

情報処理センター  
研 究 報 告

The Bulletin of the Information Processing Center

第 39 号

(2018.3)

岡山理科大学

Okayama University of Science

岡山市北区理大町 1-1

Tel(086) 256-8485 (直)

# 目 次

1. 教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (9) .....	1
理学部 化学科	坂根 弦太
2. 各種試料および測定データの簡易統合管理システム.....	21
情報処理センター	畠山 唯達



# 教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (9)

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[5-12], 最新版のプログラム一式[13], マニュアル[14], 論文[15], 書籍[16]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, 16]は, eduDV[1-16], DV- $X\alpha$ 法[16-30], 秀丸エディタ[31], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[32], VESTA[33, 34]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.

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.

これまで教育用分子軌道計算システム eduDV で計算できる分子は, 対称性を有し, 対称軌道を使用するもののみであった. 今回, 対称性のない分子を eduDV に登録する方法を開拓したので報告する.

## 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)[35]をインストールした環境を用いた.

## 3. 対称性のない分子を eduDV に登録する方法

文献[36]より得た分子の原子間距離・角度の情報から Z 行列[37]を作成, 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 書式に変換して, f01 ファイルを eduDV に登録する.

### 3-1. 化学便覧[36]

一般的な分子の構造を得るとき, Access Structure[39] で CIF[40]を入手する方法もあるが, 見つからない場合, あるいは同じ分子に対してのヒット数が多すぎてどの CIF を選択すれば良いか分からない場合がある. また一般的な分子の構造は, 結晶の X 線構造解析から求められているとは限らず, 気相でマイクロ波分光, 電子線回折, 赤外分光, ラマン分光, 紫外可視分光, 核磁気共鳴, レーザー磁気共鳴, 常磁性共鳴から求められている場合も多い. 教育現場で教科書に登場する一般的な分子を eduDV に登録するには, 結晶から求めた分子構造, かつ, 気相から求めた分子構造が掲載されている化学便覧[36]の「分子構造と結晶構造」が好適である.

### 3-2. Z行列[37]

化学便覧[36]の「16分子構造と結晶構造」の表16.1「二原子分子の平衡原子間距離  $r_e/\text{\AA}$ 」, 表16.2「単体および無機分子の構造定数」, 表16.3「有機化合物の構造定数」には, 構造定数として原子間距離・角度の情報しか掲載されていない。

Z行列[37]では, 1原子目を原点に置き, 2原子目は直交座標系の軸の1つに置く。2原子目の座標を決定するためには原点からの距離のみを入力すれば良い。3原子目は2原子目からの距離, 1原子目-2原子目-3原子目の角度を入力する。4原子目以降は, 距離, 角度に加えて二面角の情報を入力する必要がある。原点に原子を置きたくない場合は, ダミー原子を原点に置けば良い。

Z行列を用いれば, 化学便覧[36]の構造定数を入力値として座標ファイルを構築できる。

### 3-3. Open Babel[38]

DV- $X\alpha$ 法には Z 行列を読み込む機能がないため, Z 行列を直交座標に変換する必要がある。Open Babel[38]は, 化学構造の書式を変換できるソフトウェアで, 無償で使うことができる。現在 Open Babel (Version 2.4.1) は 110 種類の書式に対応しており, gzmat 書式 (Gaussian Z-Matrix Input, Z 行列) を, xyz 書式 (XYZ Cartesian coordinates format, 直交座標) に変換することができる。

### 3-4. xyz2f01[4]

DV- $X\alpha$ 分子軌道計算プログラムの入力ファイルは f01 書式である[16, 22]。DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4]には, xyz 書式を f01 書式に変換するプログラム xyz2f01.exe が含まれている。

## 4. アクリルアルデヒド (アクロレイン)

化学便覧[36]の表16.3「有機化合物の構造定数」によると, アクリルアルデヒド (アクロレイン, 図1, CAS[107-02-8]) の *s*-トランス形 (ジエンにおける単結合で, 二重結合のある部分がトランス体のような配座をとる場合) と *s*-シス形 (ジエンにおける単結合で, 二重結合のある部分がシス体のような配座をとる場合) の構造定数は, 表1に示す通りである。

表1. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の構造定数

	<i>s</i> -トランス形	<i>s</i> -シス形
$C_b-C_c$	1.468 $\text{\AA}$	1.479 $\text{\AA}$
$C_a=C_b$	1.341 $\text{\AA}$	1.339 $\text{\AA}$
$C_c=O$	1.215 $\text{\AA}$	1.213 $\text{\AA}$
$C_a-H$	1.089 $\text{\AA}$	1.099 $\text{\AA}$
$C_a-H'$	1.081 $\text{\AA}$	1.081 $\text{\AA}$
$C_b-H$	1.084 $\text{\AA}$	1.087 $\text{\AA}$
$C_c-H$	1.113 $\text{\AA}$	1.106 $\text{\AA}$
$\angle C_a C_b C_c$	120.3 $^\circ$	121.4 $^\circ$
$\angle C_b C_c O$	123.9 $^\circ$	124.3 $^\circ$
$\angle HC_c C_b$	114.7 $^\circ$	115.5 $^\circ$
その他の $\angle HCC$	120 $^\circ$	120 $^\circ$

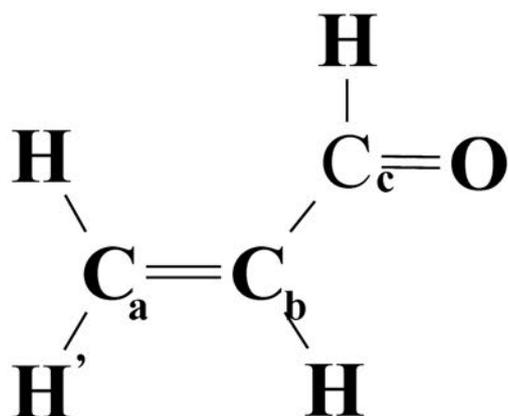


図1. アクリルアルデヒド (アクロレイン)  
(H'は  $C_b-H$  とシス)

#### 4-1. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の Z 行列

アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-トランス形の Z 行列を図 2 に, *s*-シス形の Z 行列を図 3 に示す.

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 acrylic aldehyde(s-trans) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 0 1 ↓
6 C ↓
7 C 1 r1 ↓
8 C 2 r2 1 a1 ↓
9 0 3 r3 2 a2 1 a5 ↓
10 H 1 r4 2 a3 3 a6 ↓
11 H 1 r5 2 a3 3 a5 ↓
12 H 2 r6 1 a3 3 a5 ↓
13 H 3 r7 2 a4 4 a5 ↓
14 Variables: ↓
15 r1= 1.341 ↓
16 r2= 1.468 ↓
17 r3= 1.215 ↓
18 r4= 1.089 ↓
19 r5= 1.081 ↓
20 r6= 1.084 ↓
21 r7= 1.113 ↓
22 a1= 120.3 ↓
23 a2= 123.9 ↓
24 a3= 120.0 ↓
25 a4= 114.7 ↓
26 a5= 180.0 ↓
27 a6= 0.0 ↓
28 ↓

```

図 2. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-トランス形の Z 行列

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004. ↓
2 ↓
3 acrylic aldehyde(s-cis) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.) ↓
4 ↓
5 0 1 ↓
6 C ↓
7 C 1 r1 ↓
8 C 2 r2 1 a1 ↓
9 0 3 r3 2 a2 1 a6 ↓
10 H 1 r4 2 a3 3 a6 ↓
11 H 1 r5 2 a3 3 a5 ↓
12 H 2 r6 1 a3 3 a5 ↓
13 H 3 r7 2 a4 4 a5 ↓
14 Variables: ↓
15 r1= 1.339 ↓
16 r2= 1.479 ↓
17 r3= 1.213 ↓
18 r4= 1.099 ↓
19 r5= 1.081 ↓
20 r6= 1.087 ↓
21 r7= 1.106 ↓
22 a1= 121.4 ↓
23 a2= 124.3 ↓
24 a3= 120.0 ↓
25 a4= 115.5 ↓
26 a5= 180.0 ↓
27 a6= 0.0 ↓
28 ↓

```

図 3. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-シス形の Z 行列

#### 4-2. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の xyz ファイル

Open Babel[38]を起動し、gzmat 書式 (Gaussian Z-Matrix Input, Z 行列) のファイルを読み込み, “OUTPUT FORMAT” を xyz 書式 (XYZ Cartesian coordinates format, 直交座標) にして[CONVERT]ボタンをクリックする (図 4)。

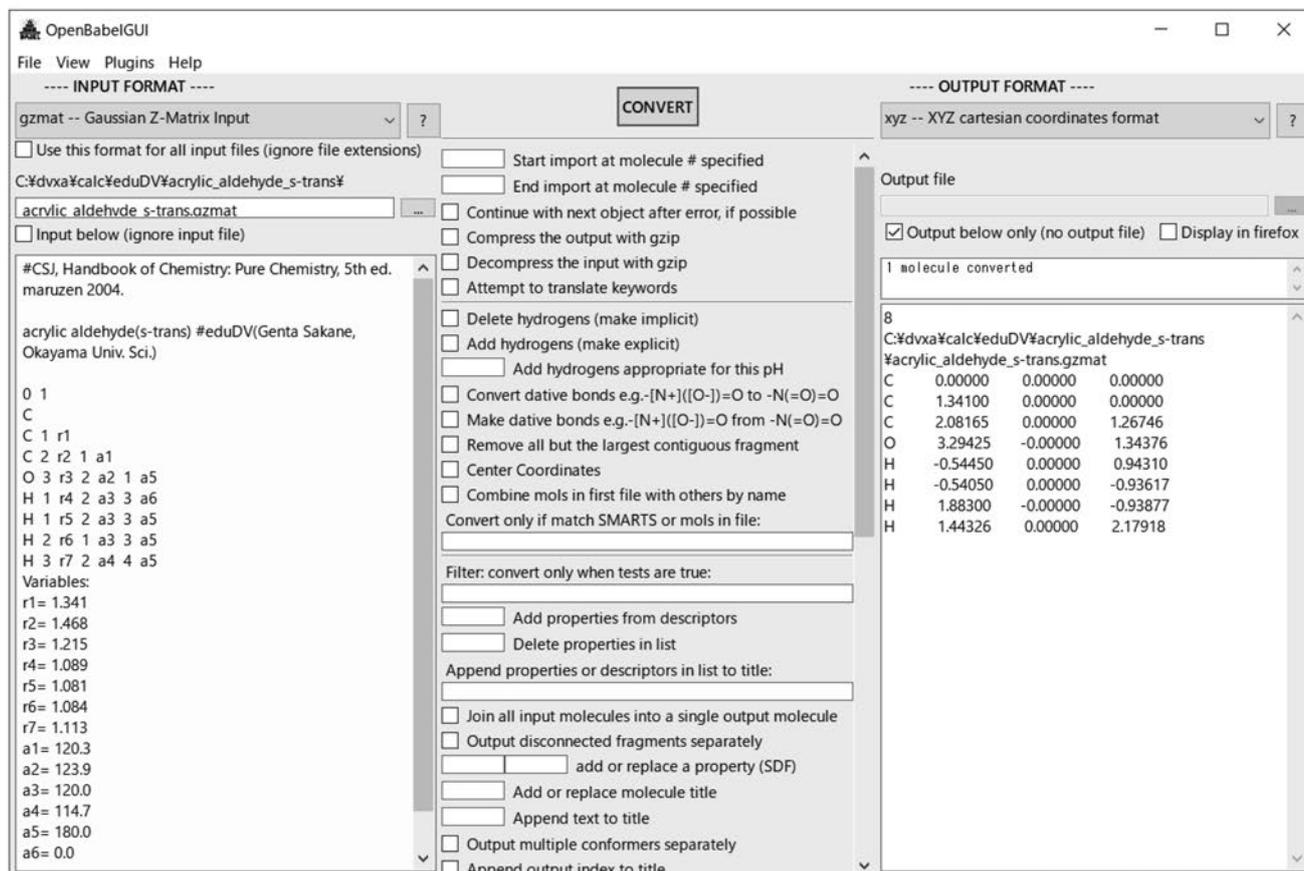


図 4. Open Babel

出力された xyz 書式のファイルを図 5 (*s*-トランス形), 図 6 (*s*-シス形) にそれぞれ示す。

1	8↓			
2	acrylic aldehyde (s-trans) #eduDV (Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓			
3	C	0.00000	0.00000	0.00000↓
4	C	1.34100	0.00000	0.00000↓
5	C	2.08165	0.00000	1.26746↓
6	O	3.29425	-0.00000	1.34376↓
7	H	-0.54450	0.00000	0.94310↓
8	H	-0.54050	0.00000	-0.93617↓
9	H	1.88300	-0.00000	-0.93877↓
10	H	1.44326	0.00000	2.17918↓

図 5. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-トランス形の xyz ファイル

1	8↓			
2	acrylic aldehyde(s-cis) #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓			
3	C	0.00000	0.00000	0.00000↓
4	C	1.33900	0.00000	0.00000↓
5	C	2.10957	0.00000	1.26240↓
6	O	1.61041	0.00000	2.36793↓
7	H	-0.54950	0.00000	0.95176↓
8	H	-0.54050	0.00000	-0.93617↓
9	H	1.88250	-0.00000	-0.94137↓
10	H	3.20971	-0.00000	1.14871↓

図6. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-シス形の xyz ファイル

#### 4-3. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の f01 ファイル

DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 16]を起動し, xyz 書式 (XYZ Cartesian coordinates format, 直交座標) のファイルを読み込み, [XYZ2F01]ボタンをクリックする (図7).

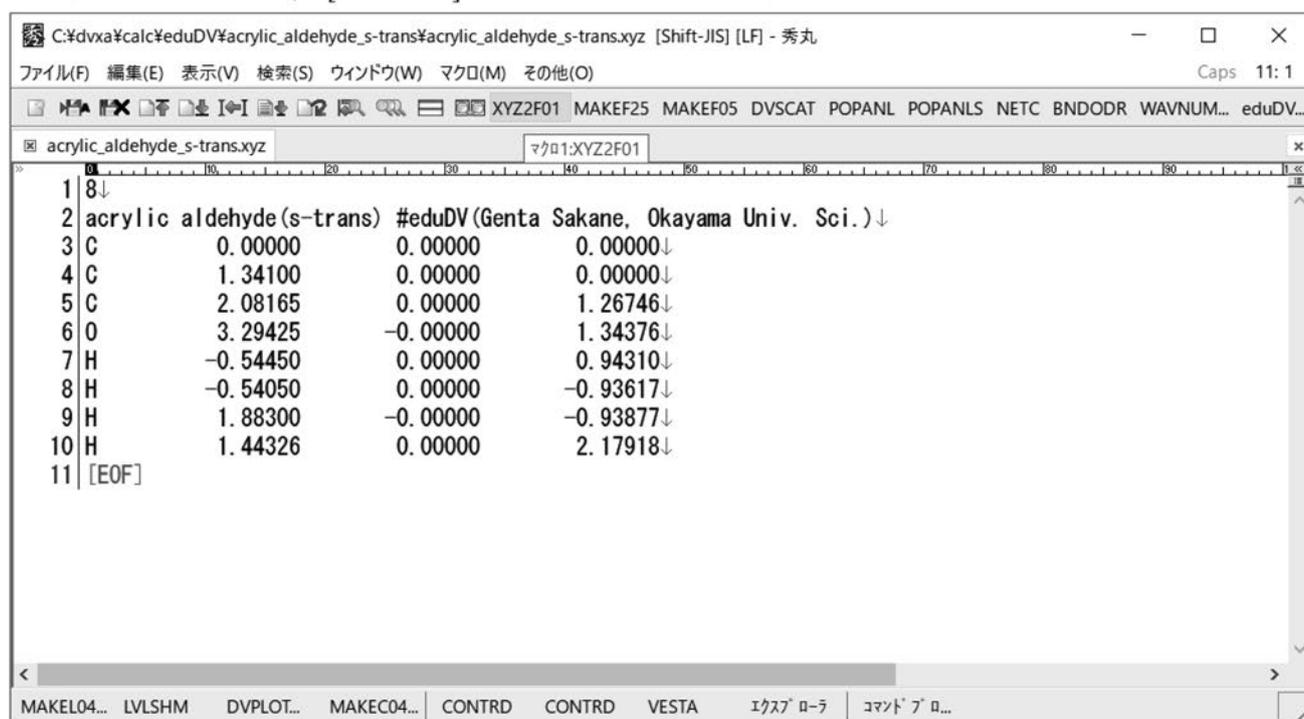


図7. DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境

出力された f01 書式 (DV- $X\alpha$ 法の一般入力データ) のファイルを図8 (*s*-トランス形), 図9 (*s*-シス形) にそれぞれ示す.

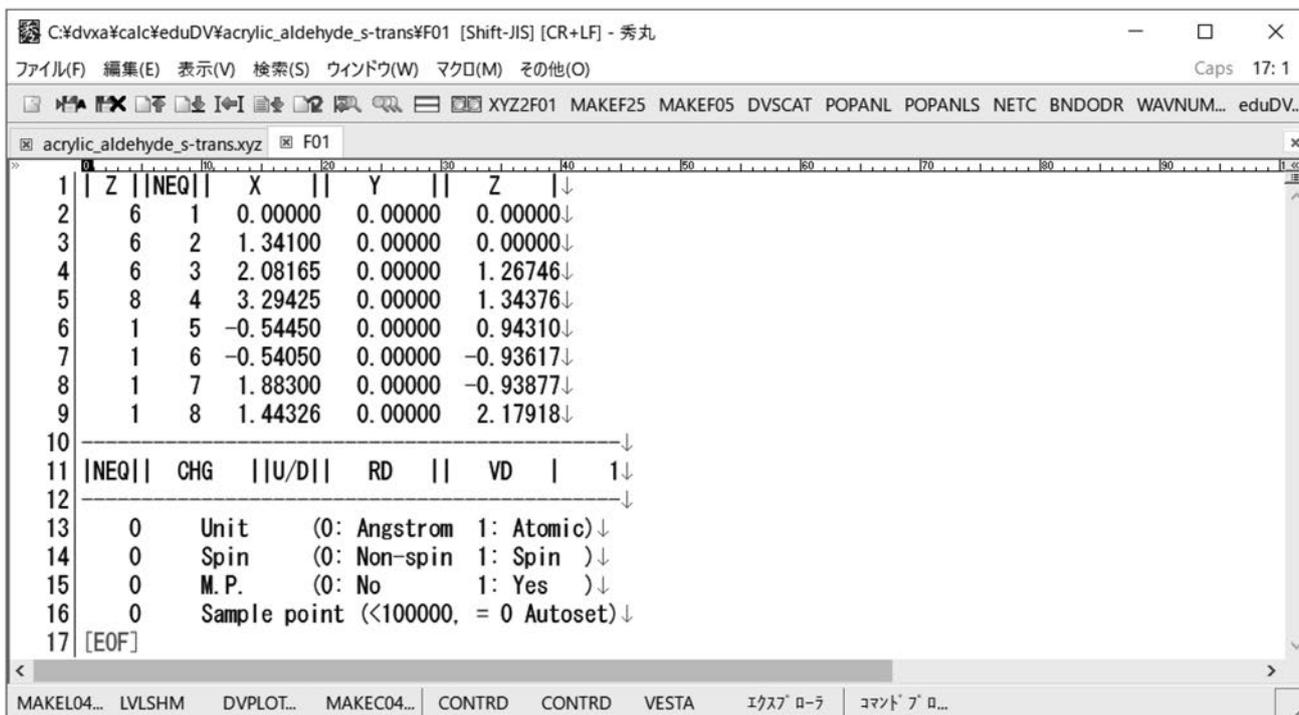


図 8. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の s-トランス形の f01 ファイル

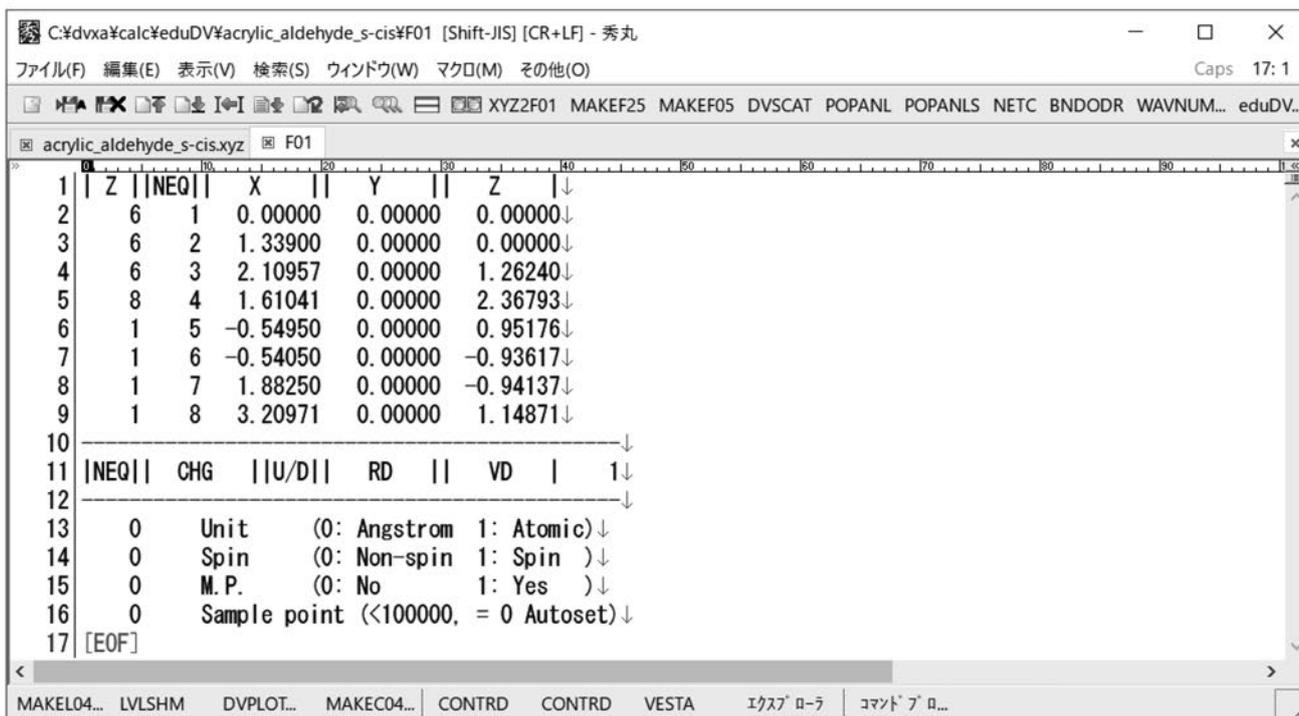


図 9. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の s-シス形の f01 ファイル

DV-X $\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 16]で [VESTA]ボタンをクリックすると, 分子の棒球モデルを確認できる. s-トランス形の棒球モデルを図 1 0 に, s-シス形の棒球モデルを図 1 1 に, それぞれ示す.

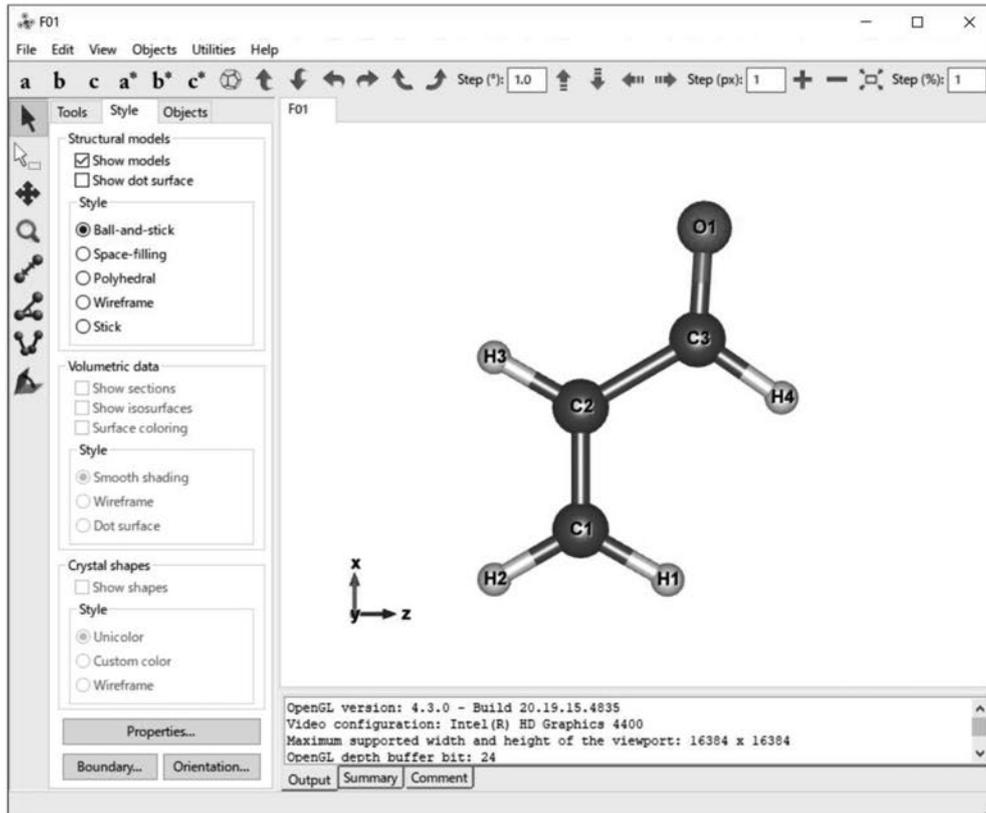


図 10. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-トランス形の棒球モデル

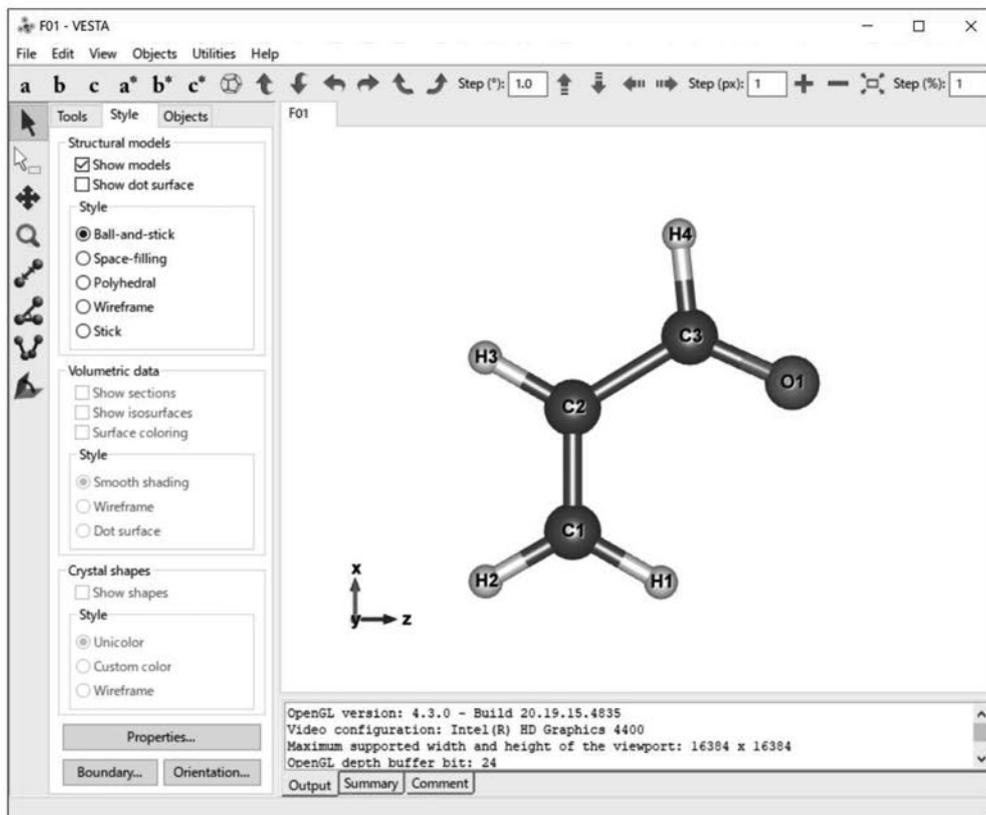


図 11. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の *s*-シス形の棒球モデル

#### 4-4. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の分子軌道計算

DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境 (秀丸エディタ) を起動し, F01 を開く. 16 行目のサンプル点数を 0 から 20000 に変更する (図 1 2).

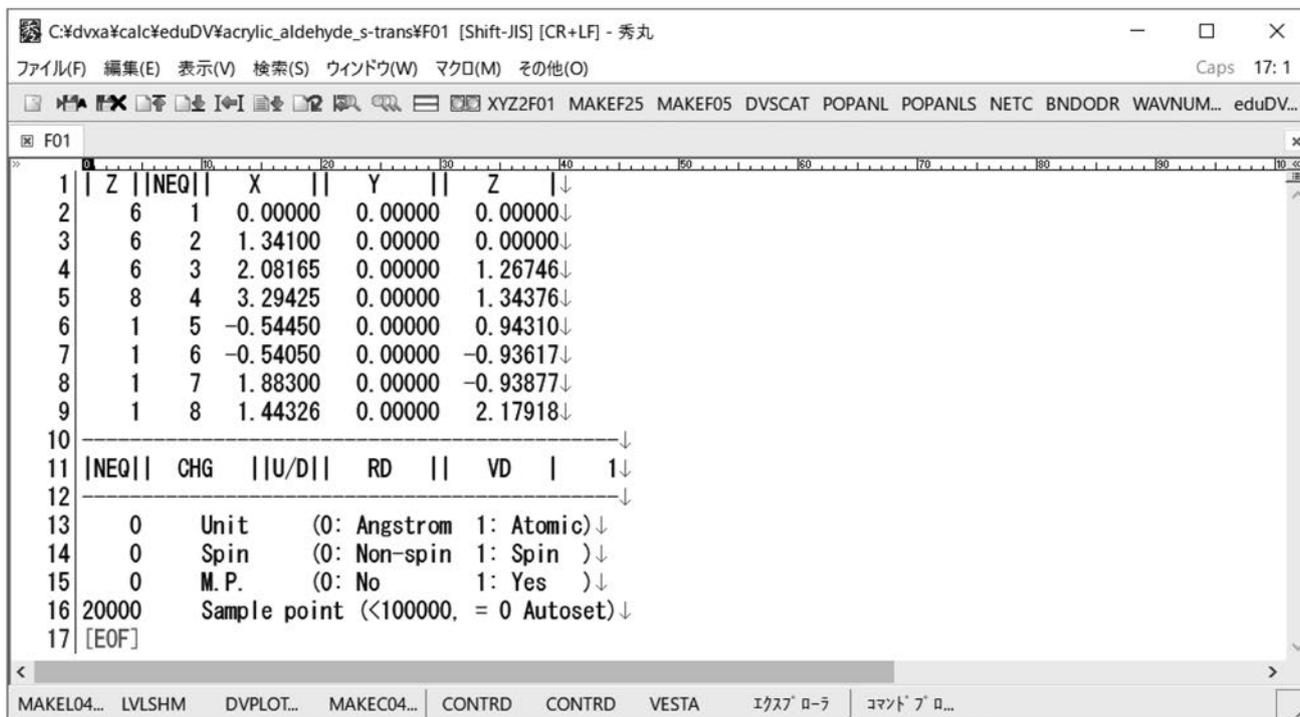


図 1 2. F01 のサンプル点数を 0 から 20000 に変更する

タイトルバーのマクロ(M)–その他– [MAKEF05SCFS][2]を選択し, f05 を作成する (図 1 3).

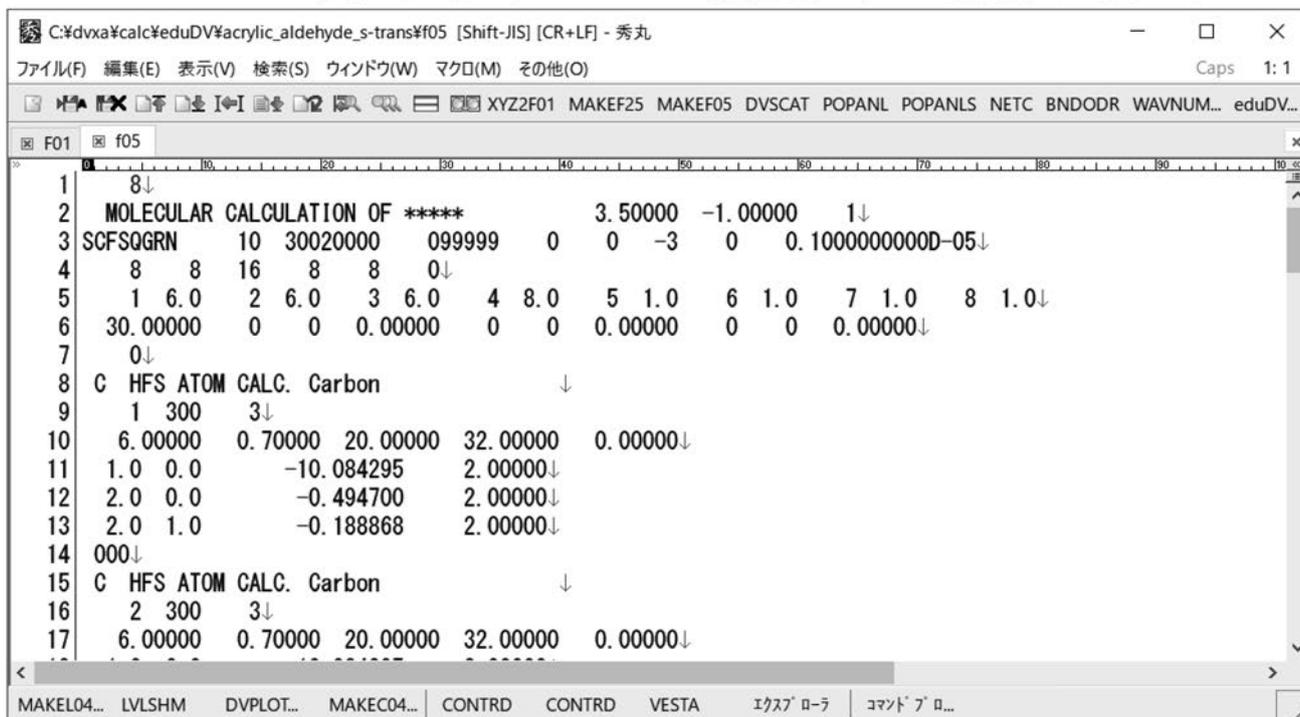


図 1 3. MAKEF05SCFS で f05 を作成する

ツールバー上の[DVSCAT]ボタンをクリックすれば DV- $X\alpha$ 法による分子軌道計算が始まる. 今回使用した開発環境では, 約 5 秒で計算は終了した (図 1 4).

```

C:\dvxa\calc\eduDV\acrylic_aldehyde_s-trans\#f26 [Shift-JIS] [CR+LF] - 秀丸
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 検索(S) ウィンドウ(W) マクロ(M) その他(O) Caps 1:1
XYZ2F01 MAKEF25 MAKEF05 DVSCAT POPANL POPANLS NETC BNDODR WAVNUM... eduDV...
F01 f05 f06z f08 f08e f26
1 8↓
2 MOLECULAR CALCULATION OF ***** 3.50000 -1.00000 1↓
3 SCFSQGRN 10 30020000 099999 0 0 -3 0 0.10000000000D-05↓
4 8 8 16 8 8 0↓
5 1 6.0 2 6.0 3 6.0 4 8.0 5 1.0 6 1.0 7 1.0 8 1.0↓
6 30.00000 0 0 0.00000 0 0 0.00000 0 0 0.00000↓
7 0↓
8 C HFS ATOM CALC. Carbon ↓
9 1 300 3↓
10 6.00000 0.70000 20.00000 32.00000 0.00000 0.00000↓
11 1.0 0.0 -10.08429 2.00046↓
12 2.0 0.0 -0.49470 1.09541↓
13 2.0 1.0 -0.18887 2.90614↓
14 000↓
15 C HFS ATOM CALC. Carbon ↓
16 2 300 3↓
17 6.00000 0.70000 20.00000 32.00000 0.00000 0.00000↓
MAKEL04... LVLSHM DVPL0T... MAKEC04... CONTRD CONTRD VESTA エクス ローラ コマンドプロ...

```

図 1 4. DV- $X\alpha$ 法による分子軌道計算が終わった状態

タブ[f08e]をクリックすると, 分子軌道のエネルギー準位表 (エネルギーの単位はリュードベリ(rydberg, Ry), ハートリー(hartree,  $E_h$ ), 電子ボルト(eV)) が表示される.  $s$ -軌道形および  $s$ -シス形の準位表 (単位は電子ボルト(eV)) を表 2 に示す. 対称軌道(f25)を使っていないので, 分子軌道名は通し番号になる.

表 2. 分子軌道のエネルギー準位表

分子軌道名	電子数	$s$ -軌道形(eV)	$s$ -シス形(eV)
1	2	-497.06128	-497.21913
2	2	-262.25882	-262.19202
3	2	-260.48126	-260.45808
4	2	-260.45761	-260.39671
5	2	-20.83324	-20.92069
6	2	-16.27943	-16.03600
7	2	-12.27508	-12.66458
8	2	-10.93425	-9.94723
9	2	-8.34519	-9.35238
10	2	-7.72268	-6.96137
11	2	-6.30386	-6.53014
12	2	-5.47148	-5.47456
13	2	-5.34806	-5.30373
14	2	-2.83957	-2.78485
15(HOMO)	2	-0.83342	-0.89773
16(LUMO)	0	2.49765	2.45813
17	0	5.94994	6.00211
18	0	11.35044	10.88890
19	0	11.93983	12.10324
20	0	12.21596	12.72367
21	0	14.37654	13.89966
22	0	17.56687	18.02496
23	0	18.82074	18.40122
24	0	21.76240	21.78212

タイトルバーのマクロ(M)-その他-[HLGAP][14, 16]を選択し, F08E.hlgapを作成する. HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital, 最高被占軌道)とLUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital, 最低空軌道)のエネルギー差は, *s*-トランス形では 3.331 eV(= 26860 cm<sup>-1</sup> = 372.2 nm), *s*-シス形では 3.356 eV(= 27070 cm<sup>-1</sup> = 369.5 nm)であった.

ステータスバー上の[CONTRDALL]ボタンをクリックし, タブ[F01]がアクティブな状態でステータスバー上の[VESTA]ボタンをクリックすると, VESTA[33, 34]が起動する.*s*-トランス形のHOMO(図15), LUMO(図16), *s*-シス形のHOMO(図17), LUMO(図18)を示す.

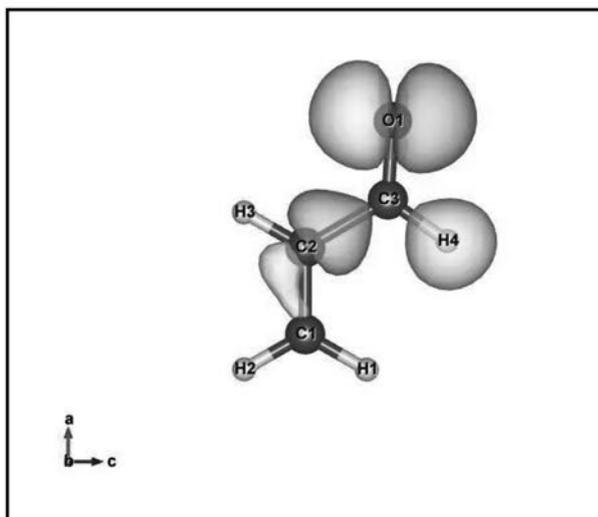


図15. *s*-トランス形の HOMO

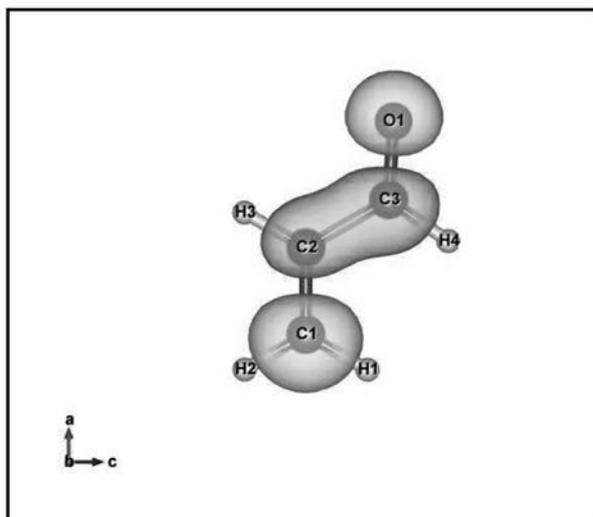


図16. *s*-トランス形の LUMO

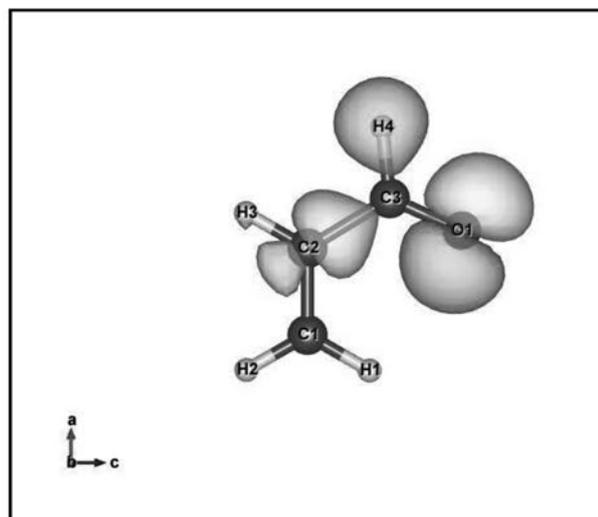


図17. *s*-シス形の HOMO

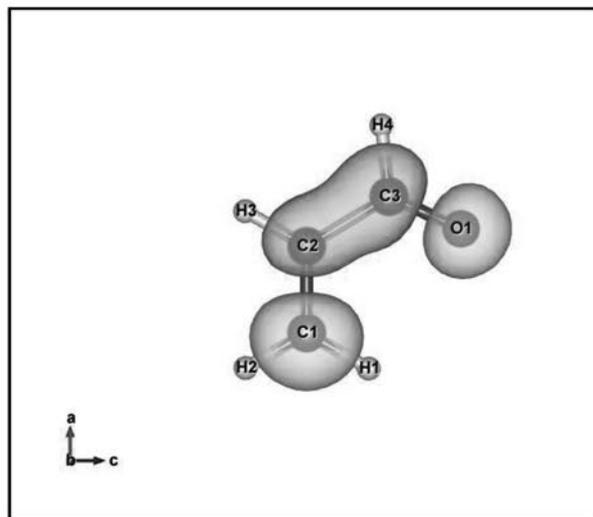


図18. *s*-シス形の LUMO

*s*-トランス形の HOMO と *s*-シス形の HOMO を比較すると, 分子軌道における原子軌道の占有率はほとんど同じだが, 2種類の立体配座異性体の「分子の形」の違いに応じて, 分子軌道の形状も異なっていることが分かる. *s*-トランス形の LUMO と *s*-シス形の LUMO を比較しても, やはり分子軌道における原子軌道の占有率はほとんど同じだが, 2種類の立体配座異性体の「分子の形」の違いに応じて, 分子軌道の形状も異なっていることが分かる.

*s*-トランス形の静電ポテンシャルマップを図19に、*s*-シス形の静電ポテンシャルマップを図20にそれぞれ示す。赤い部分は電子が僅かに多い箇所( $\delta^-$ )、青い部分は電子が僅かに少ない箇所( $\delta^+$ )である。

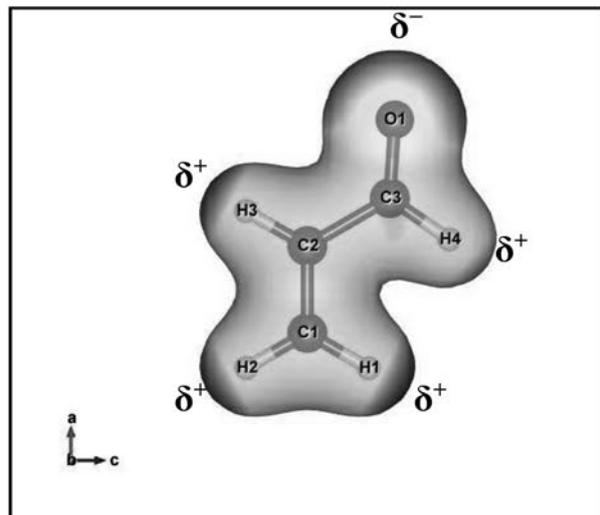


図19. *s*-トランス形の静電ポテンシャルマップ

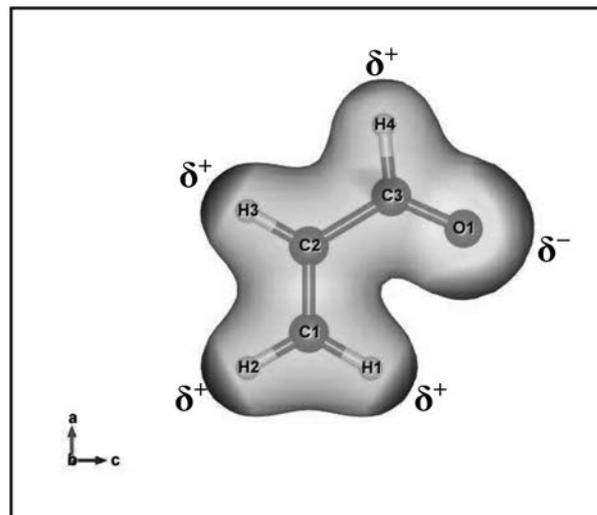


図20. *s*-シス形の静電ポテンシャルマップ

## 5. アクリロニトリル

化学便覧[36]の表16.3「有機化合物の構造定数」によると、アクリロニトリル、図21、CAS[107-13-1]の構造定数は、表3に示す通りである。

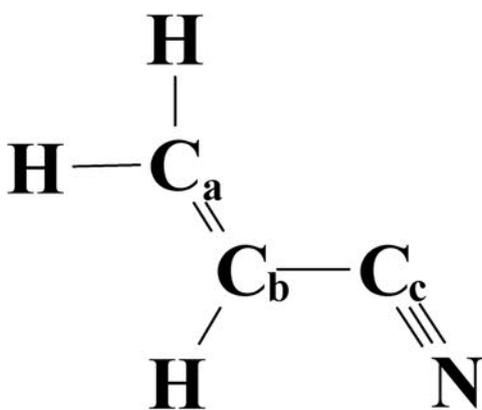


図21. アクリロニトリル  
(NはC<sub>a</sub>に対してアンチ)

表3. アクリロニトリルの構造定数

$C_a=C_b$	1.343 Å
$C_b-C_c$	1.438 Å
$C_c\equiv N$	1.167 Å
$C_a-H$	1.114 Å
$\angle C_aC_bC_c$	121.7°
$\angle C_bC_cN$	178.2°
その他の $\angle HCC$	120°

### 5-1. アクリルアルデヒド (アクロレイン) のZ行列

アクリロニトリルのZ行列を図22に示す。

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 acrylonitrile #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 C↓
7 C 1 r1↓
8 N 2 r2 1 a1↓
9 C 1 r3 2 a2 3 a5↓
10 H 1 r4 4 a3 3 a5↓
11 H 4 r4 1 a3 2 a4↓
12 H 4 r4 1 a3 2 a5↓
13 Variables:↓
14 r1= 1.438↓
15 r2= 1.167↓
16 r3= 1.343↓
17 r4= 1.114↓
18 a1= 178.2↓
19 a2= 121.7↓
20 a3= 120.0↓
21 a4= 0.0↓
22 a5= 180.0↓
23 ↓

```

図 2 2. アクリロニトリルの Z 行列

## 5-2. アクリロニトリルの xyz ファイル

Open Babel[38]を起動し, gzmat 書式 (Gaussian Z-Matrix Input, Z 行列) のファイルを読み込み, “OUTPUT FORMAT” を xyz 書式 (XYZ Cartesian coordinates format, 直交座標) にして[CONVERT]ボタンをクリックする. 出力された xyz 書式のファイルを図 2 3 に示す.

```

1 7↓
2 acrylonitrile #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
3 C          0.00000      0.00000      0.00000↓
4 C          1.43800      0.00000      0.00000↓
5 N          2.60442      0.00000      0.03666↓
6 C         -0.70571      0.00000     -1.14264↓
7 H         -0.52813      0.00000      0.98085↓
8 H         -0.17757      0.00000     -2.12349↓
9 H         -1.81922     -0.00000     -1.10959↓

```

図 2 3. アクリロニトリルの xyz ファイル

## 5-3. アクリルアルデヒド (アクロレイン) の f01 ファイル

DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 16]を起動し, xyz 書式 (XYZ Cartesian coordinates format, 直交座標) のファイルを読み込み, [XYZ2F01]ボタンをクリックする. 出力された f01 書式 (DV- $X\alpha$ 法の一般入力データ) のファイルを図 2 4 に示す.

1	Z	NEQ	X	Y	Z	
2	6	1	0.00000	0.00000	0.00000	↓
3	6	2	1.43800	0.00000	0.00000	↓
4	7	3	2.60442	0.00000	0.03666	↓
5	6	4	-0.70571	0.00000	-1.14264	↓
6	1	5	-0.52813	0.00000	0.98085	↓
7	1	6	-0.17757	0.00000	-2.12349	↓
8	1	7	-1.81922	0.00000	-1.10959	↓
9	↓					
10	NEQ	CHG	U/D	RD	VD	1
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	0	Sample point	(<100000, = 0 Autoset)	↓		

図 2 4. アクリロニトリルの f01 ファイル

DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境[4, 16]で [VESTA]ボタンをクリックすると, 分子の棒球モデルを確認できる. 棒球モデルを図 2 5 に示す.

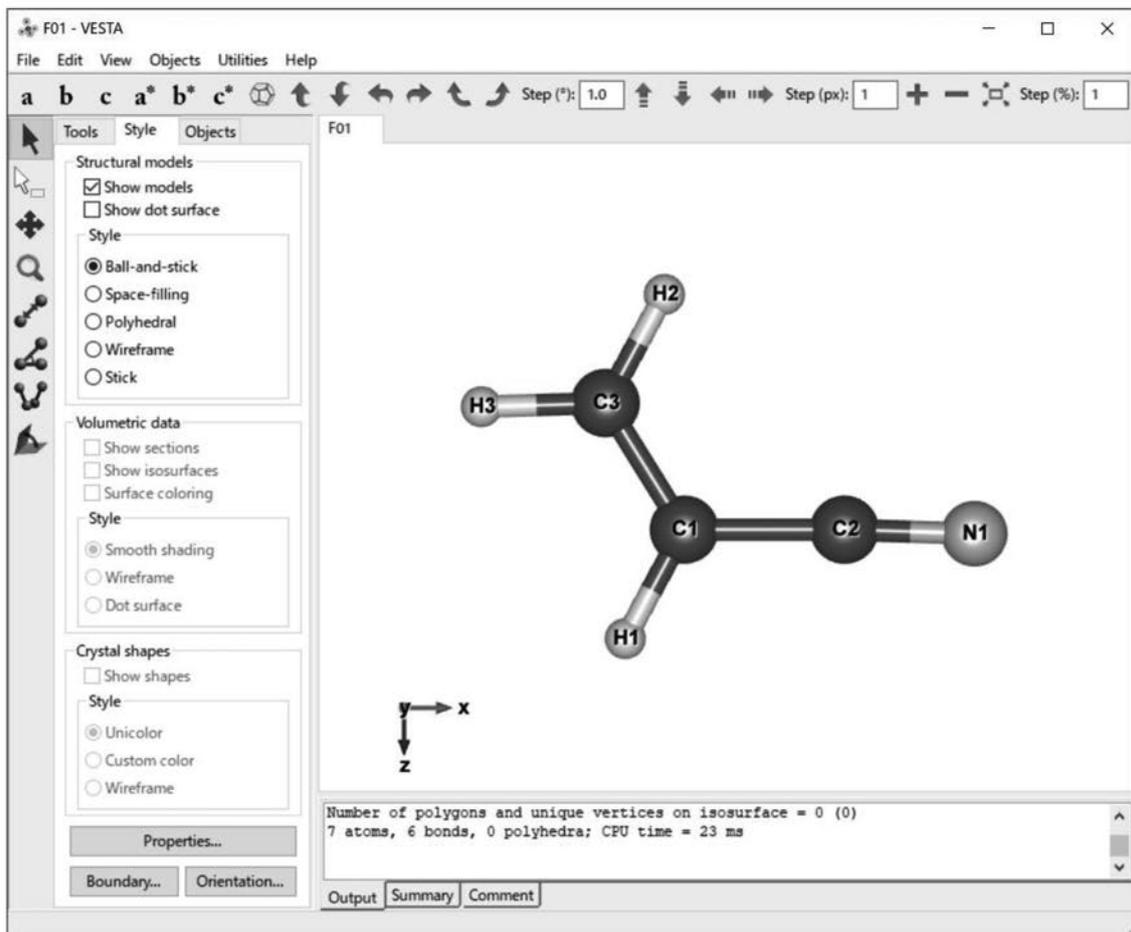


図 2 5. アクリロニトリルの棒球モデル

### 5-4. アクリロニトリルの分子軌道計算

DV- $X\alpha$ 法のための統合支援環境（秀丸エディタ）を起動し、F01を開く。15行目のサンプル点数を0から17500に変更する（図26）。

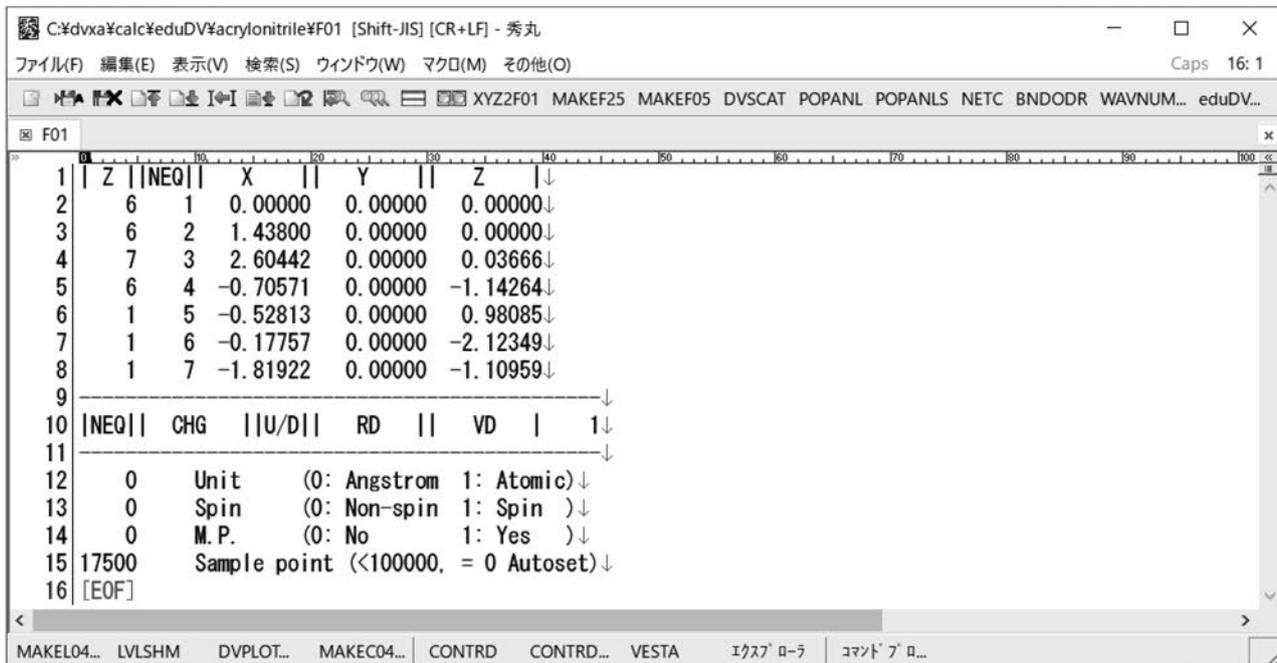


図26. F01のサンプル点数を0から17500に変更する

タイトルバーのマクロ(M)－その他－[MAKEF05SCFS][2]を選択し、f05を作成する（図13）。

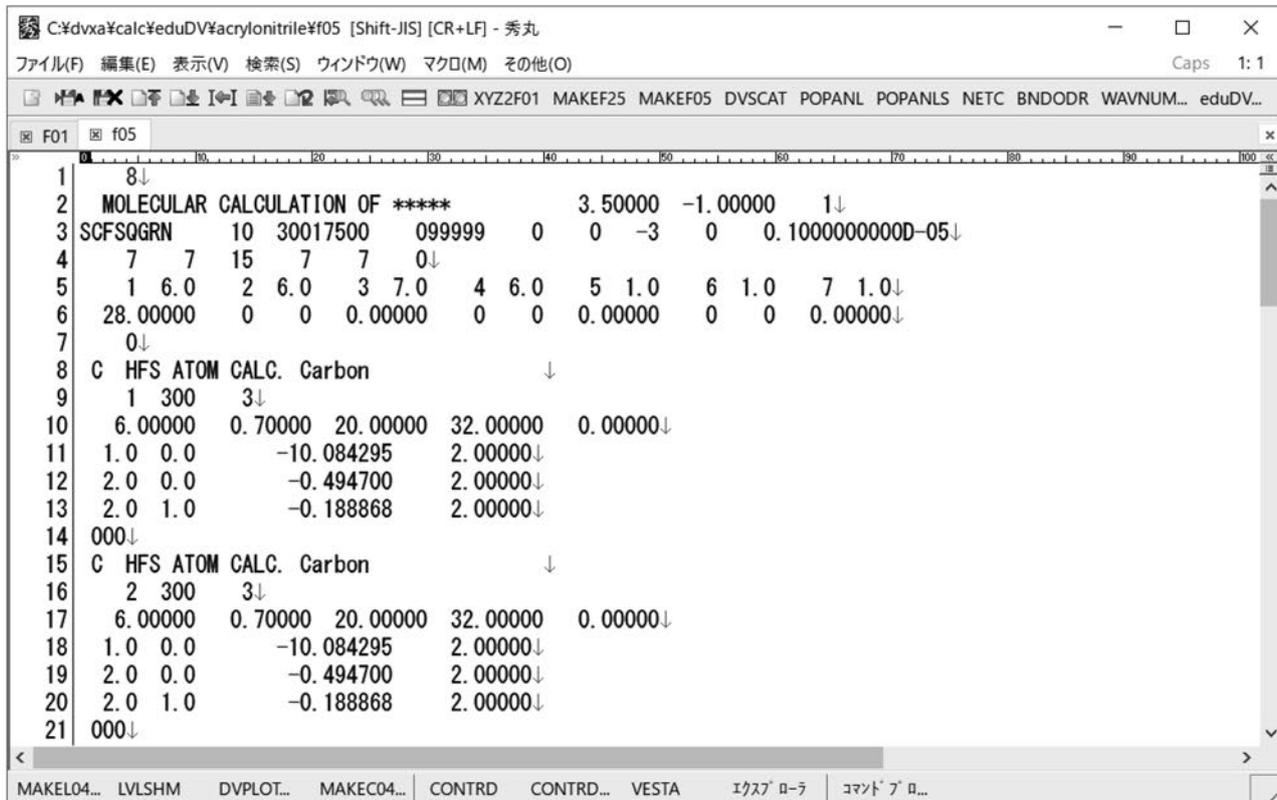


図27. MAKEF05SCFSでf05を作成する

ツールバー上の[DVSCAT]ボタンをクリックすれば DV- $X\alpha$ 法による分子軌道計算が始まる. 今回使用した開発環境では, 約 5 秒で計算は終了した (図 2 8).

```

1 8↓
2 MOLECULAR CALCULATION OF ***** 3.50000 -1.00000 1↓
3 SCFSQGRN 10 30017500 099999 0 0 -3 0 0.1000000000D-05↓
4 7 7 15 7 7 0↓
5 1 6.0 2 6.0 3 7.0 4 6.0 5 1.0 6 1.0 7 1.0↓
6 28.00000 0 0 0.00000 0 0 0.00000 0 0 0.00000↓
7 0↓
8 C HFS ATOM CALC. Carbon ↓
9 1 300 3↓
10 6.00000 0.70000 20.00000 32.00000 0.00000 0.00000↓
11 1.0 0.0 -10.08429 1.99974↓
12 2.0 0.0 -0.49470 1.07533↓
13 2.0 1.0 -0.18887 2.88891↓
14 000↓
15 C HFS ATOM CALC. Carbon ↓
16 2 300 3↓
17 6.00000 0.70000 20.00000 32.00000 0.00000 0.00000↓
18 1.0 0.0 -10.08429 2.00006↓
19 2.0 0.0 -0.49470 1.08788↓
20 2.0 1.0 -0.18887 2.86461↓
21 000↓

```

図 2 8. DV- $X\alpha$ 法による分子軌道計算が終わった状態

タブ[f08e]をクリックすると, 分子軌道のエネルギー準位表 (エネルギーの単位はリュードベリ(rydberg, Ry), ハートリー(hartree,  $E_h$ ), 電子ボルト(eV)) が表示される. アクリロニトリルの分子軌道の準位表 (単位は電子ボルト(eV)) を表 4 に示す. 対称軌道を使っていないので, 分子軌道名は通し番号になる.

表 4. 分子軌道のエネルギー準位表

分子軌道名	電子数	エネルギー準位(eV)
1	2	-368.73613
2	2	-261.01180
3	2	-260.66460
4	2	-260.50918
5	2	-17.68953
6	2	-16.10071
7	2	-11.95902
8	2	-9.57503
9	2	-7.74004
10	2	-6.43855
11	2	-5.03972
12	2	-3.86203
13	2	-3.63025
14(HOMO)	2	-2.59017
15(LUMO)	0	3.08385
16	0	5.64113
17	0	7.55907
18	0	10.88453
19	0	11.48605

20	0	11.77662
21	0	16.85586
22	0	19.54353
23	0	29.44363

タイトルバーのマクロ(M)-その他-[HLGAP][14, 16]を選択し, F08E.hlgap を作成する. HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital, 最高被占軌道) と LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, 最低空軌道) のエネルギー差は, 5.674 eV(= 45764 cm<sup>-1</sup> = 218.5 nm)であった.

ステータスバー上の[CONTRDALL]ボタンをクリックし, タブ[F01]がアクティブな状態でステータスバー上の[VESTA]ボタンをクリックすると, VESTA[33, 34]が起動する. HOMO (図 2 9), LUMO (図 3 0) を示す.

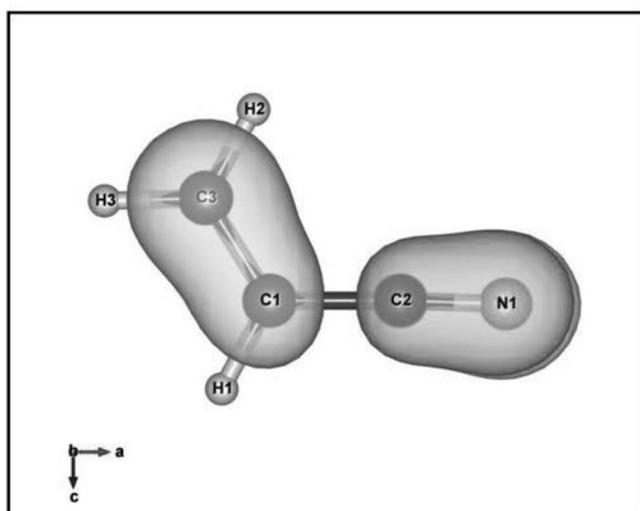


図 2 9. アクリロニトリルの HOMO

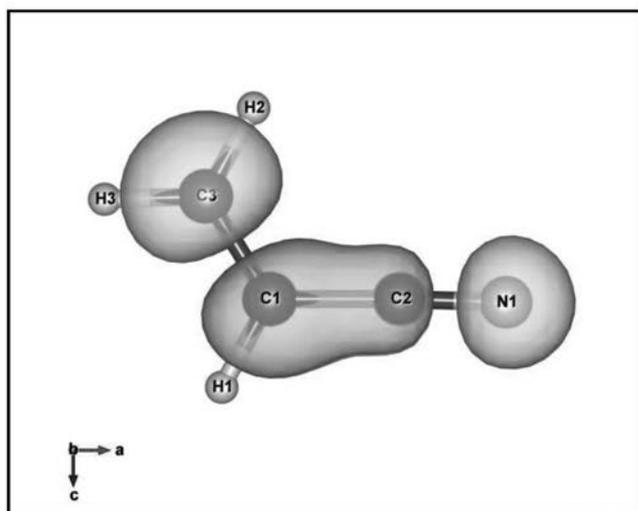


図 3 0. アクリロニトリルの LUMO

静電ポテンシャルマップを図 3 1 に示す. 赤い部分は電子が僅かに多い箇所( $\delta^-$ ), 青い部分は電子が僅かに少ない箇所( $\delta^+$ )である.

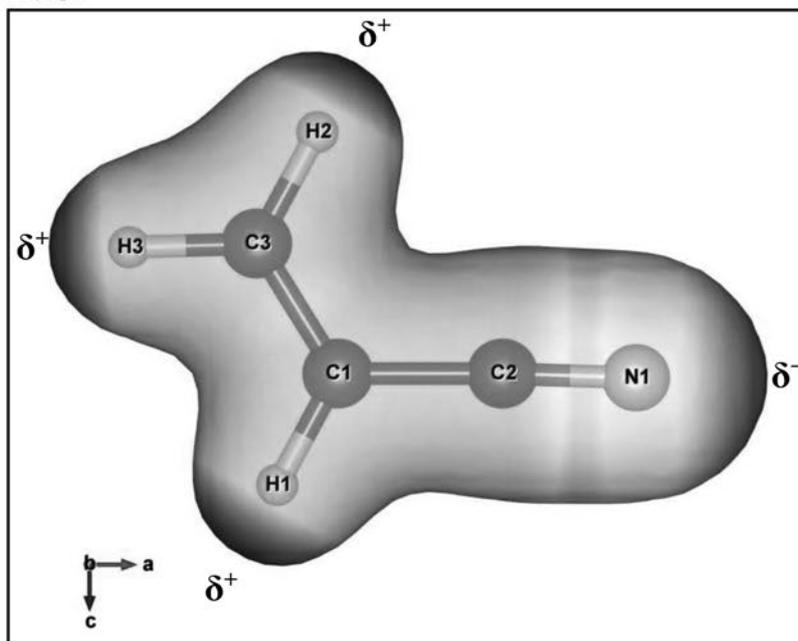


図 3 1. アクリロニトリルの静電ポテンシャルマップ

## 6. おわりに

これまで eduDV[1-16]で計算できる分子は、表5に示す点群に属するもののみであった。これは eduDV が元々、対称性軌道と原子座標を準備するシステム[2]から発展したものであることに由来する。

表5. eduDV で計算できる分子の属する点群

No.	点群	説明	例
1	$D_{\infty h}$	等核二原子分子 ( $A_2$ 型分子)	$H_2, O_2, N_2$ など
2	$C_{\infty v}$	異核二原子分子 ( $AB$ 型分子)	一酸化炭素や塩化水素など
3	$D_{\infty h}$	直線 $AB_2$ 型分子 ( $B-A-B$ 型分子)	二酸化炭素など
4	$D_{\infty h}$	直線 $A_2B_2$ 型分子 ( $B-A-A-B$ 型分子)	アセチレンなど
5	$C_{\infty v}$	直線 $ABC$ 型分子 ( $A-B-C$ 型分子)	シアン化水素など
6	$C_{\infty v}$	直線 $ABCD$ 型分子 ( $A-B-C-D$ 型分子)	HCNO など
7	$C_{2v}$	折れ線 $AB_2$ 型分子 ( $AB_2$ 型分子)	水や硫化水素など
8	$C_{3v}$	三角錐 $AB_3$ 型分子 ( $AB_3$ 型分子)	アンモニアなど
9	$D_{2h}$	エチレン型 (平面) 分子 ( $A_2B_4$ 型分子)	エチレンなど
10	$D_{3d}$	エタン型 (ねじれ形) 分子 ( $A_2B_6$ 型分子)	エタンなど
11	$D_{3h}$	平面正三角形型分子 ( $AB_3$ 型分子)	三フッ化ホウ素など
12	$D_{4h}$	平面正四角形型イオン ( $AB_4$ 型錯イオン)	$[PtCl_4]^{2-}$ など
13	$D_{6h}$	平面正六角形型分子 ( $A_6B_6$ 型分子)	ベンゼンなど
14	$T_d$	正四面体型分子 ( $AB_4$ 型分子)	メタンや四塩化炭素など
15	$O_h$	正八面体型分子 ( $AB_6$ 型分子)	六フッ化硫黄など
16	$T_d$	正四面体型分子 ( $[A(BC)_4]$ 型錯体)	$[Ni(CO)_4]$ など
17	$O_h$	正八面体型分子 ( $[A(BC)_6]$ 型錯体)	$[Cr(CO)_6]$ など
18	$D_{2h}$	正八面体型イオン ( $[M(H_2O)_6]^{n+}$ アクア錯イオン)	$[Co(H_2O)_6]^{2+}$ など
19	$T_d$	正四面体型イオン ( $[M(L)_4]^{n+}$ or $[M(L)_4]^{n-}$ 錯イオン)	$[CoCl_4]^{2-}$ など
20	$O_h$	正八面体型イオン ( $[M(L)_6]^{n+}$ or $[M(L)_6]^{n-}$ 錯イオン)	$[CrCl_6]^{3-}$ など

しかし、化学の教科書に登場する身近な分子で、表5のいずれの点群にも属していない分子は多い[41]。また、分子の対称性と群論については、大学の化学系学科の初年次専門教育で学習する内容であり、高校生や化学を専門としない大学生にとっては、分子の属する点群を選択していく現在の eduDV[1-16]のメニューは分かりやすいものではない。eduDV のユーザーに対して、分子の対称性と群論についての知識習得を前提とせず、化学の教科書に登場する身近な分子・錯体を自由に選択して電子状態を計算できるようにすべきである。分子・錯体さえ選択すれば、あとは全自動で、原子座標 (および、分子に対称性がある場合は対称性軌道) が準備され、第一原理計算である DV- $X\alpha$ 法[16-30]により電子状態計算が行われる。eduDV のユーザーは分子軌道のエネルギー準位表 (f08e) を見て、分子軌道のエネルギー準位図を描き (MAKEL04-LVLSHM), HOMO や LUMO などの分子軌道や静電ポテンシャルマップを三次元可視化し (MAKEC04D-CONTRD-VESTA), マリケンの電荷密度解析による各原子の純電荷 (NETC) を見て、有効共有結合電荷 (BNDODR) で原子間結合の強さを見積もることができる。

そこで将来、eduDV[1-16]のトップメニューは、表6に示す項目とすることを検討している。

**表6. eduDVのトップメニューの将来構想**

No.	項目
1	化合物名（化学式）で分子を選択（二原子分子）
2	化合物名（化学式）で分子を選択（単体および無機分子）
3	化合物名（化学式）で分子を選択（有機化合物）
4	化合物名（化学式）で分子を選択（無機化合物）
5	化合物名（化学式）で分子を選択（有機金属化合物）
6	点群で分子を選択（構造定数自動入力）
7	点群で分子を選択（構造定数手入力）
8	孤立原子（情報自動入力）
9	孤立原子（情報手入力）
10	孤立イオン（情報自動入力）
11	孤立イオン（情報手入力）

すでに分子の対称性と群論について教えたあとの授業でeduDV[1-16]を使用する場合は、従来型の点群で分子を選択するメニューは、あった方がよい。分子の属する点群の復習にもなり、教員も指導しやすい。また、ある分子・錯体の原子間距離や角度を段階的に変化させて電子状態の変化を見る場合、構造定数（原子間距離・角度など）を手入力するメニューも必要である。点群を選択したあとに構造定数を手入力する機能は、DV- $X\alpha$ 法[16-30]を研究用途に用いる研究者にも有用である。

一方、高等学校や大学の教養科目などでeduDV[1-16]を使用する場合は、分子の属する点群について意識することなく、ただ化合物名（化学式）で分子を選択するだけに留めたい。選択した分子に対称性がある場合は、DV- $X\alpha$ 法[16-30]の計算で対称性軌道が使用され、計算結果の分子軌道に点群の指標表に基づく名前がつけられ、分子軌道が二重縮退、三重縮退する場合は縮退が取り扱われるが、授業ではそれをブラックボックス化してしまって問題はない。選択した分子に対称性がない場合は、ただ通し番号が分子軌道の名前としてつけられる。

今回、対称性のない分子をeduDV[1-16]に登録する方法を開拓した。化学便覧[36]に掲載されている「分子構造と結晶構造」の表16.1（二原子分子の平衡原子間距離）、表16.2（単体および無機分子の構造定数）、表16.3（有機化合物の構造定数）、表16.4（無機化合物、錯イオンの構造の特徴）、表16.5（希土類化合物および無機材料化合物の分子構造の特徴）、表16.6（有機金属化合物の構造）、表16.7（有機化合物の構造）には、化学の教科書に登場する身近な分子のほとんどについて、それらの構造に関する情報が掲載されている。Access Structure[39]などのデータベースで入手できる分子のX線構造データは、その分子のみからなる結晶の構造データとは限らず、他の化学種を含んだ結晶の構造データであることが多い。そうすると、複数のX線構造データからどの原子座標をeduDV[1-16]に登録すべきか、判断が困難となる。その点、化学便覧[36]の構造データは、その分子の構造として最も適当なものが選ばれており、教育目的で用いるには極めて適当である。今後は対称性のない分子をeduDV[1-16]に登録していき、授業で教員が指導しやすく、生徒・学生が使いやすく、かつ身近な分子のほとんどが計算できる環境の構築を目指す。

## 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”, 7<sup>th</sup> 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, “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>
- [14] 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>
- [15] 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](http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html)
- [16] 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.
- [17] 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).
- [18] 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.

- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] 足立裕彦, 田中功, “量子材料学の初歩”, 三共出版 1998 年.
- [22] 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.
- [23] 足立裕彦, “量子材料化学の基礎”, 三共出版 2017 年.
- [24] 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).
- [25] 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).
- [26] 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).
- [27] 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).
- [28] 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).
- [29] 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).
- [30] “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](http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/dvxa_assistance_environment_2.html)
- [31] 有限会社サイト一企画, “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>
- [32] 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](http://fujioizumi.verse.jp/visualization/VENUS.html#assistance_environment)
- [33] 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>
- [34] 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](http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html)
- [35] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>
- [36] 日本化学会編, “改定 5 版 化学便覧 基礎編 II”, 丸善 2004 年.
- [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](http://openbabel.org/wiki/Main_Page)
- [39] Access Structure, <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>
- [40] CIF, <https://www.iucr.org/resources/cif>
- [41] 本間善夫, 川端潤, “パソコンで見る動く分子事典”, 講談社 2007 年.

# 各種試料および測定データの簡易統合管理システム

Building a simple and low-cost integrated management system of  
sample storage and measurement data

畠山唯達\* (岡山理科大学 情報処理センター)

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

In this study, we discuss and introduce a concise system for the sample and data managements in a small laboratory. Such an integrated management system is often developed in large laboratories and institutes, but here we seek a solution for small budget and short-handed institutes.

## 1 はじめに

自然科学の研究現場でたびたび起こるデータ捏造等の不正等に対処するため、研究で取り扱うさまざまな試料と測定結果、ログノートなどを長期にわたって保管することを求められるようになってきた<sup>[1]</sup>。しかし、実際に多くのモノを取り扱う研究現場においては、保管スペースをはじめとして様々な問題があるため、成果を公開した後も含めた試料やデータを永続的に管理することは非常に困難である。大規模な研究施設や研究室では、専用のストレージスペースを用意した試料の一元管理とデータベース化、ならびに測定データ等のデータベース化に多額の予算をつけて実行しているところもあろう。しかし、多くの大学の研究室では科研費間接経費の配分減少など<sup>[2]</sup>にともないこのような非直接的研究への経費の投入が困難であるうえ、人的資源に余裕がないことが多い。

本研究では少数の人員、少額の予算で運営されている研究室が代々抱える試料やデータの保管について、所在と一覧を電子化する助けとなるような簡便なデータベースの構築を目指すためのプラットフォーム開発についての考察をする。

もちろん、大規模な研究機関では当然このような試料・資料管理システムは構築されており、立派なデータベースで出来上がっている（たとえば<sup>[3]</sup>では公的資金を用いて採取・調査した試料に関して採取地や日時を含めてインターネット上で公開され、外部研究者によるサンプルリクエストを受けつけている）。ここでは、予算をかけデータベース構築の専門家に依頼すればできるであろうことを、いかに金をかけず、少ない予備知識と技術で構築できるか、そのスキームと実装について提示したい。

---

\*Corresponding author: 岡山市北区理大町, [hatake@center.ous.ac.jp](mailto:hatake@center.ous.ac.jp)

## 2 試料・データ管理の統合例

試料の入手方法、取扱い、各種測定に供する形への成形や前準備、測定、およびデータの集計と整理については、研究分野や実験室ごとに大きくことなると考えらえる。

試料（サンプル）とそれに関して何等かの実験・測定をして得られたデータについては、1対1とは言えないものの対応関係がある。そのため、試料とデータの統合的な管理は可能であり、必然でもある。しかしながら、実際の研究現場ではこれらが対になって管理されていないことはままある。それは、モノと情報と言う実態の有無に起因して「保管」に関する考え方が根本的に異なるからである。

試料については、採取されるタイプのもものと合成されるタイプのももの、1次的なものと派生的なもの、永続的に保管可能なものと測定で使い切っている・時間とともに変質してしまう等の理由で保管が不可能なもの等、さまざまな状態がある。データについても、何をもって「データ」と呼ぶかは分野や測定の種類によって異なり、計測器が出力するデータこそ情報量が多く保存すべきものと、他の状況なども加味して解析・加工したあとで初めて意味を持つものなど、保管すべき対象のものがはっきりしないことも多い。

ここでは筆者が実際に行っている古地磁気・岩石磁気測定を例にして、各工程の構成を列挙して、データベースと管理システムの構築について考察する。

### 2.1 サイト

古地磁気学の場合、試料採取は「サイト」と言う単位で行われる。サイトは広い意味で試料採取場所を指すが、対象とするものによって、1サイトから採取される試料の古地磁気データが同一の時間の地磁気を示すものであったり、サイト内で地層の堆積方向に取るために長い時間（地質学的時間）の記録であったりする。ここでは単純に試料採取場所としてのサイトとする。

### 2.2 サンプル

最終的にひとつのサイトからひとつの古地磁気方位なり強度なりを求めることになるが、そのためには統計的に扱うだけのデータ量が必要となる。古地磁気学では、サイトから複数個の試料（sample）を採取する。試料は現場でブロック状もしくはコア状の形状で採取される。古地磁気測定は直径1インチ、高さ約20mmの円筒状試料で測定するので、一つのコア状・ブロック状試料を分割し、そのうちひとつの個別試料（specimen）を測定に供する<sup>[4]</sup>。同一試料から採取した別の個別試料は、確認等のために別途測定をしたり、他の種類の測定や観察、保管に回される。

### 2.3 測定結果データ

上記の1インチ円筒試料について残留磁化を専用の磁力計にて測定する。また、同時に無磁場中で温度を上げたり交流磁場にさらしたりする消磁法を段階的に行いながら測定し、

その安定性を確認する。一つの個別試料からは各消磁レベルごとに強度・方位 3 成分（「偏角・伏角・磁化強度」または「磁化強度の 3 成分ベクトル（試料座標系）」）が求められ、そこから主成分分析などを使って本質的な磁化方位を出したうえで、サンプル採取時の姿勢を考慮して現在の地理方位に対する座標系に変換して古地磁気方位を求める。上記の方法で個々の試料の方位を測定したうえで、サイト内について球面上の統計（フィッシャー統計）を利用して平均方位や標準角偏差、信頼限界角などを求める。このように、ひとつの「古地磁気方位」を抽出するための作業量やその過程が複雑であるため、最終的に研究成果としては「個別試料の方位と磁化強度」と「サイト内平均方位とばらつき」のみが報告される。機械が出力する測定データのほかにも最終結果を出すためのメタデータがあり、通常論文等や世界的なデータベースではこの最終結果と測定条件、サイト位置時代などが記載されているが、これらのメタデータも記載すべきと言う機運もある。今回のデータベースは内部資料であるので、そのレベルで記載するかについては、研究室の裁量（自分たちが試料とデータの紐づけができる程度でよい）と考えている。

### 3. 実装について

上記のような仕様例を実装するにあたり、各作業スペース等において用意すべきものを以下に記載する。

#### 試料保管スペース

保管庫内にて、測定前後の資料や残った試料などを保管する箱（コンテナ）には、試料（サイト）の名前および後述する URL を示したバーコードを書いたシールを貼付する。（図 1a）

#### 測定用試料

個々の測定試料について、試料ホルダーにも同様のバーコードのついたシールを貼付する（図 1b）。試料ひとつひとつに貼ることができない場合は、測定の期間試料を入れておくケースなどに貼付する。

#### 手元の PC（オフライン）

データベースを作成するために必要な、サイト・試料のデータや測定結果、試料関係の写真、地図情報、関係論文等へのリンクなどは、普段の実験室管理と同様に特定のパソコン上にあればよい。ここでデータベースの基となるテーブルを作成し、それらのファイルもこのパソコン上に保管する。データベースを関係データベース（RDB）などで管理する場合は、必要なテーブルすべてをここで作成できる。XML などを使用して簡便に作成する場合は、XML 作成に必要なスキーマファイルを用意し、Excel などでも XML の編集を行うか、XML エディタを使用してデータの追記をする。また、保管箱と試料に貼付するシールを作成するためのツールを作成する。Microsoft Excel/Access の「Microsoft Barcode

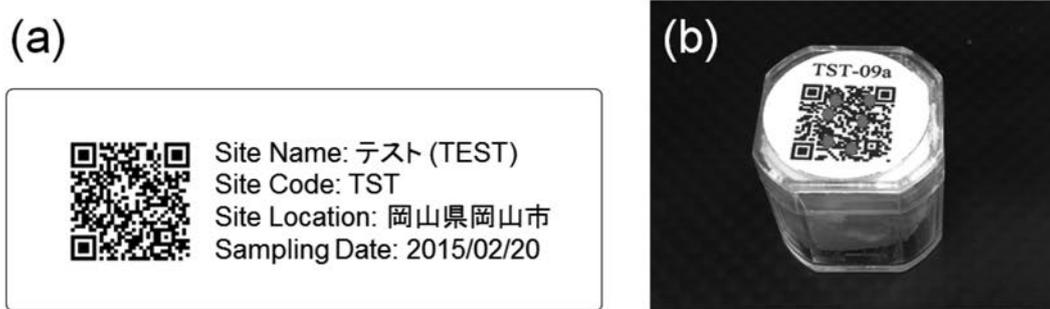


図 1 (a) 試料保管庫のコンテナや試料ケースに貼るラベルの例、(b) 試料本体に貼るスペースがある場合のラベル例。

Control」<sup>[5]</sup>と差し込み印刷機能を使用するか、他の言語などで作成してもよい。これらをシール台紙に印刷する。

### Web サーバー

公開用の Web サイトサーバーは自分が普段使っているもので構わない。測定結果がデータベース化されていて連携を取る場合や大規模なデータベースを RDB で開発する場合は SQL 等でインターフェイスを作成する必要があるが、XML による簡便なデータベースの場合は、上記オフライン PC で作成した XML ファイルと表示用のスタイルシート (XSLT) を

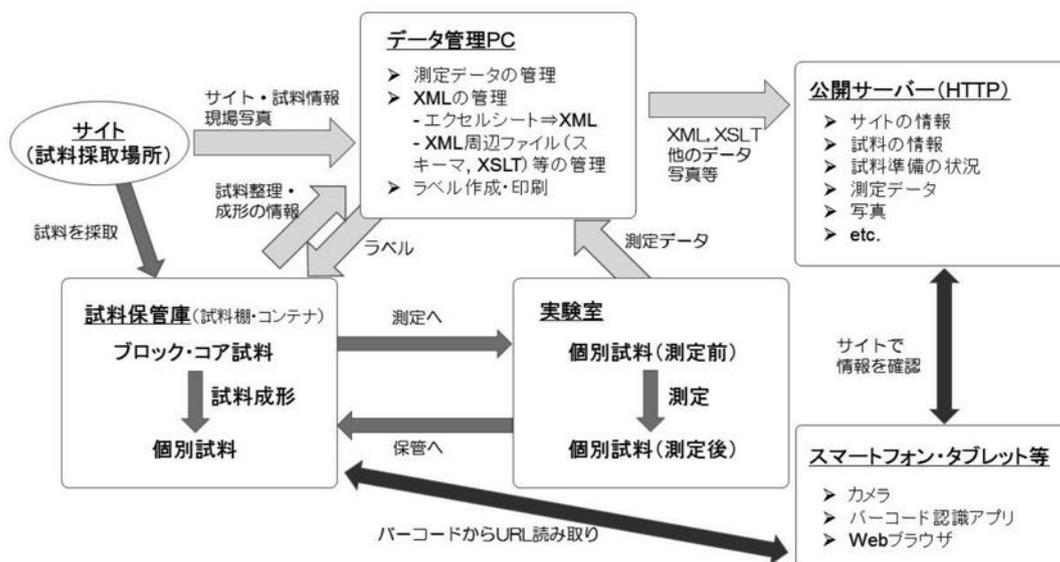


図 2 本研究による試料とデータのフローチャート、試料 (サンプル)・データ・およびタブレット等で確認する情報ごとに流れの線の太さを変えてある。

用意しておけばよい<sup>[6]</sup>。スタイルシートは 1 つのシステムにつき、表示したいタイプのホームページだけ用意すればいいので、基本的なサイト構築にはひとつだけ用意して共通で使用する。バーコードに記した URL のサイトに必要な XML ファイル、スタイルシート、関連する写真等をアップロードしておく。

### スマートフォン・タブレット等の端末

保管庫や実験室から試料の情報・データへアクセスする際にはスマートフォン・タブレットにバーコードリーダーアプリとウェブブラウザをインストールしておく。コンテナや試料ホルダー等に貼られたバーコードを読み、サイトにアクセスして、サイトや試料の詳細を確認することができる。端末から情報を更新する必要があるのであれば、上記のサイトに RDB や XML を編集する機能を付ける必要があるが、更新を別プロセスと割り切れば、管理用の PC にあるファイルを更新していけばよいので、その部分は不要である。

図 2 は試料・データの管理と流れ、および利用者によるデータ閲覧等に関する模式図である。非常に単純であるため、すでにある研究室の試料管理・データ管理に組み込んで適用させることができる。ホームページを持つ環境であれば、新たに購入するものはほとんどなく、簡単に統合管理環境を構築し始めることができるだろう。

## 4 まとめ

以上のように、実際に手元にある試料やデータの形態、管理運用方法も考慮して試料保管～データ管理を統合するシステムの構築について考察を行ったところ、比較的 low コスト、低労力にて構築できるだろうという結論に達した。今後は自分の研究室において上記のようなシステムを実際に実装し、その結果と効能について報告する予定である。

## 謝辞

本研究の一部は科研費補助金（16H01826, 17H02420）のサポートを受けております。また、岡山理科大学総合機器センター設置 MPMS 装置や高知大学海洋コア総合研究センター共同利用機器（採択番号 17A033, 17B033）をはじめ、多くの機器の成果を使用しております。これらの制度・組織に感謝いたします。

## References and Notes

- [1] 日本学術会議, 2015, 科学研究における健全性の向上について,  
<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-23-k150306.pdf>
- [2] 「各研究機関の考え方」って便利な方便、ご多分に漏れず本学も..., cf. 文部科学省, 科研費 FAQ,  
[http://www.mext.go.jp/a\\_menu/shinkou/hojyo/faq/1307161.htm](http://www.mext.go.jp/a_menu/shinkou/hojyo/faq/1307161.htm)

- [3] 国立研究開発法人海洋研究開発機構 (JAMSTEC) , 2009, 海洋生物データベース,  
<http://www.godac.jamstec.go.jp/bio-sample/>
- [4] パススルー型磁力計で測定する試料については掘削船などで掘られた 1.5m 長のロン  
グコアを半割したものや、そこにU型プラスチックケースを埋め込んだ「Uチャンネル」  
を使用することもある。  
cf. [https://peach.center.ous.ac.jp/cswiki/index.php?パススルー型超  
伝導磁力計システム](https://peach.center.ous.ac.jp/cswiki/index.php?パススルー型超伝導磁力計システム)
- [5] 日本マイクロソフト Office サポート チーム, 2017/07/05, “Microsoft  
Barcode Control” について,  
[https://blogs.technet.microsoft.com/officesupportjp/2017/07/05/b  
arcodecontrolforaccess/](https://blogs.technet.microsoft.com/officesupportjp/2017/07/05/barcodecontrolforaccess/)
- [6] @TongariAtamago, 2016, XMLをXSLTを使ってHTML文書にする,  
<https://qiita.com/TongariAtamago/items/b19b57cd0678da471eeb>