Oxidation Number) of Central Atom M = ? 3
Input Atomic Number (Z) (1 <= Z <= 118) of Terminal Atom L, Z = ? 17
Input Charge (Oxidation Number) of Terminal Atom L = ? -1
Input Distance (angstrom), M - L = ? 2.5
    
```

図 2 3. プログラム ml6n でヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン([Nh^{III}Cl₆]³⁻)を計算する

コマンドプロンプト画面にて、会話形式で原子番号を 113, ニホニウムの酸化数を 3, 原子番号を 17, 塩素の酸化数を-1, ニホニウム-塩素原子間距離を 2.5 Åと入力した (図 2 3). 自動作成された F01 を 図 2 4 に示す.

Z	NEQ	X	Y	Z	
113	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
17	2	2.50000	0.00000	0.00000	↓
17	2	-2.50000	0.00000	0.00000	↓
17	2	0.00000	2.50000	0.00000	↓
17	2	0.00000	-2.50000	0.00000	↓
17	2	0.00000	0.00000	2.50000	↓
17	2	0.00000	0.00000	-2.50000	↓

NEQ	CHG	U/D	RD	VD	
1	3.00000				↓
2	-1.00000				↓

0	Unit	(0:angstrom 1:atomic)	↓
0	Spin	(0:non-spin 1:spin)	↓
0	M. P.	(0:No 1:Yes)	↓
20000	Sample Point	(<100000, =0 autosest)	↓

図 2 4. ヘキサクロリドニホニウム (III) 酸イオン([Nh^{III}Cl₆)³⁻)の F01

自動実行されたプログラム BNDODR の出力ファイル bn8 (図 2 5) を見ると、マリケンの電子密度解析で求めたニホニウム-塩素間の有効共有結合電荷[32]は 0.288 であった ((1.3422 + 0.3881) ÷ 6 = 0.288).

BOND OVERLAP POPULATION BETWEEN ATOMS ↓							
	(1 Nh)	(2 Cl)	(3 Cl)	(4 Cl)	(5 Cl)	(6 Cl)	(7 Cl)
(1)	111.5017						
(2)	1.3422	57.4458					
(3)	0.0000	0.0000	0.0000				
(4)	0.3881	0.1540	0.0000	47.1682			
(5)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
(6)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
(7)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

図 2 5. 有効共有結合電荷(Overlap Population)

同様に自動実行されたプログラム NETC の出力ファイル i08 (図 2 6) を見ると、マリケンの電子密度解析で求めたニホニウムおよび塩素の正味の電荷[32]はそれぞれ, Nh: +0.633, Cl: -0.606 であった.

EFFECTIVE CHARGE ↓			
LO			NET CHARGE ↓
1	Nh	112.36686	0.63314
2	Cl	17.60552	-0.60552

図 2 6. 正味の電荷(Net Charge)

プログラム MAKEC04D で c04d を作成し (図 2 7), プログラム CONTRD を実行して HOMO($9e_g$)および LUMO($12a_{1g}$)の波動関数ボックスデータファイルを作成した. VESTA[28, 29]で描いた HOMO($9e_g$)を 図 2 8 に, LUMO($12a_{1g}$)を 図 2 9 に示す.

プログラム MAKED04 で d04, d05 を作成し, プログラム DOS を実行して描いた状態密度曲線を 図 3 0 に示す.

251	251	251↓	
20.00000	20.00000	20.00000↓	
0.00000	0.00000	0.00000↓	
3	23	34	12↓
↓			
HOMO:	10.5202 eV	[23][34]↓	
LUMO:	16.9842 eV	[12]↓	

図 2 7. CONTRD の入力ファイル c04d

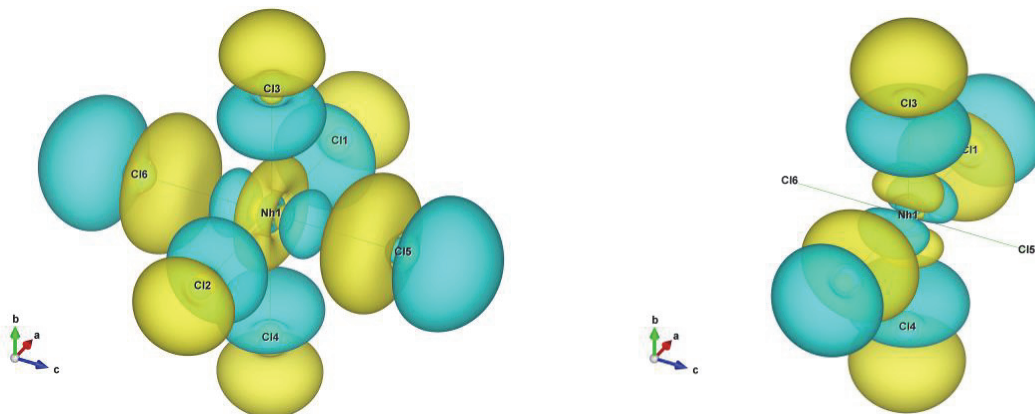


図 2 8. HOMO($9e_g$)の等値表面図

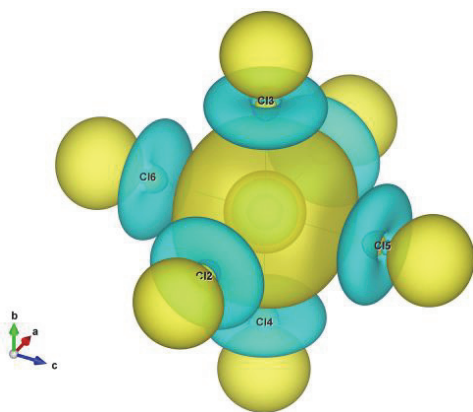


図 2 9. LUMO($12a_{1g}$)の等値表面図

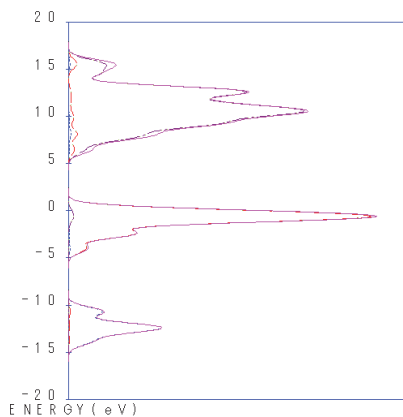


図 3 0. 状態密度曲線

7. まとめ

eduDV に含まれる 60 個のプログラムで, 原子番号 95 番のアメリカシウム($_{95}\text{Am}$)から 118 番のオガネソン ($_{118}\text{Og}$)まで計算できるようになった. これにより教育用分子軌道計算システム eduDV は, 全プログラム (84 個)が周期表全元素 (原子番号 118 番まで) に対応できた.

eduDV を含む DV-X α 法のための統合支援環境[4, 30]は本学情報処理センターのコンピュータ実習室の

すべてのパソコンにインストールしてあり、筆者の担当する講義科目「現代人の科学 D (コンピュータで理解する周期表の世界)」(理学部・工学部・総合情報学部・生物地球学部・経営学部対象) および「錯体化学 II」(大学院理学研究科化学専攻対象) で教材として活用している。小さすぎて実感することが困難な量子化学の世界を DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 30]は、メニューから原子・分子を選択したり、計算に必要な最低限の数字(原子番号, 酸化数, 原子間距離, 原子間角度)を入力するだけで、計算して三次元可視化できる。周期表の全元素を同じ精度で取り扱えるのも DV- $X\alpha$ 法の特長の一つである。

2016年に原子番号113番元素ニホニウム(Nh, Nihonium), 115番元素モスコビウム(Mc, Moscovium), 117番元素テネシン(Ts, Tennessine), 118番元素オガネソン(Og, Oganesson)の元素名が正式に決定し、周期表は第7周期まですべての枠が元素で埋まった。日本で発見されたニホニウムも含んで、周期表のどの元素でも自由に計算できる楽しさは、受講生の好奇心を刺激することに成功している。

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, “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>
- [13] 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 (2014),

<http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>

- [14] 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
- [15] 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).
- [16] 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.
- [17] 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).
- [18] 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).
- [19] 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).
- [20] 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).
- [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] 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).
- [23] 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).
- [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] “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 2.02,
http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/dvxa_assistance_environment_2.html
- [26] 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>
- [27] 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
- [28] 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>
- [29] 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
- [30] 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.
- [31] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>
- [32] 足立裕彦, “量子材料化学の基礎”, 三共出版 2017 年.

高感度磁化率測定装置の冷却系と温度モニタリングの改良

Improvement of cooling and oil-temperature monitoring of the MPMS

畠山唯達* (岡山理科大学 情報処理センター)

満身 稔 (岡山理科大学 理学部 化学科)

Tadahiro Hatakeyama (Information Processing Center, Okayama University of Science)

Minoru Mitsumi (Department of Chemistry, Okayama University of Science)

Here, we report a provision against the emergency stops of the Magnetic Property Measurement System (MPMS) instrument due to the over temperature error occurring in the oil-cooling unit of the instrument. The provision is to ensure the airflow in the heat exchange room of the outdoor unit. We have also improve the monitoring of the oil temperature of the instrument.

はじめに

昨年の報告^[1]にて、岡山理科大学総合機器センター設置の高感度磁化率測定装置 (Magnetic Property Measurement System: MPMS) の冷却系において劣化に伴って表面化する構造的な問題および気温と連動した油温のモニタリングについて報告をした。その中で、装置の液体ヘリウムデュワー内の蒸発ガス圧に応じて冷却ポンプが約 25 分周期で働き、観測される油冷却系の温度の 25 分変動内の最高値が $T_{Omin} = 0.647T_A + 82.1$ という式に従うと推定した (T_A は岡山地方気象台発表の気温の 1 時間値)。油循環系ではサーモスタットが油温 110°C で稼働し、異常高温 (Over Temperature) としてシャットダウンするようになってきているが、上式に従うと気温が 43°C ほどで落ちることになる。しかし、実際には 30°C 台後半の気温時に落ちてしまっているため、予測として使用するには問題がある。また、予測ができていても実際に異常高温を起こしてしまう現象を防ぐことはできない。そこで、今回は、冷却系に手を介入して異常高温とそれに伴う緊急停止を防ぐ処置をしたこと、および、新たな温度モニタリングについて行ったことを報告する。

温度モニタリングについて

図 1 は米国カンタム・デザイン社製 MPMS 装置 XL-5^[2]の冷却系 (ヘリウムを液化する EverCool と呼ばれる装置とその冷却系) を示す。問題となっているのは 2 次冷却系 (図中 E) である油循環系の温度である。室外機のうち、左側の部分 (1 次系と 2 次系の熱交換

*Corresponding author: 岡山市北区理大町, hatake@center.ous.ac.jp

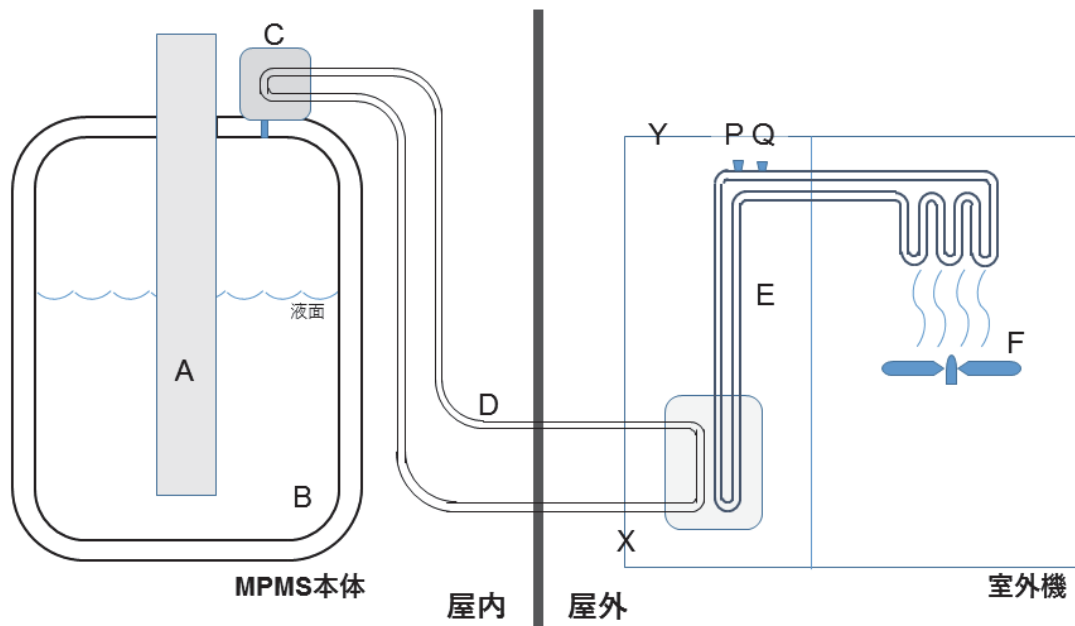


図1 MPMS-XL5におけるヘリウム液化オプションの冷却システムの模式図。A: サンプル空間, B: 液体ヘリウムデュワー, C: 冷凍機コールドヘッド, D: ヘリウムガス冷媒, E: 油配管系, F: 空冷用ファン, P: 冷凍機用温度センサーの取り付け位置, Q: 温度モニタリングを行う熱電対を貼り付けた位置, X: 今回開けた吸気口, Y: 今回開けた排気口 (ファン設置)。本図は昨年の報告の図に加筆。

を行う部分)には油をまわすためにポンプがあるが、この空間は閉じていて外気との入れ替えなどが無い。そのため、ポンプ自体の発熱の冷却も油による輸送を行い隣室にて空冷をする必要がある。冷却機、とくに室外機が新しい頃は空冷部 (F) の性能などにより油温も高くならなかったが、設置から十数年たち、熱のくみ出しが追い付かなくなったりポンプ自体の効率が落ちてしまったりして、熱がこもるという構造的な問題が表面化して油温が想定より高くなってしまっているようである。結果として系全体がうまく冷却できず、Pに設置された温度計が規定温度よりも高くなって Over Temperature のエラーを起こし冷却系全体が緊急停止をする。冷却系 (液化器) が機能しなくなると、1~2日程度でデュワーB内の液体ヘリウムがガスとなって安全弁より逃げってしまうため、不要な停止は避けなければならない。

図1中、CのコールドヘッドはB部分の気化によるガス圧上昇を補うように液化を25分間隔 (試料空間300Kにおける運転時) で運転と停止を繰り返しており、それに応じて油温 (P, Q) も25分ほどで約4°Cの幅をもって上下を繰り返している。前回の報告では、装置サーモスタットPのそばに設置した熱電対についてスタンドアロンの温度ロガーを使って

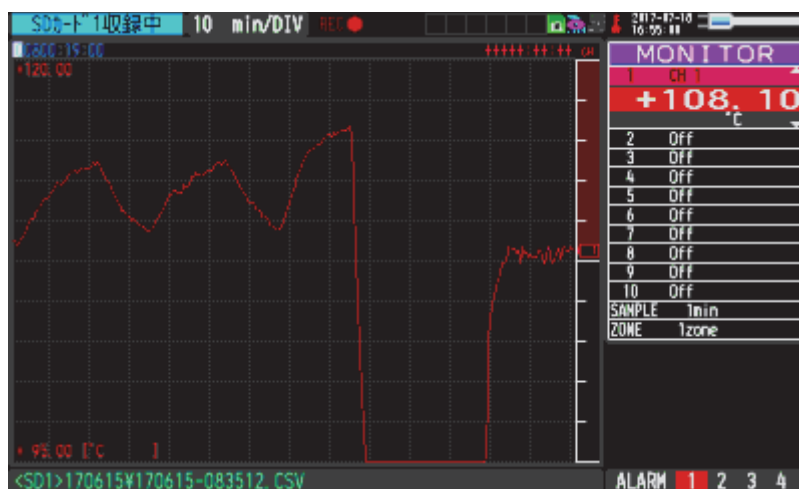


図 2 GL840 の画面。この画面はコンソールとネットワーク越しで共通。画面への表示と同時に 1 分毎のデータをメモリに記録している。上図では、途中で Over Temperature エラーが起こったため冷却機が停止し、油温が下がっていることがわかる。

測定していたが、今回はグラフテック社製ネットワーク対応ロガーGL840 を用いて連続的に測定を行った (図 2)。また、学外滞在時にも油温を監視できるように、実験室ファイアウォール (FW) 内に設置している GL840 の画面を学内別サーバーに送り、公開サーバーにて大学 FW 外のネット環境からも閲覧できるようにした。なお、前回報告の後で熱電対の位置が微妙に変わっていることと、ロガー内部温度計の特性が変わっているためか、若干温度に差異があるようである。

室外機の油温低下への工夫

上述の通り、MPMS 冷却系が Over Temperature を起こす原因は、室外機油温部の高温にあり、その一端はヘリウムガスと油の間で熱を交換する部分 (ポンプ) および油の熱がこもることにある。そこで今回は、この熱交換部分を含む一室 (閉鎖系) の内部についてその空気ごと冷却を施すことにした。具体的には、内部に雨滴等が入らないよう工夫しながら、吸気口および排気口を開け換気を促す。室内では下部から外気を吸気し、ポンプと油配管で温められた空気は上部から排気される。さらに、上部排気口には排気ファンを取り付け、連続運転を行った (図 3)。排気ファンは屋外トイレ用のものを使用し、耐候性と連続運転耐性を確保している。ファンの流量は $110\text{m}^3/\text{h}$ で、幅 3cm 程度の全周排気口からは、台風時にも逆流しない十分な風が湧き出している。ポンプ室そのものを冷やすという対策法は、これまでの温度モニタリングにおいても、降水時に室外機のカバーが水冷され内部温度および油温が低下することから、直接的に有効であろうことは想定されていた。



図3 (A) 室外機の熱交換部分（ヘリウム \leftrightarrow 油）の上下に穴を開け、上部（図1のYに対応）にファンを取り付けた。(B) 下部吸気口（図1のXに対応）にはアルミ製パイプフードを設置している。なお、側面のアルミ製放熱フィンも熱交換部分の冷却をするために取り付けたものであるが、ほとんど効果がなかった。

図4に吸気口・排気口および排気ファンの設置前後における油温（図1のQ点に設置したK型熱電対の指標温度）の変化を示す。測定のために試料空間を低温にしてコールドヘッドを作動させる間隔が短くなっている期間や降水があった期間を除けば、気温（岡山地方気象台発表の1時間値^[3]）に対して85℃ほど高く推移していたものが、本対策の施工以降では明らかに油温が低下していることがわかる。熱電対Qの示す温度と機器附属のサーモスタットPが示す温度に違いがあるためかどうかはわからないが、Qの温度が117~120℃になるころにOver Temperatureを起こしていることがわかる（図中の油温が極端に落ちている場所）。処置前ではこれが起こるのは気温が33~34℃になる時と対応している。現在の岡山では、7月上旬の晴天日には午後1~3時にこの気温に達することがよくあり、まだまだ岡山地方の年間最高気温には達していない。したがって、対策を施さないままでは7月以降常に冷却機が停止する可能性を考慮しながら測定する必要があった。本対策によってこの心配が遠くなったことは大きな成果である。

上述の熱対策によって、指標油温と気温の関係がどうなっているか、また、対策がどれほど効果を持っているかを調べるために、油温の25分平均およびその区間の最高・最低温度

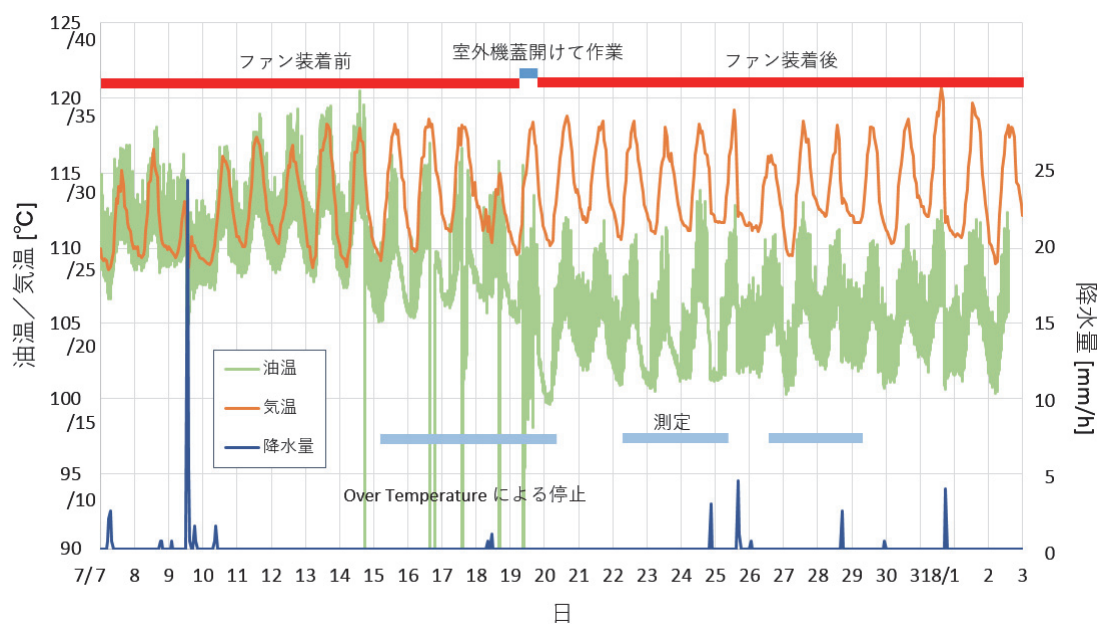


図 4 7/7~8/2 の間の油温、気温、および降水量。油温は 25 分変動を含むため幅が広く見える。この期間では 7/15~19 の間に冷却系の非常停止が 5 回起こり、そのたびに油温は範囲外まで低下している。降水に関する考察は昨年の報告書を参照。

を読み出し、これと気温の 1 時間値を比較した。図 5 (A) は対策後の 25 分平均・最高・最低温度と気温の関係を示すグラフである。3 つの分布に対して回帰直線を引いて気温—油温関係を求めたところ、

$$25 \text{ 分変動内の最低油温} : T_{Omin} = 0.565 T_A + 87.0 \quad (1)$$

$$25 \text{ 分変動内の平均油温} : T_{Oave} = 0.625 T_A + 87.3 \quad (2)$$

$$25 \text{ 分変動内の最高油温} : T_{Omax} = 0.667 T_A + 88.4 \quad (3)$$

となった (T_A は気温)。最高気温のばらつきが回帰直線より 1.5°C ほど上までであることを考えれば、対策後に高温による停止が起こる気温は $40\sim 41^\circ\text{C}$ と想定される。

図 5 (B) には対策前後の 25 分平均油温と気温の関係を示した。これによれば、対策前後で、油温は $6\sim 7^\circ\text{C}$ ほど低下していることがわかる。グラフの傾きが 1 より小さいことを考えれば、気温に対する効果はもう少し大きいと考えるのが妥当である。

まとめ

岡山理科大学総合機器センターMPMS 装置において、ここ数年来の問題であった冷却機の停止に関する対策が一応効果を見た。また、リアルタイムに温度を監視するシステムも整備し、複数のユーザーが異常停止に気づくことができる仕組みを作ることもできた。しかし、実際にはこの後、一年で最も気温が高い 8 月下旬に同装置は異常高温で停止してしまった。

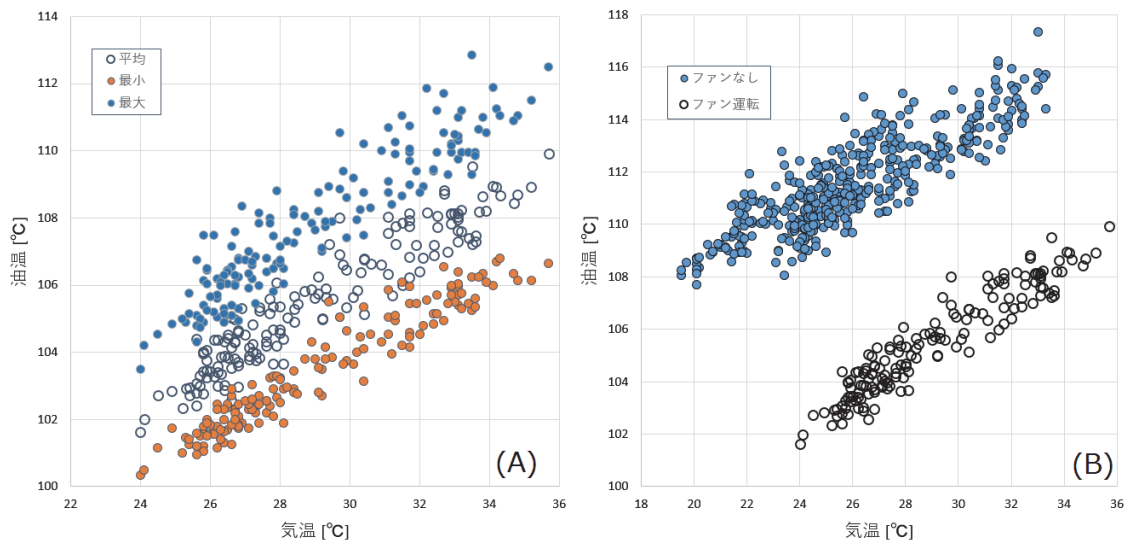


図5 (A)冷却ファン取り付け後の油温モニターにおける1サイクル(25分間)内の気温に対する平均、最小、最大温度。(B)冷却ファン取り付け前後の気温-油温関係。それぞれ、2mm以上の降水の前後や低温測定時など気温が油温に対して低下する時間帯を除いてある。

追加の冷却対策が必要である。今後は、エアフローの改善等を行い、停止が行らなくなるようにするとともに、異常高温や不意の停電で停止した際のアラートを携帯電話で受けるなどのシステムを構築していくつもりである。

謝辞

日本カンタム・デザイン株式会社 MPMS テクニカルサポートグループの池田将洋氏には日々の運用とメンテナンスについてサポート頂いているのみならず、今回の処置に関してご助言を頂き感謝しております。岡山理科大学総合機器センターの池田正五センター長ならびに船本利春氏には運用面でお世話になっております。また、岡山理科大学 MPMS 利用ユーザーには機器停止等でご迷惑お掛けするだけでなく、各種ご協力頂き感謝しております。筆者らが本機器を用いて行った磁気測定には科研費補助金のサポートを受けております。

参考

- [1] 畠山唯達, 高感度磁化率測定装置の冷却系温度モニタリング, 2016, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, 37, 17-22.
- [2] Quantum Design Inc., 2002, Magnetic Property Measurement System, EverCool Dewar Option User's Manual, 2nd Ed., 95pp.
- [3] 気象庁, 2017, 「過去の気象データダウンロード」ページ, <http://www.data.jma.go.jp/gmd/risk/obsdl/index.php>