

# DV- $X\alpha$ 法計算支援環境の手引き

京都大学大学院 工学研究科 物質エネルギー化学専攻

泉 富士夫 \*

2020年12月18日

DV- $X\alpha$  法計算支援環境 [1,2] は SCAT による電子状態計算 [3]、前処理、ファイル変換、種々の解析、VESTA<sup>1)</sup> [4,5] による電子密度、静電ポテンシャル、波動関数の三次元可視化などのために、Windows 用高機能エディター、秀丸エディタ<sup>2)</sup> の秀丸マクロ機能を駆使して構築した。その開発にあたっては、Windows 用の RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境を構築したときの経験が大いに役立った。

## 1 支援環境をインストールする前に準備すべきこと

DV- $X\alpha$  分子軌道計算とクラスターモデル生成に必要なプログラムの最新版が必要となる。DV- $X\alpha$  研究協会のフリーソフトウェア配付用 Web ページ<sup>3)</sup> で、「新版 はじめての電子状態計算」[3] に記載されているユーザー名とパスワードを入力した後、dvxa\_v20X.zip (X は整数) と displat\_full.zip をダウンロードし、インストールしておく。さらに本支援環境から駆動する三次元可視化システム VESTA (v3.5.X) と結晶構造データファイル・コンバーター Open Babel<sup>4)</sup> (v3.1.X) は、それぞれ C:\Program Files\VESTA フォルダと C:\Program Files\OpenBabel フォルダにインストールする。

念のために、上記のようなフォルダ構造になっているか、フォルダの名前は上記の通りかを確認していただきたい。これらが別なフォルダに置かれている場合は、正常な動作を保証しない。OpenBabel のフォルダ名はデフォルトの名前 (バージョン番号入り) と違っていることに注意せよ。

本支援環境では、二つのシステム環境変数 dvdir と displat が参照される。たとえば「はじめての電子状態計算」の記述に従えば、dvdir は C:\DVXA、displat は C:\DISPLAT となる。設定終了後に再起動すると、これらの設定が確実に有効となる。本支援環境を使用する際には、バッチファイルを収めた DVXA\EXEC フォルダは DVXA フォルダから移動してはならない。

SCAT・eduDV 関係実行形式プログラム \*.exeDVXA\object フォルダに入っている。makef05 実行時に F05 と同一フォルダに setsize と size? (?: サイズを表す 1 文字のアルファベット) というサイズ情報のファイルが自動的に作成されるため、ユーザーによるサイズ指定は不要となった。

---

\* E-mail: fizumi3776@gmail.com

1) <http://jp-minerals.org/vesta/jp/>

2) <http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>

3) [https://www.dvxa.org/dvscat\\_download/](https://www.dvxa.org/dvscat_download/)

4) <https://github.com/openbabel/openbabel/releases>

CONTRDALL (3.4 参照) というマクロを使用するためには、坂根弦太氏 (岡山理科大学) が開発された教育用分子軌道計算システム eduDV をインストールする必要がある。

本支援環境を用いる際には、秀丸エディタの最新版を使用しなければならない。64 ビット版 Windows を使用している場合、64 ビット版秀丸エディタをインストールすることが望ましい。32 ビット版秀丸エディタは通常 C:\Program Files\Hidemaru (x86) フォルダにインストールされるため、トラブルが起きる可能性がある。

すでに秀丸エディタを使い込んでいて、諸設定が完了しており、それらの設定を保存しておきたい場合は、

その他 → 設定内容の保存/復元

で“設定情報をファイルに保存する”を選び、C:\Program Files\Hidemaru\\*.hmereg (\* は適当な文字列) というファイルに設定情報を出力しておくといよい。このファイルさえあれば、

その他 → 設定内容の保存/復元

で“設定情報をファイルから復元する”を選ぶことにより、いつでも支援環境インストール以前の設定内容に復帰できる。

エクスプローラーでは (登録されている) ファイルの拡張子を表示しないのが Windows のデフォルト設定となっている。そこで、エクスプローラーで

ツール → フォルダオプション → 表示

を選び、“登録されている拡張子は表示しない”のチェックをはずしておく。

64 ビット版秀丸エディタを使っている場合は、

その他 → 動作環境 → 64bit 版

で“32bit DLL をマクロの loaddll で動作可能にする”がチェックされていることを確認する。

## 2 支援環境のインストールと初期設定

配布ファイル DV-Xa.zip を解凍すると、Macros と Rest という二つのフォルダと本ドキュメント Readme\_DV.pdf が生成する。解凍の仕方によっては、DV-Xa フォルダの下にそれら三つが存在しているかもしれない。Macros フォルダは DVXA フォルダの下へ移す。一方、Rest フォルダはどこに置いて構わない。もちろん DVXA フォルダ中でも差し支えない。

一部の自作秀丸マクロにおいて dynamic link library、田楽 DLL<sup>5)</sup> の関数を呼び出している。田楽 DLL を使えるようにするために、Rest\DengakuDLL.dll (田楽 DLL の最新版) を秀丸エディタのフォルダ (Hidemaru.exe を含むフォルダ。通常、C:\Program Files\Hidemaru) にコピーする。田楽 DLL のマニュアル一式は Rest\DengakuDLL\_manual フォルダに HTML ファイル \*.html として格納されており、index.html をブラウザで開くことにより参照できる。

マクロ No. 53 (選択部分を 100 桁に揃える) を使用する場合は、Rest\quote2.ini を秀丸エディタのフォルダ内にコピーする。

環境変数 dvdirc が C:\DVXA でない場合、すなわち DVXA フォルダが C ドライブのルート直下に置かれていない場合は、秀丸エディタを立ち上げ、

その他 → 動作環境 → 環境 → パス

において、DVXA\Macros フォルダの絶対パスをマクロファイルと設定ファイル用のフォルダに指

---

5) <http://www.ceres.dti.ne.jp/~sugiura/>

定しておく。以後、マクロメニューの下のマクロ登録を選んだとき、このフォルダの絶対パスがダイアログボックスの下方に表示される。この操作は本支援環境が更新されるたびに必要となる。デフォルトでは、マクロファイル用のフォルダは C:\DVXA\Macros、設定ファイル用のフォルダは C:\DVXA\Macros となっている。

キー割り当て、マクロ登録、ユーザーメニューを本支援環境用に最適化するために、

その他 → キー割り当て → 読み込み → 参照

により DVXA\Macros フォルダ中の SCAT.key を読み込む。なお、キー割り当ての一覧表は、

その他 → キー割り当て → 一覧表作成

で作成できる。

次に、キー割り当てとマクロ登録内容以外の設定を本支援環境用に最適化するために、

その他 → 設定内容の保存/復元

で“設定情報をファイルから復元する”を選び、DVXA\Macros フォルダ中の SCAT.reg を読み込む。ここで、表示メニューにおいて、[ツールバー] と [ファンクションキー表示] がチェックされていることを確認しておく。

最後に

その他 → 動作環境 → ウィンドウ → 配置

で“位置を指定する”と“サイズを指定する”をチェックした後、自分の PC のディスプレイに合わせて、ウィンドウの位置と大きさを適当な値に設定する。

## 3 支援環境の使用法

### 3.1 マクロ No. 1~9

次の秀丸マクロはマクロメニューとツールバー（ボタン）に表示される：

- 
1. XYZ2F01.mac (**XYZ2F01**): 現在編集中のファイル XMol XYZ (\*.xyz) を F01 のひな形ファイルに変換
  2. MAKEF25.mac (**MAKEF25**): F01 から対称軌道データファイル F25 を作成
  3. MAKEF05.mac (**MAKEF05**): F01 から F05 を作成  
表示ファイル: F05
  4. DVSCAT.mac (**DVSCAT**)  
表示ファイル: F06Z, F08  
収束した場合の表示ファイル: F08E, F26  
収束しなかった場合の表示ファイル: F36, F06ZP
  5. POPANL.mac (**POPANL**)  
表示ファイル: F08P
  6. POPANLS.mac (**POPANLS**)  
表示ファイル: F08P
  7. NETC.mac (**NETC**)  
表示ファイル: I08

8. BNDODR.mac (**BNDODR**)  
表示ファイル: BN8
9. WAVNUM.mac (**WAVENUM...**): 波動関数番号を記録したファイル WAVNUM を作成表示  
ファイル: WAVNUM
10. eduDV.mac (**eduDV...**): 教育用分子軌道計算システム eduDV のメインメニュー。「データ自  
動入力」をはじめとする多数のサブメニューをもつ。詳細については、eduDV の取り扱い説明  
書をお読みいただきたい。

---

ただし ( ) 内の文字列は秀丸マクロのタイトルを示す。「初めての電子状態計算」 [3] を参照するとともに各マクロ \*.mac を閲覧すれば、容易に理解できよう。マクロ → マクロ登録において、各マクロのタイトルを好きなように書き替えることができる。

本支援環境の利便性を高めるため、各マクロを実行後に出力テキストファイル (の一部) が自動的に開かれる場合がある (上のリスト中の「表示ファイル」)。内容を改変すべきでないファイルは上書き禁止 (タイトルバーに表示) の状態で開かれる。

No. 1 の XYZ2F01 は必ず \*.xyz を表示している状態、言い換えればカレントファイルが \*.xyz の状態で実行しなければならない。\*.xyz は、通常 VESTA で出力する。必要なら原点を移動して F01 を出力し、それをオープンする。その F01 はひな形にすぎず、適当に修正して使う必要がある。たとえば、NEQ のところへ出力された通し番号を変更することは多いだろうし、中性化学種でなくイオンを扱う場合は、

```
|NEQ|| CHG ||U/D|| RD || VD | 1
```

の下に新たな行を挿入しなければならない。

No. 2 の MAKEF05 は F01 と同一フォルダに対称軌道データを収めたファイル F25 が存在すると、これを読み込んで F05 を作成する。F25 は symOrb と Mathematica により別途作成されていなければならない (「初めての電子状態計算」第 4 章参照)。

No. 3 の DVSCAT.mac の 1 行目で dvscat.bat の最大実行回数 (#max\_dvscat) が与えられている。配布ファイルでは #max\_dvscat の値は 20 となっているが、必要に応じて変更していただきたい。

DVSCAT.mac 実行中には、収束状況をモニターするため、常に F06Z が表示される。DVSCAT.mac は F06Z の 1 行目に “Converged” と書かれると、計算が収束したと見なす。最初から再計算したい場合は、F06Z を削除する必要がある。

コマンドプロンプトのウィンドウ cmd.exe が秀丸エディタのウィンドウを覆い隠すようだったら、当該ウィンドウの位置や大きさを変更する必要がある。演算時間の長い計算を実行し、その間に cmd.exe の左上のアイコンを右クリックして “プロパティ” を選ぶ。次に “レイアウト” で窓の位置とサイズを適当に変え、“ウィンドウの位置” の “システム設定を使う” のチェックをはずし、“OK” をクリックした後、“同じタイトルのウィンドウに適用する” をチェックする。

## 3.2 マクロ No. 11~20

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の “クラスターモデル” あるいは Ctrl-E で現れるポップアップメニュー (ユーザーメニュー) “DV- $X\alpha$  User Menu” で利用できる:

- 
11. MAKEUNITC.mac (**MAKEUNITC...**): CIF (Crystallographic Information File) から MAKEUNITC の入力ファイル \*.ut を生成。
  12. MAKELAT.mac (**MAKELAT...**): \*.ut に記録された単位格子を拡張し、原子座標を決定
  13. DISPLAT.mac (**DISPLAT...**): MAKELAT で決定した原子座標からクラスターモデルを作成し、F01 と F03 を出力。
  14. SYMCHK.mac (**SYMCHK**): F01 中の原子座標を解析し、どのような対称性をもつかを決定  
表示ファイル: F01SYM
  15. MADANAL.mac (**MADANAL**): マーデルング・ポテンシャルの妥当性を検証  
表示ファイル: F03, F08M
  16. OPTF03.mac (**OPTF03**): F08M で  $q/r$  がばらつく場合、F03 を最適化  
表示ファイル: F03, F03.opt
  17. ATLIST.mac (**ATLIST**): クラスターモデルの原子構成に関する情報を表示  
表示ファイル: ATOUT
  18. BLLIST.mac (**BLLIST**): クラスターモデル中の原子間距離を種類ごとに第 5 近接距離まで表示  
表示ファイル: BLOUT
  19. ATOMLEN.mac (**ATOMLEN...**): 指定した 2 原子間の距離を計算して画面表示
  20. NSCH.mac (**NSCH...**): 指定した原子の近接原子を探索して、原子間距離を画面表示
- 

MAKEUNITC (No. 11) は DV- $X\alpha$  会員限定ダウンロードページから入手する makeunitc.exe を利用する。MAKEUNITC 実行中に入力するファイル名には、通常、絶対パスを付ける (MAKELAT と DISPLAT も同様)。付けない場合は、C:\¥DISPLAT に出力される。CIF が makeunitc でうまく読み込めないときは、いったん VESTA で当該 CIF を読み込み、

File → Export Data

で別形式の CIF を出力するとよい。今度は makeunitc.exe で入力できるはずである。

DISPLAT (No. 13) の出力した F01 と F03 は必要なら他のフォルダに移し、以後の処理に備える。

### 3.3 マクロ No. 21~30

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の“グラフデータ”あるいは Ctrl-E で現れるポップアップメニュー (ユーザーメニュー) “DV- $X\alpha$  User Menu”で利用できる：

---

21. MAKEL04.mac (**MAKEL04...**): L04 と L05 を作成  
表示ファイル: L04, L0
22. LVLSHM.mac (**LVLSHM**)  
LVLSHM.mac 実行後に出力ファイル L07 を DV PLOT でプロット
23. MAKED04.mac (**MAKED04...**): D04 と D05 を作成  
表示ファイル: D04, D05

24. DOS.mac (**DOS**)  
DOS.mac 実行後に出力ファイル D07S を DVPLOT でプロット
  25. MAKEX04.mac (**MAKEX04**): D04 と D05 が存在する場合は D04 を X04 に、D05 を X05 にコピーし、それらが存在しない場合は MAKED04.BAT を実行した後、D04 を X04 に、D05 を X05 に改名  
表示ファイル: X04, X05
  26. XPS.mac (**XPS**)  
XPS.mac 実行後に出力ファイル X07S を DVPLOT でプロット
  27. MAKELB.mac (**MAKELB**): LVLBNDS (No. 28) 用のひな形ファイルとして C:\¥DVXA¥EX¥TI6C フォルダから LB4S と LB5S をカレントフォルダにコピー
  28. LVLBNDS.mac (**LVLBNDS**): ある原子間の結合について分子軌道ごとに overlap population を求め、overlap population diagram を作成  
表示ファイル: LB7SDT, LB8S  
LVLBNDS.mac 実行後に出力ファイル L07S を DVPLOT でプロット
  29. MAKEB05.mac (**MAKEB05**): BASEF (No. 30) 用のひな形ファイルとして C:\¥DVXA¥EX¥CO フォルダから B05 をカレントフォルダにコピー (編集する必要あり)
  30. BASEF.mac (**BASEF**): 使用した基底関数がどんな形になったかを調べるため、動径部分の形状を見る  
BASEF.mac 実行後に出力ファイル B07 を DVPLOT でプロット
- 

これらのうち比較的使用頻度が高い MAKEL04 (No. 21) と LVLSHM (No. 22) には、それぞれファンクションキー F1 と F2 (ステータスバーにボタン表示) が割り当てられている。

偶数番目のマクロを実行すると、最後に DVPLOT (2007 年版) がグラフを自動表示してくれる。

### 3.4 マクロ No. 31~35

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の“可視化”あるいはファンクションキー F3~F7 (ステータスバーにボタン表示) で利用できる: †

---

31. DVPLOT.mac (**DVPLOT...**): dvplot.exe を起動
  32. MAKEC04D.mac (**MAKEC04D...**): F05, F09, F39 から conrtd の入力ファイル C04D を作成  
表示ファイル: C04D
  33. CONTRD.mac (**CONTRD**): F09, F39, C04D から三次元可視化システム VESTA の入力ファイル \*.SCA を作成
  34. CONTRDALL.mac (**CONTRDALL**): すべての分子軌道に対する \*.scat ファイルを全自動で作成 (分子軌道数が 100 個以下の場合のみ使用可)
  35. VESTA.mac (**VESTA**): 現在編集中のファイルを VESTA でオープン
-

従来の DVPLOT, DVPLOTH, DVPLOTS を統合したグラフプロット・プログラムの新バージョン dvplot.exe (マクロ No. 31 中で使用) は本支援環境の利便性を向上させるために、2007 年に水野正隆氏に作成していただいた。DVPLOT, DVPLOTH, DVPLOTS と異なり、入力ファイル名を引数として受け渡せるようになった。

秀丸エディタでは F3 にはデフォルトで“下候補”が割り当てられるが、これが DVPLOT に入れ替わったことになる。そこで“下候補”には Ctrl-G を新たに割り付けた。

MAKEC04D (No. 32) と CONTRD (No. 33) の用法については、VESTA のマニュアル VESTA\_manual.pdf 中の文書“How to use contrd and makec04d”を参照されたい。

No. 35 の VESTA で読み込めるファイルは

1. F01
2. CHG3D.scat (contrd の出力する電子密度のピクセルデータファイル)
3. \*.cif
4. \*.cub (\*.cube; Gaussian Cube 形式)
5. \*.ins (RIETAN-FP 標準入力)
6. \*.lst (RIETAN-FP 標準出力)
7. \*.mld (MOLDA 形式)
8. \*.mol (MDL molfile)
9. \*.pdb
10. \*.sca (\*.scat)
11. \*.vesta
12. \*.xyz (XMol XYZ 形式)

である。現在編集中のファイルがこれらのどれにも該当しないときは、単に VESTA が起動される。ただし、すでに VESTA が動いている場合は何も起こらない。

### 3.5 マクロ No. 36~38

これらの秀丸マクロはマクロメニュー中の“可視化”だけで利用できる：

---

#### 36. MAKEC04.mac (MAKEC04)

波動関数や電子密度などの等高線を作図するプログラム CONTR の入力ファイル C04 を作成

#### 37. CONTR.mac (CONTR)

C04 で設定した平面上の波動関数や電子密度の値を計算

#### 38. CMAP.mac (CMAP)

等高線図を作図

---

### 3.6 マクロ No. 41~45

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の“その他”あるいは Ctrl-E で現れるポップアップメニュー(ユーザーメニュー)“DV- $X\alpha$  User Menu”で利用できる：

- 
41. HLGAP.mac (**HLGAP**)  
表示ファイル: F08E.hlgap
  42. HLGAPS.mac (**HLGAPS**)  
表示ファイル: F08E.hlgaps
  43. PRESTS.mac (**PRESTS**)  
表示ファイル: F08E.prests
  44. PRESTSL.mac (**PRESTSL**)  
表示ファイル: F08E.prests
  45. VLINN.mac (**VLINN**): SCAT による計算の最終 10 サイクルにおけるオービタル・ポピュレーション (どの原子のどの原子軌道に電子がいくつ入っているか) を、繰り返し回数ごとでなく原子軌道ごとに並べ替えて出力  
表示ファイル: F36.out
- 

### 3.7 マクロ No. 46, 47

---

46. OpenBabel.mac (**Open Babel...**): 結晶構造データファイルを他のフォーマットのファイルに変換するためのユーティリティ Open Babel v3.1.X 用のグラフィカル・ユーザー・インターフェース OpenBabelGUI (実行形式ファイル: OBGUI.exe) を起動
  47. MAKEF05SCFS.mac (**MAKEF05SCFS**): SCFS モードでの DV- $X\alpha$  計算用の F05 を作成  
表示ファイル: F05
- 

マクロ No. 46 は種々の形式で記録された結晶構造データファイルを CIF や XYZ 形式ファイルに変換するのに用いるとよい。

マクロ No. 47 中で述べた SCFS モードでは、原子基底関数を作成する際、周囲の原子の電子もある程度考慮してポテンシャルを作成し、それに基づいて原子基底関数をセルフコンシステントになるまで最適化する。坂根氏の Web サイト<sup>6)</sup> で公開されている SCFS モードに関する情報を注意深く読んでから、自己責任でお使いいただきたい。

### 3.8 マクロ No. 51, 52

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の”汎用マクロ”あるいはファンクションキー F8, F9 (ステータスバーにボタン表示) で利用できる:

---

6) <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/>

- 
51. openExplorer.mac (エクスプローラ): エクスプローラによりカレントフォルダを開く
  52. Command\_Prompt.mac (コマンドプロンプト): カレントフォルダでコマンドプロンプトを起動する
- 

エクスプローラ (No. 51) とコマンドプロンプト (No. 52) はカレントフォルダを保ったまま起動される。マクロが用意されていないコマンドや操作を実行するのに便利である。

### 3.9 マクロ No. 53

次の秀丸マクロはマクロメニュー中の“汎用マクロ”あるいは Ctrl-Q で利用できる：

- 
53. quote2.mac (桁揃え): 自動改行挿入マクロ<sup>7)</sup>
- 

これは本文書などの一行の長さを 100 桁に統一するために便宜上、組み込んだだけで、DV- $X\alpha$  分子軌道計算とはまったく関係ない。

### 3.10 すべての秀丸マクロに共通の操作

すべての秀丸マクロは F01 や F05 など同一のフォルダに存在する任意のテキストファイル (F01 と F05 を含む) のウィンドウから起動しなければならない。そのフォルダがカレントフォルダと見なされる。

一つのファイルのタブをウィンドウ外部に向かってドラッグし、ウィンドウの外枠が見えてきたところでドロップすれば、そのファイルをオープンした状態のウィンドウが開く。タブ上でのダブルクリックでもよい。こうして開いたウィンドウから元のウィンドウに当該ファイルのタブをドラッグ&ドロップすれば、元に戻る。

各タブの左側に位置する × を □ で囲った形のマークをクリックすると、そのファイルを閉じることができる。

複数のファイルを開いている場合、それぞれのファイルにタブが割り当てられる。特定のタブをマウスの左ボタンでダブルクリックすると、当該タブ以外のタブに相当するファイルが閉じられる。また、特定のタブを右クリックすると、当該タブより右側の全タブのファイルが閉じられる

## 4 使用にあたっての留意点

自分の PC の CPU やメモリー容量に応じて、

その他 → 動作環境 → 環境

で“編集可能な最大行数”を変更し、さらに

その他 → 動作環境 → パフォーマンス

で最大行数とパフォーマンスのレベルを適当に変更するとよい。後者では、詳細設定も可能である。

---

7) [http://hide.maruo.co.jp/lib/macro/enter\\_code.html](http://hide.maruo.co.jp/lib/macro/enter_code.html)

その他 → 動作環境 → ウィンドウ  
でタブモードをチェックした状態で使うこと。

秀丸マクロ \*.mac は必要に応じて変更して使うとよい。秀丸マクロの詳細については、マクロメニューの一番下のマクロヘルプを参照されたい。

本支援環境では、

動作環境 → ファイル → 排他制御  
において、“ファイルを読み込みなおす”を選択している。他の設定を選ぶと、すでにオープンされているファイルを再びオープンしようとしたときの操作が煩雑になるので、注意すること。

秀丸エディタで編集したファイルのバックアップを保存しておきたい場合は、

その他 → 動作環境 → 保存  
で、“所定のフォルダにバックアップを作成する”をチェックし、適当なフォルダを指定しておく  
とよい。ただし、

その他 → ファイルタイプ別の設定 → その他（共通） → 保存・読み込み  
で“バックアップファイルの作成”をチェックする必要がある。

## 5 付録 1： 秀丸マクロ関係の操作

秀丸マクロについて学習する際には文献 [6] が役立つ。以下、本支援環境を構築した際の操作について記録しておく。

### 5.1 ユーザーメニューへのマクロの登録

その他 → メニュー編集 → ユーザーメニュー → メニュー：メニュー  $n$  ( $n = 4 \sim 7$ )  
でタイトルを設定。“追加”をクリックする。コマンド：メニュー/マクロとし、マクロを指定し、キーを入力した後、“追加”をクリックしてマクロを登録する。必要に応じて“一つ上に移動”をクリックし、適当な位置に移動する。

キーを変更するときは、“追加”をクリックして再登録し、必要なら上に移動した後、旧登録マクロを削除する。

### 5.2 マクログループとマクロへのキーの割り当て

その他 → キー割り当て → コマンド：メニュー/マクロ  
で ctrl, Alt などをチェックして、それとともに押すキーを選ぶか、単独のファンクションキーを選び、コマンド：メニュー/マクロでメニュー  $n$  を選んでから、OK をクリックする。同様に、特定のマクロにキーを割り当てることもできる。

### 5.3 キー割り当ての解除

その他 → キー割り当て  
でそのキー（たとえば Ctrl+E）を指定した後、“コマンド：”でファイル系+（なし）を指定する。従来のキー割り当てを変更する際には、新しいキーを割り当てる前にキー割り当てを解除する必要がある。

## 5.4 ツールバーにおけるマクロのアイコンの表示

その他 → 動作環境 → ウィンドウ

で“ツールバー”をチェックし、“詳細”をクリックする。右側の“コマンド”で“メニュー/マクロ系”を選び、追加するマクロを選択後、“追加”（中央部の一番上）をクリックする。その際、“削除”をクリックすれば、そのマクロが削除される。メニュー名  $Mn$  ( $n$ : 整数 1, 2, 3, ...) のアイコンがツールバーの右端に追加される。“詳細”の隣の“デザイン”をクリックし、“マクロ名を表示”をチェックする。

## 5.5 プログラム実行系命令

プログラム実行命令 `run`, `runsync`, `runsync2` の後ろには文字列が来る。文字列同士は“+”でつなぐ。文字列が空白を含む絶対パス+ファイル名の際には、二重のダブルクォーテーション記号ペアで囲む。

`runsync` と `runsync2` の引数（文字列）中では、標準入出力のリダイレクトやパイプは使えない。

一対のダブルクォーテーション記号の内側では、`¥` マークは `¥¥`、ダブルクォーテーション記号は `¥"` と記述しなければならない。詳しくは、

マクロ → マクロヘルプ → 目次 → 式について → 文字列  
を参照のこと。

## 5.6 文字列の強調表示

その他 → ファイルタイプ別の設定 → 拡張子 → 表示とカラー → 強調表示

を選ぶ。当該拡張子をもつファイルの窓で指定するとよい。拡張子がないときは追加する。表示方法は、“表示とカラー”を選択して調べ、“プロパティ”をクリックして指定する。

## 5.7 ステータスバーのカスタマイズ

その他 → 動作環境 → ウィンドウ

で“ステータスバー”と“ファンクションキーと合体”をチェックし、“詳細...”で表示項目をチェックする。項目を減らすと、各ファンクションキーのボタンが長くなる。

## 6 付録 2： Cimedine の分子軌道計算と三次元可視化

以下のコンテンツは「VESTA を利用した三次元可視化と粉末構造解析」講習会（京都大学、2019 年 3 月 18 日）の参加者に配付したチュートリアル（RIETAN\_VESTA\_cooperation.pdf）からの再録である。

テキストエディターを基盤とする統合支援環境として、筆者は秀丸エディタと Jedit  $\Omega$  用の RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境だけでなく秀丸エディタ用の [DV- \$X\alpha\$  法計算支援環境](#) [1,2] も開発した。「新版 はじめての電子状態計算」[3] は 6 章と 7-5 節を同支援環境の紹介と使用例に当てており、秀丸エディタと VESTA 使用時のスナップショットと VESTA で得られた 3D イメージを多数含んでいる。同書の 6-2 節を読めば、DV- $X\alpha$  法のプログラム一式、DV- $X\alpha$  法計算支援環境、

教育用分子軌道計算システム eduDV をインストールできる。初心者にとっては、「DV- $X\alpha$  法計算支援環境利用の手引き」(坂根氏が執筆)も大いに役立つだろう。

以下の実演では、Cimetidine の電子密度と静電ポテンシャルを DV- $X\alpha$  分子軌道計算で決定し、放射光粉末回折データから MPF 解析で計算した電子密度と比較する<sup>8)</sup>。分子を対象とする DV- $X\alpha$  分子軌道計算ではクラスターモデル、ひいてはマードルンク・ポテンシャルを考慮するための入力ファイル F03 の作成が不要なので、結晶を扱う場合に比べ手軽に実行できる。なお今回の実演では、時間を節約するために 1 と 2 はスキップする。

1. Cimetidine の CIF、Cimetidine\_DV¥Cimetidine.cif を VESTA で入力し、cimetidine 一分子だけを残して他の原子は Select モードで除去する。
2. 「ファイル > Export Data」を選び、XYZ 形式の cimetidine.xyz として保存する。この際、“Do you want to save hidden atoms too?” の問いには“いいえ (N)”をクリックしなければならない。
3. 秀丸エディタの「その他 > 設定内容の保存/復元<sup>9)</sup>」を選んで設定内容の保存/復元ダイアログ(図 1)を開き、“設定情報をファイルから復元する”と“現在の設定をリセットしてから復元”をチェックした後、[次へ >>] をクリックする。
4. DV- $X\alpha$  法計算支援環境用設定ファイル C:¥dvxa¥Macros¥SCAT.hmereg<sup>10)</sup> を開くと、それに保存されている設定情報がレジストリに書き戻される。
5. 秀丸エディタヘルプのウィンドウが前面に現れるが、今は参照する必要がないので閉じておく。
6. 秀丸エディタで Cimetidine\_DV¥Cimetidine.xyz を開く。
7. [XYZ2F01] をクリックして Cimetidine.xyz を MAKEF05 用入力ファイル F01 に変換する。F01 が新たなタブの下に表示される(図 2)。原子の種類と座標が記録されている。

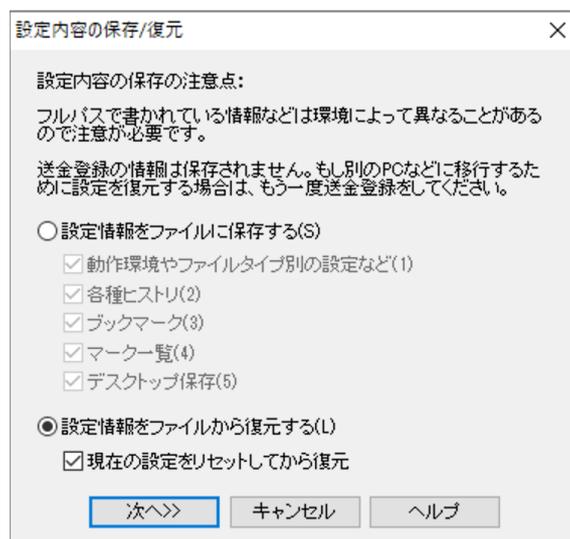


図 1 設定内容の保存/復元ダイアログ。

8) DV- $X\alpha$  法による計算結果は坂根氏に提供して頂いた。坂根氏は DV- $X\alpha$  法計算支援環境に関する豊富な情報と EduDV を [http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/index.html#assistance\\_environment](http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/index.html#assistance_environment) で提供しておられる。

9) **[Alt]+[O]+[U]** でもよい。Parallels Desktop + Windows の場合は **[option]+[O]+[U]**。

10) 以前は二つの設定ファイル SCAT.key と SCAT.reg を読み込んでいたが、秀丸エディタ v8.00 以降で使えるようになった拡張子 .hmereg の設定ファイルを採用した。

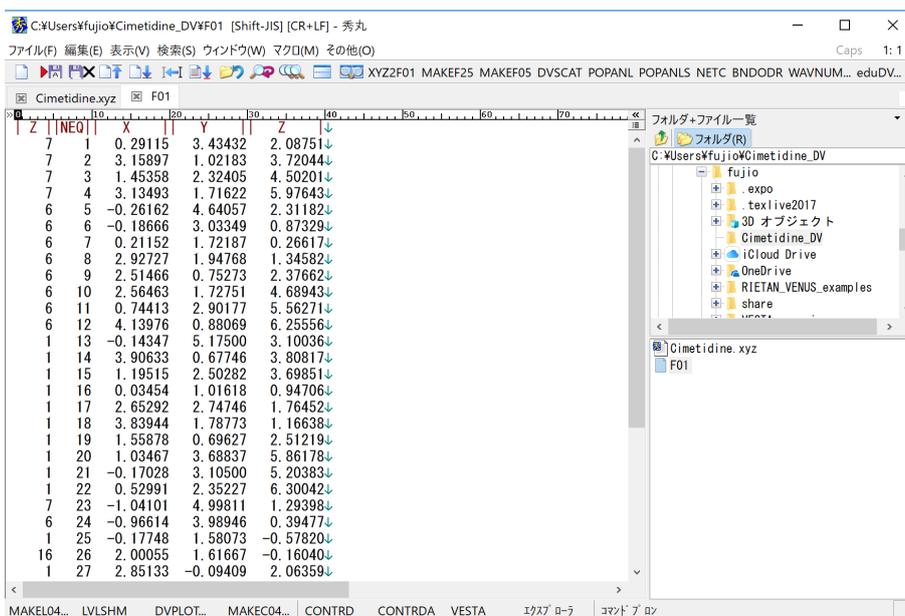


図2 DV- $X\alpha$  法計算支援環境上で XYZ2F01 を実行し、cimetidine.xyz を F01 に変換した後のスナップショット。右側にフォルダ+ファイル一覧モードのファイルマネージャ枠が表示されている。

8. [MAKEF05] をクリックし、F01 からメインの DVSCAT [3] 用入力ファイル F05 を作成する。
9. [DVSCAT] をクリックして DVSCAT により DV- $X\alpha$  分子軌道計算を行う。バイナリーファイル F09 (固有ベクトルの値)、F39 (全配列値) などが出力される。
10. ステータスバー上の [MAKEC04D...] をクリックしてから “0” を入力し、F05, F09, F39 から CONTRD 用入力ファイル C04D を作成する。
11. 必要なら C04D の一行目に出力されている分割数を FORMAT(3I5) で変更する。滑らかな等値曲面を描きたいときは、三つとも 101 にするとよい。
12. ステータスバー上の [CONTRD] をクリックして F09, F39, C04D から波動関数、電子密度、静電ポテンシャルを記録した VESTA 用入力ファイル \*.scat を作成する。
13. 秀丸エディタが F01 を表示している状態で [VESTA] をクリックする。
14. 黒枠は CONTRD で波動関数、電子密度、静電ポテンシャルの 3D データを計算・出力した範囲を示す。[Properties] をクリックし、「Unit cell > Line」で “Do not show” をチェックしてから [OK] をクリックして黒枠を消す。
15. 秀丸エディタで「ファイル > 全終了」を選ぶ。
16. 「Edit > Edit Data > Volumetric Data > Isosurfaces」において 3D 電子密度のファイル CHG3D.scat を読み込み、[OK]、[Apply]、[OK] をクリックする。
17. [Properties] をクリックし、[Isosurface] タブをクリックしてから “Isosurface level” に  $0.1645 a_0^{-3}$  ( $= 1.11 \text{ \AA}^{-3}$ ) を入力し、“Opacity 1” を 100 とする<sup>11)</sup>。
18. 「Edit > Edit Data > Volumetric Data > Surface coloring」において 3D 静電ポテンシャルのファイル POT3D.scat を読み込み、[OK]、[Apply]、[OK] をクリックして静電ポテンシャルの値に応じて電子密度曲面を彩色する (図 3)。
19. 秀丸エディタで「その他 > 設定内容の保存/復元」で RIETAN\_VENUS.hmereg を選び、元の

11)  $a_0$  は atomic unit (長さ) を表す。ボーア半径に等しい。 $a_0 = 0.529177211 \text{ \AA}$ 。

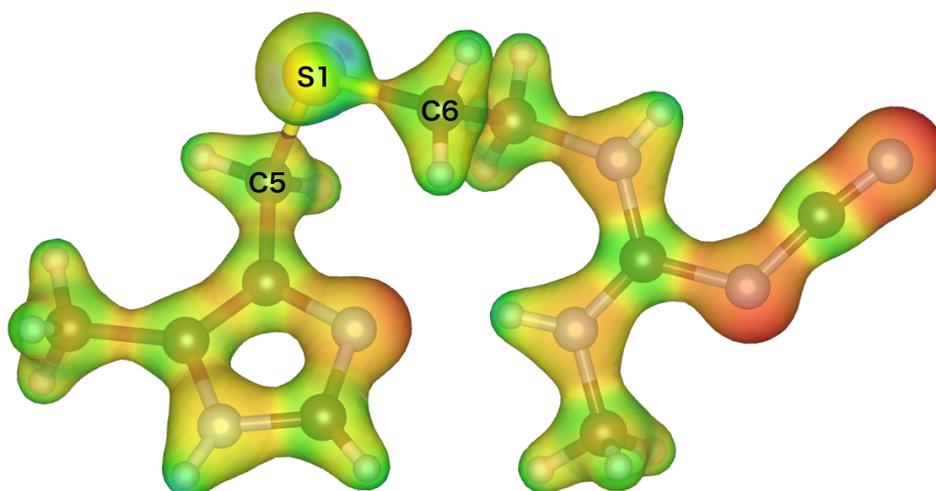


図3 DV- $X\alpha$  分子軌道計算で決定した cimetidine の電子密度分布。等値曲面レベル  $0.1645 a_0^{-3}$  で作画し、静電ポテンシャルで彩色した。

RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境に戻しておく。

20. 秀丸エディタで「ファイル > 全終了」を選ぶ。

放射光粉末回折データの MPF 解析により実験的に求めた電子密度分布については、Win\_exercise.pdf 中の「Cimetidine の MPF 解析」を参照されたい。

## 謝辞

DV- $X\alpha$  法計算支援環境の開発にあたっては、坂根弦太氏の助けを大いに借りた。ここに記して謝意を表す。

## 参考文献

- [1] 門馬綱一, 泉 富士夫, 坂根弦太, DV- $X\alpha$  研究協会会報, **20**, 252 (2007).
- [2] 坂根弦太, 門馬綱一, 泉 富士夫, DV- $X\alpha$  研究協会会報, **21**, 13 (2008).
- [3] 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).
- [4] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **41**, 653 (2008).
- [5] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272 (2011).
- [6] 吉良野すた, “執筆を効率化したい人のための秀丸エディタ実践入門”, 第 16 章, Kindle (2019).