

# 孤立原子・孤立イオン計算プログラム

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[5-10], 最新版のプログラム一式[11]とマニュアル[12], および論文[13]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[1-13], DV- $X\alpha$ 法[14-24], 秀丸エディタ[25], DV- $X\alpha$ 法計算支援環境[26], VESTA[27, 28]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 に含まれる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, 周期表(表 1)の原子番号 1 番の水素(H)から原子番号 94 番のプルトニウム( $_{94}\text{Pu}$ )までに対応していた. 今回, これを拡張し, 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( $_{118}\text{Og}$ )までにも対応することに成功したので報告する.

表 1. 周期表

1																		18					
H		2																He					
Li		Be												13		14	15	16	17	Ne			
Na		Mg												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)[29]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

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 を改訂するにあたり、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)

atom.f                  atomn.f                  ion.f                  ionn.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)

latom.bat                  latomn.bat                  lion.bat                  lionn.bat

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

atom.exe                  atomn.exe                  ion.exe                  ionn.exe

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

atom.bat                  atomn.bat                  ion.bat                  ionn.bat                  makeeduDV.bat

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

atom.mac	atom1_menu.mac	atom2_menu.mac	atom3_menu.mac	atom4_menu.mac
atom5_menu.mac	atom6_menu.mac	atommenu.mac	atomn.mac	atomn_Ac.mac
atomn_Ag.mac	atomn_Al.mac	atomn_Am.mac	atomn_Ar.mac	atomn_As.mac
atomn_At.mac	atomn_Au.mac	atomn_B.mac	atomn_Ba.mac	atomn_Be.mac
atomn_Bh.mac	atomn_Bi.mac	atomn_Bk.mac	atomn_Br.mac	atomn_C.mac
atomn_Ca.mac	atomn_Cd.mac	atomn_Ce.mac	atomn_Cf.mac	atomn_Cl.mac
atomn_Cm.mac	atomn_Cn.mac	atomn_Co.mac	atomn_Cr.mac	atomn-Cs.mac
atomn_Cu.mac	atomn_Db.mac	atomn_Ds.mac	atomn_Dy.mac	atomn_Er.mac
atomn_Es.mac	atomn_Eu.mac	atomn_F.mac	atomn_Fe.mac	atomn_Fl.mac
atomn_Fm.mac	atomn_Fr.mac	atomn_Ga.mac	atomn_Gd.mac	atomn_Ge.mac
atomn_H.mac	atomn_He.mac	atomn_Hf.mac	atomn_Hg.mac	atomn_Ho.mac
atomn_Hs.mac	atomn_I.mac	atomn_In.mac	atomn_Ir.mac	atomn_K.mac
atomn_Kr.mac	atomn_La.mac	atomn_Li.mac	atomn_Lr.mac	atomn_Lu.mac
atomn_Lv.mac	atomn_Mc.mac	atomn_Md.mac	atomn_Mg.mac	atomn_Mn.mac
atomn_Mo.mac	atomn_Mt.mac	atomn_N.mac	atomn_Na.mac	atomn_Nb.mac
atomn_Nd.mac	atomn_Ne.mac	atomn_Nh.mac	atomn_Ni.mac	atomn_No.mac
atomn_Np.mac	atomn_O.mac	atomn_Og.mac	atomn_Os.mac	atomn_P.mac
atomn_Pa.mac	atomn_Pb.mac	atomn_Pd.mac	atomn_Pm.mac	atomn_Po.mac
atomn_Pr.mac	atomn_Pt.mac	atomn_Pu.mac	atomn_Ra.mac	atomn_Rb.mac
atomn_Re.mac	atomn_Rf.mac	atomn_Rg.mac	atomn_Rh.mac	atomn_Rn.mac
atomn_Ru.mac	atomn_S.mac	atomn_Sb.mac	atomn_Sc.mac	atomn_Se.mac
atomn_Sg.mac	atomn_Si.mac	atomn_Sm.mac	atomn_Sn.mac	atomn_Sr.mac
atomn-Ta.mac	atomn_Tb.mac	atomn_Tc.mac	atomn_Te.mac	atomn_Th.mac
atomn_Ti.mac	atomn_Tl.mac	atomn_Tm.mac	atomn_Ts.mac	atomn_U.mac
atomn_V.mac	atomn_W.mac	atomn_Xe.mac	atomn_Y.mac	atomn_Yb.mac
atomn_Zn.mac	atomn_Zr.mac	AUTOatom.mac	AUTOion.mac	ion.mac
ion1_menu.mac	ion2_menu.mac	ion3_menu.mac	ion4_menu.mac	ion5_menu.mac
ion6_menu.mac	ionmenu.mac	ionn.mac	ionn_Acp3.mac	ionn_Ac_menu.mac
ionn_Agp1.mac	ionn_Agp2.mac	ionn_Agp3.mac	ionn_Ag_menu.mac	ionn_Alp3.mac
ionn_Al_menu.mac	ionn_Amp2.mac	ionn_Amp3.mac	ionn_Amp4.mac	ionn_Amp5.mac
ionn_Amp6.mac	ionn_Am_menu.mac	ionn_Ar_menu.mac	ionn_Asm3.mac	ionn_Asp3.mac
ionn_Asp5.mac	ionn_As_menu.mac	ionn_Atml.mac	ionn_Atp1.mac	ionn_Atp3.mac
ionn_Atp5.mac	ionn_Atp7.mac	ionn_At_menu.mac	ionn_Aup1.mac	ionn_Aup2.mac
ionn_Aup3.mac	ionn_Au_menu.mac	ionn_Bap2.mac	ionn_Ba_menu.mac	ionn_Bep2.mac
ionn_Be_menu.mac	ionn_Bhp1.mac	ionn_Bhp2.mac	ionn_Bhp3.mac	ionn_Bhp4.mac

ionnn_Bhp5.mac	ionnn_Bhp6.mac	ionnn_Bhp7.mac	ionnn_Bh_menu.mac	ionnn_Bip3.mac
ionnn_Bip5.mac	ionnn_Bi_menu.mac	ionnn_Bkp2.mac	ionnn_Bkp3.mac	ionnn_Bkp4.mac
ionnn_Bk_menu.mac	ionnn_Bp3.mac	ionnn_Brm1.mac	ionnn_Brp1.mac	ionnn_Brp3.mac
ionnn_Brp5.mac	ionnn_Brp7.mac	ionnn_Br_menu.mac	ionnn_B_menu.mac	ionnn_Cap2.mac
ionnn_Ca_menu.mac	ionnn_Cdp2.mac	ionnn_Cd_menu.mac	ionnn_Cep3.mac	ionnn_Cep4.mac
ionnn_Ce_menu.mac	ionnn_Cfp2.mac	ionnn_Cfp3.mac	ionnn_Cfp4.mac	ionnn_Cf_menu.mac
ionnn_Clm1.mac	ionnn_Clp1.mac	ionnn_Clp3.mac	ionnn_Clp4.mac	ionnn_Clp5.mac
ionnn_Clp6.mac	ionnn_Clp7.mac	ionnn_Cl_menu.mac	ionnn_Cmp2.mac	ionnn_Cmp3.mac
ionnn_Cmp4.mac	ionnn_Cm_menu.mac	ionnn_Cnp1.mac	ionnn_Cnp2.mac	ionnn_Cn_menu.mac
ionnn_Cop1.mac	ionnn_Cop2.mac	ionnn_Cop3.mac	ionnn_Cop4.mac	ionnn_Co_menu.mac
ionnn_Cp2.mac	ionnn_Cp3.mac	ionnn_Crp2.mac	ionnn_Crp3.mac	ionnn_Crp4.mac
ionnn_Crp5.mac	ionnn_Crp6.mac	ionnn_Cr_menu.mac	ionnn_Csp1.mac	ionnn_Cs_menu.mac
ionnn_Cup1.mac	ionnn_Cup2.mac	ionnn_Cup3.mac	ionnn_Cu_menu.mac	ionnn_C_menu.mac
ionnn_Dbp2.mac	ionnn_Dbp3.mac	ionnn_Dbp4.mac	ionnn_Dbp5.mac	ionnn_Db_menu.mac
ionnn_Dsp2.mac	ionnn_Dsp3.mac	ionnn_Dsp4.mac	ionnn_Dsp5.mac	ionnn_Dsp6.mac
ionnn_Ds_menu.mac	ionnn_Dyp3.mac	ionnn_Dy_menu.mac	ionnn_Erp3.mac	ionnn_Er_menu.mac
ionnn_Esp2.mac	ionnn_Esp3.mac	ionnn_Es_menu.mac	ionnn_Eup2.mac	ionnn_Eup3.mac
ionnn_Eu_menu.mac	ionnn_Fep2.mac	ionnn_Fep3.mac	ionnn_Fep4.mac	ionnn_Fep6.mac
ionnn_Fe_menu.mac	ionnn_Flp2.mac	ionnn_Flp4.mac	ionnn_Fl_menu.mac	ionnn_Fm1.mac
ionnn_Fmp2.mac	ionnn_Fmp3.mac	ionnn_Fmp4.mac	ionnn_Fm_menu.mac	ionnn_Frp1.mac
ionnn_Fr_menu.mac	ionnn_F_menu.mac	ionnn_Gap2.mac	ionnn_Gap3.mac	ionnn_Ga_menu.mac
ionnn_Gdp3.mac	ionnn_Gd_menu.mac	ionnn_Gep2.mac	ionnn_Gep4.mac	ionnn_Ge_menu.mac
ionnn_He_menu.mac	ionnn_Hfp2.mac	ionnn_Hfp3.mac	ionnn_Hfp4.mac	ionnn_Hf_menu.mac
ionnn_Hgp1.mac	ionnn_Hgp2.mac	ionnn_Hg_menu.mac	ionnn_Hm1.mac	ionnn_Hop3.mac
ionnn_Ho_menu.mac	ionnn_Hsp2.mac	ionnn_Hsp3.mac	ionnn_Hsp4.mac	ionnn_Hsp5.mac
ionnn_Hsp6.mac	ionnn_Hsp7.mac	ionnn_Hsp8.mac	ionnn_Hs_menu.mac	ionnn_H_menu.mac
ionnn_Im1.mac	ionnn_Inp2.mac	ionnn_Inp3.mac	ionnn_In_menu.mac	ionnn_Ip1.mac
ionnn_Ip3.mac	ionnn_Ip5.mac	ionnn_Ip7.mac	ionnn_Irp1.mac	ionnn_Irp2.mac
ionnn_Irp3.mac	ionnn_Irp4.mac	ionnn_Ir_menu.mac	ionnn_I_menu.mac	ionnn_Kp1.mac
ionnn_Kr_menu.mac	ionnn_K_menu.mac	ionnn_Lap3.mac	ionnn_La_menu.mac	ionnn_Lip1.mac
ionnn_Li_menu.mac	ionnn_Lrp2.mac	ionnn_Lrp3.mac	ionnn_Lr_menu.mac	ionnn_Lup3.mac
ionnn_Lu_menu.mac	ionnn_Lvm2.mac	ionnn_Lvp2.mac	ionnn_Lvp4.mac	ionnn_Lvp6.mac
ionnn_Lv_menu.mac	ionnn_Mcp3.mac	ionnn_Mcp5.mac	ionnn_Mc_menu.mac	ionnn_Mdp1.mac
ionnn_Mdp2.mac	ionnn_Mdp3.mac	ionnn_Md_menu.mac	ionnn_Mgp2.mac	ionnn_Mg_menu.mac
ionnn_Mnp2.mac	ionnn_Mnp3.mac	ionnn_Mnp4.mac	ionnn_Mnp5.mac	ionnn_Mnp6.mac
ionnn_Mnp7.mac	ionnn_Mn_menu.mac	ionnn_Mop1.mac	ionnn_Mop2.mac	ionnn_Mop3.mac
ionnn_Mop4.mac	ionnn_Mop5.mac	ionnn_Mop6.mac	ionnn_Mo_menu.mac	ionnn_Mtp1.mac
ionnn_Mtp2.mac	ionnn_Mtp3.mac	ionnn_Mtp4.mac	ionnn_Mt_menu.mac	ionnn_Nap1.mac
ionnn_Na_menu.mac	ionnn_Nbp2.mac	ionnn_Nbp3.mac	ionnn_Nbp4.mac	ionnn_Nbp5.mac
ionnn_Nb_menu.mac	ionnn_Ndp3.mac	ionnn_Nd_menu.mac	ionnn_Ne_menu.mac	ionnn_Nhp1.mac
ionnn_Nhp2.mac	ionnn_Nhp3.mac	ionnn_Nh_menu.mac	ionnn_Nip1.mac	ionnn_Nip2.mac
ionnn_Nip3.mac	ionnn_Nip4.mac	ionnn_Ni_menu.mac	ionnn_Nm3.mac	ionnn_Nop2.mac
ionnn_Nop3.mac	ionnn_No_menu.mac	ionnn_Np1.mac	ionnn_Np2.mac	ionnn_Np3.mac
ionnn_Np4.mac	ionnn_Np5.mac	ionnn_Npp2.mac	ionnn_Npp3.mac	ionnn_Npp4.mac
ionnn_Npp5.mac	ionnn_Npp6.mac	ionnn_Npp7.mac	ionnn_Np_menu.mac	ionnn_N_menu.mac
ionnn_Og_menu.mac	ionnn_Om2.mac	ionnn_Osp2.mac	ionnn_Osp3.mac	ionnn_Osp4.mac
ionnn_Osp5.mac	ionnn_Osp6.mac	ionnn_Osp7.mac	ionnn_Osp8.mac	ionnn_Os_menu.mac
ionnn_O_menu.mac	ionnn_Pap3.mac	ionnn_Pap4.mac	ionnn_Pap5.mac	ionnn_Pa_menu.mac
ionnn_Pbp2.mac	ionnn_Pbp4.mac	ionnn_Pb_menu.mac	ionnn_Pdp2.mac	ionnn_Pdp3.mac
ionnn_Pdp4.mac	ionnn_Pd_menu.mac	ionnn_Pm3.mac	ionnn_Pmp3.mac	ionnn_Pm_menu.mac
ionnn_Pom2.mac	ionnn_Pop2.mac	ionnn_Pop4.mac	ionnn_Pop6.mac	ionnn_Po_menu.mac
ionnn_Pp3.mac	ionnn_Pp5.mac	ionnn_Prp3.mac	ionnn_Prp4.mac	ionnn_Pr_menu.mac
ionnn_Ptp2.mac	ionnn_Ptp3.mac	ionnn_Ptp4.mac	ionnn_Ptp5.mac	ionnn_Ptp6.mac
ionnn_Pt_menu.mac	ionnn_Pup2.mac	ionnn_Pup3.mac	ionnn_Pup4.mac	ionnn_Pup5.mac
ionnn_Pup6.mac	ionnn_Pup7.mac	ionnn_Pu_menu.mac	ionnn_P_menu.mac	ionnn_Rap2.mac
ionnn_Ra_menu.mac	ionnn_Rbp1.mac	ionnn_Rb_menu.mac	ionnn_Rep1.mac	ionnn_Rep2.mac
ionnn_Rep3.mac	ionnn_Rep4.mac	ionnn_Rep5.mac	ionnn_Rep6.mac	ionnn_Rep7.mac
ionnn_Re_menu.mac	ionnn_Rfp2.mac	ionnn_Rfp3.mac	ionnn_Rfp4.mac	ionnn_Rf_menu.mac
ionnn_Rgp1.mac	ionnn_Rgp2.mac	ionnn_Rgp3.mac	ionnn_Rg_menu.mac	ionnn_Rhp1.mac
ionnn_Rhp2.mac	ionnn_Rhp3.mac	ionnn_Rhp4.mac	ionnn_Rhp6.mac	ionnn_Rh_menu.mac
ionnn_Rn_menu.mac	ionnn_Rup2.mac	ionnn_Rup3.mac	ionnn_Rup4.mac	ionnn_Rup5.mac
ionnn_Rup6.mac	ionnn_Rup7.mac	ionnn_Rup8.mac	ionnn_Ru_menu.mac	ionnn_Sbm3.mac
ionnn_Sbp3.mac	ionnn_Sbp5.mac	ionnn_Sb_menu.mac	ionnn_Scp3.mac	ionnn_Sc_menu.mac
ionnn_Sem2.mac	ionnn_Sep4.mac	ionnn_Sep6.mac	ionnn_Se_menu.mac	ionnn_Sgp1.mac
ionnn_Sgp2.mac	ionnn_Sgp3.mac	ionnn_Sgp4.mac	ionnn_Sgp5.mac	ionnn_Sgp6.mac
ionnn_Sg_menu.mac	ionnn_Sip4.mac	ionnn_Si_menu.mac	ionnn_Sm2.mac	ionnn_Smp2.mac
ionnn_Smp3.mac	ionnn_Sm_menu.mac	ionnn_Snp2.mac	ionnn_Snp4.mac	ionnn_Sn_menu.mac
ionnn_Sp4.mac	ionnn_Sp6.mac	ionnn_Srp2.mac	ionnn_Sr_menu.mac	ionnn_S_menu.mac
ionnn_Tap2.mac	ionnn_Tap3.mac	ionnn_Tap4.mac	ionnn_Tap5.mac	ionnn-Ta_menu.mac

ionn_Tbp3.mac	ionn_Tbp4.mac	ionn_Tb_menu.mac	ionn_Tcp2.mac	ionn_Tcp3.mac
ionn_Tcp4.mac	ionn_Tcp5.mac	ionn_Tcp6.mac	ionn_Tcp7.mac	ionn_Tc_menu.mac
ionn_Tem2.mac	ionn_Tep4.mac	ionn_Tep6.mac	ionn_Te_menu.mac	ionn_Thp2.mac
ionn_Thp3.mac	ionn_Thp4.mac	ionn_Th_menu.mac	ionn_Tip2.mac	ionn_Tip3.mac
ionn_Tip4.mac	ionn_Ti_menu.mac	ionn_Tlp1.mac	ionn_Tlp3.mac	ionn_Tl_menu.mac
ionn_Tmp3.mac	ionn_Tm_menu.mac	ionn_Tsml1.mac	ionn_Tsp1.mac	ionn_Tsp3.mac
ionn_Tsp5.mac	ionn_Tsp7.mac	ionn_Ts_menu.mac	ionn_Up2.mac	ionn_Up3.mac
ionn_Up4.mac	ionn_Up5.mac	ionn_Up6.mac	ionn_U_menu.mac	ionn_Vp2.mac
ionn_Vp3.mac	ionn_Vp4.mac	ionn_Vp5.mac	ionn_V_menu.mac	ionn_Wp1.mac
ionn_Wp2.mac	ionn_Wp3.mac	ionn_Wp4.mac	ionn_Wp5.mac	ionn_Wp6.mac
ionn_W_menu.mac	ionn_Xep2.mac	ionn_Xep4.mac	ionn_Xep6.mac	ionn_Xep8.mac
ionn_Xe_menu.mac	ionn_Ybp2.mac	ionn_Ybp3.mac	ionn_Yb_menu.mac	ionn_Yp3.mac
ionn_Y_menu.mac	ionn_Znp2.mac	ionn_Zn_menu.mac	ionn_Zrp2.mac	ionn_Zrp3.mac
ionn_Zrp4.mac	ionn_Zr_menu.mac			

### 3-6. データファイル (C:\¥dvxa¥data¥\*)

1.b05	10.b05	100.b05	101.b05	102.b05
103.b05	104.b05	105.b05	106.b05	107.b05
108.b05	109.b05	11.b05	110.b05	111.b05
112.b05	113.b05	114.b05	115.b05	116.b05
117.b05	118.b05	12.b05	13.b05	14.b05
15.b05	16.b05	17.b05	18.b05	19.b05
2.b05	20.b05	21.b05	22.b05	23.b05
24.b05	25.b05	26.b05	27.b05	28.b05
29.b05	3.b05	30.b05	31.b05	32.b05
33.b05	34.b05	35.b05	36.b05	37.b05
38.b05	39.b05	4.b05	40.b05	41.b05
42.b05	43.b05	44.b05	45.b05	46.b05
47.b05	48.b05	49.b05	5.b05	50.b05
51.b05	52.b0	53.b05	54.b05	55.b05
56.b05	57.b05	58.b05	59.b05	6.b05
60.b05	61.b05	62.b05	63.b05	64.b05
65.b05	66.b05	67.b05	68.b05	69.b05
7.b05	70.b05	71.b05	72.b05	73.b05
74.b05	75.b05	76.b05	77.b05	78.b05
79.b05	8.b05	80.b05	81.b05	82.b05
83.b05	84.b05	85.b05	86.b05	87.b05
88.b05	89.b05	9.b05	90.b05	91.b05
92.b05	93.b05	94.b05	95.b05	96.b05
97.b05	98.b05	99.b05	atomf	atom_Ac.txt
atom_Ag.txt	atom_Al.txt	atom_Am.txt	atom_Ar.txt	atom_As.txt
atom_At.txt	atom_Au.txt	atom_B.t.txt	atom_Ba.txt	atom_Be.txt
atom_Bh.txt	atom_Bi.txt	atom_Bk.txt	atom_Br.txt	atom_C.txt
atom_Ca.txt	atom_Cd.txt	atom_Ce.txt	atom_Cf.txt	atom_Cl.txt
atom_Cm.txt	atom_Cn.txt	atom_Co.txt	atom_Cr.txt	atom_Cs.txt
atom_Cu.txt	atom_Db.txt	atom_Ds.txt	atom_Dy.txt	atom_Er.txt
atom_Es.txt	atom_Eu.txt	atom_F.txt	atom_Fe.txt	atom_Fl.txt
atom_Fm.txt	atom_Fr.txt	atom_Ga.txt	atom_Gd.txt	atom_Ge.txt
atom_H.txt	atom_He.txt	atom_Hf.txt	atom_Hg.txt	atom_Ho.txt
atom_Hs.txt	atom_I.txt	atom_In.txt	atom_Ir.txt	atom_K.txt
atom_Kr.txt	atom_La.txt	atom_Li.txt	atom_Lr.txt	atom_Lu.txt
atom_Lv.txt	atom_Mc.txt	atom_Md.txt	atom_Mg.txt	atom_Mn.txt
atom_Mo.txt	atom_Mt.txt	atom_N.txt	atom_Na.txt	atom_Nb.txt
atom_Nd.txt	atom_Ne.txt	atom_Nh.txt	atom_Ni.txt	atom_No.txt
atom_Np.txt	atom_O.txt	atom_Og.txt	atom_Os.txt	atom_P.txt
atom_Pa.txt	atom_Pb.txt	atom_Pd.txt	atom_Pm.txt	atom_Po.txt
atom_Pr.txt	atom_Pt.txt	atom_Pu.txt	atom_Ra.txt	atom_Rb.txt
atom_Re.txt	atom_Rf.txt	atom_Rg.txt	atom_Rh.txt	atom_Rn.txt
atom_Ru.txt	atom_S.txt	atom_Sb.txt	atom_Sc.txt	atom_Se.txt
atom_Sg.txt	atom_Si.txt	atom_Sm.txt	atom_Sn.txt	atom_Sr.txt
atom-Ta.txt	atom_Tb.txt	atom_Tc.txt	atom_Te.txt	atom_Th.txt
atom_Ti.txt	atom_Tl.txt	atom_Tm.txt	atom_Ts.txt	atom_U.txt
atom_V.txt	atom_W.txt	atom_Xe.txt	atom_Y.txt	atom_Yb.txt
atom_Zn.txt	atom_Zr.txt	ion_Acp3.txt	ion_Agp1.txt	ion_Agp2.txt
ion_Agp3.txt	ion_Alp3.txt	ion_Amp2.txt	ion_Amp3.txt	ion_Amp4.txt
ion_Amp5.txt	ion_Amp6.txt	ion_Asm3.txt	ion_Asp3.txt	ion_Asp5.txt
ion_Atml.txt	ion_Atp1.txt	ion_Atp3.txt	ion_Atp5.txt	ion_Atp7.txt
ion_Aup1.txt	ion_Aup2.txt	ion_Aup3.txt	ion_Bap2.txt	ion_Bep2.txt

ion_Bhp1.txt	ion_Bhp2.txt	ion_Bhp3.txt	ion_Bhp4.txt	ion_Bhp5.txt
ion_Bhp6.txt	ion_Bhp7.txt	ion_Bip3.txt	ion_Bip5.txt	ion_Bkp2.txt
ion_Bkp3.txt	ion_Bkp4.txt	ion_Bp3.txt	ion_Brm1.txt	ion_Brp1.txt
ion_Brp3.txt	ion_Brp5.txt	ion_Brp7.txt	ion_Cap2.txt	ion_Cdp2.txt
ion_Cep3.txt	ion_Cep4.txt	ion_Cfp2.txt	ion_Cfp3.txt	ion_Cfp4.txt
ion_Clm1.txt	ion_Clp1.txt	ion_Clp3.txt	ion_Clp4.txt	ion_Clp5.txt
ion_Clp6.txt	ion_Clp7.txt	ion_Cmp2.txt	ion_Cmp3.txt	ion_Cmp4.txt
ion_Cnp1.txt	ion_Cnp2.txt	ion_Cop1.txt	ion_Cop2.txt	ion_Cop3.txt
ion_Cop4.txt	ion_Cp2.txt	ion_Cp4.txt	ion_Crp2.txt	ion_Crp3.txt
ion_Crp4.txt	ion_Crp5.txt	ion_Crp6.txt	ion_Csp1.txt	ion_Cup1.txt
ion_Cup2.txt	ion_Cup3.txt	ion_Dbp2.txt	ion_Dbp3.txt	ion_Dbp4.txt
ion_Dbp5.txt	ion_Dsp2.txt	ion_Dsp3.txt	ion_Dsp4.txt	ion_Dsp5.txt
ion_Dsp6.txt	ion_Dyp3.txt	ion_Erp3.txt	ion_Esp2.txt	ion_Esp3.txt
ion_Eup2.txt	ion_Eup3.txt	ion_Fep2.txt	ion_Fep3.txt	ion_Fep4.txt
ion_Fep6.txt	ion_Flp2.txt	ion_Flp4.txt	ion_Fml.txt	ion_Fmp2.txt
ion_Fmp3.txt	ion_Fmp4.txt	ion_Frp1.txt	ion_Gap2.txt	ion_Gap3.txt
ion_Gdp3.txt	ion_Gep2.txt	ion_Gep4.txt	ion_Hfp2.txt	ion_Hfp3.txt
ion_Hfp4.txt	ion_Hgp1.txt	ion_Hgp2.txt	ion_Hml.txt	ion_Hop3.txt
ion_Hsp2.txt	ion_Hsp3.txt	ion_Hsp4.txt	ion_Hsp5.txt	ion_Hsp6.txt
ion_Hsp7.txt	ion_Hsp8.txt	ion_Im1.txt	ion_Inp2.txt	ion_Inp3.txt
ion_Ip1.txt	ion_Ip3.txt	ion_Ip5.txt	ion_Ip7.txt	ion_Irp1.txt
ion_Irp2.txt	ion_Irp3.txt	ion_Irp4.txt	ion_Kp1.txt	ion_Lap3.txt
ion_Lip1.txt	ion_Lrp2.txt	ion_Lrp3.txt	ion_Lup3.txt	ion_Lvm2.txt
ion_Lvp2.txt	ion_Lvp4.txt	ion_Lvp6.txt	ion_Mcp3.txt	ion_Mcp5.txt
ion_Mdp1.txt	ion_Mdp2.txt	ion_Mdp3.txt	ion_Mgp2.txt	ion_Mnp2.txt
ion_Mnp3.txt	ion_Mnp4.txt	ion_Mnp5.txt	ion_Mnp6.txt	ion_Mnp7.txt
ion_Mop1.txt	ion_Mop2.txt	ion_Mop3.txt	ion_Mop4.txt	ion_Mop5.txt
ion_Mop6.txt	ion_Mtp1.txt	ion_Mtp2.txt	ion_Mtp3.txt	ion_Mtp4.txt
ion_Nap1.txt	ion_Nbp2.txt	ion_Nbp3.txt	ion_Nbp4.txt	ion_Nbp5.txt
ion_Ndp3.txt	ion_Nhp1.txt	ion_Nhp2.txt	ion_Nhp3.txt	ion_Nip1.txt
ion_Nip2.txt	ion_Nip3.txt	ion_Nip4.txt	ion_Nm3.txt	ion_Nop2.txt
ion_Nop3.txt	ion_Np1.txt	ion_Np2.txt	ion_Np3.txt	ion_Np4.txt
ion_Np5.txt	ion_Npp2.txt	ion_Npp3.txt	ion_Npp4.txt	ion_Npp5.txt
ion_Npp6.txt	ion_Npp7.txt	ion_Omp2.txt	ion_Osp2.txt	ion_Osp3.txt
ion_Osp4.txt	ion_Osp5.txt	ion_Osp6.txt	ion_Osp7.txt	ion_Osp8.txt
ion_Pap3.txt	ion_Pap4.txt	ion_Pap5.txt	ion_Pbp2.txt	ion_Pbp4.txt
ion_Pdp2.txt	ion_Pdp3.txt	ion_Pdp4.txt	ion_Pm3.txt	ion_Pmp3.txt
ion_Pom2.txt	ion_Pop2.txt	ion_Pop4.txt	ion_Pop6.txt	ion_Pp3.txt
ion_Pp5.txt	ion_Prp3.txt	ion_Prp4.txt	ion_Ptp2.txt	ion_Ptp3.txt
ion_Ptp4.txt	ion_Ptp5.txt	ion_Ptp6.txt	ion_Pup2.txt	ion_Pup3.txt
ion_Pup4.txt	ion_Pup5.txt	ion_Pup6.txt	ion_Pup7.txt	ion_Rap2.txt
ion_Rbp1.txt	ion_Rep1.txt	ion_Rep2.txt	ion_Rep3.txt	ion_Rep4.txt
ion_Rep5.txt	ion_Rep6.txt	ion_Rep7.txt	ion_Rfp2.txt	ion_Rfp3.txt
ion_Rfp4.txt	ion_Rgp1.txt	ion_Rgp2.txt	ion_Rgp3.txt	ion_Rhp1.txt
ion_Rhp2.txt	ion_Rhp3.txt	ion_Rhp4.txt	ion_Rhp6.txt	ion_Rup2.txt
ion_Rup3.txt	ion_Rup4.txt	ion_Rup5.txt	ion_Rup6.txt	ion_Rup7.txt
ion_Rup8.txt	ion_Sbm3.txt	ion_Sbp3.txt	ion_Sbp5.txt	ion_Scp3.txt
ion_Sem2.txt	ion_Sep4.txt	ion_Sep6.txt	ion_Sgp1.txt	ion_Sgp2.txt
ion_Sgp3.txt	ion_Sgp4.txt	ion_Sgp5.txt	ion_Sgp6.txt	ion_Sip4.txt
ion_Sm2.txt	ion_Smp2.txt	ion_Smp3.txt	ion_Snp2.txt	ion_Snp4.txt
ion_Sp4.txt	ion_Sp6.txt	ion_Srp2.txt	ion_Tap2.txt	ion_Tap3.txt
ion_Tap4.txt	ion_Tap5.txt	ion_Tbp3.txt	ion_Tbp4.txt	ion_Tcp2.txt
ion_Tcp3.txt	ion_Tcp4.txt	ion_Tcp5.txt	ion_Tcp6.txt	ion_Tcp7.txt
ion_Tem2.txt	ion_Tep4.txt	ion_Tep6.txt	ion_Thp2.txt	ion_Thp3.txt
ion_Thp4.txt	ion_Tip2.txt	ion_Tip3.txt	ion_Tip4.txt	ion_Tlp1.txt
ion_Tlp3.txt	ion_Tmp3.txt	ion_Tsm1.txt	ion_Tsp1.txt	ion_Tsp3.txt
ion_Tsp5.txt	ion_Tsp7.txt	ion_Up2.txt	ion_Up3.txt	ion_Up4.txt
ion_Up5.txt	ion_Up6.txt	ion_Vp2.txt	ion_Vp3.txt	ion_Vp4.txt
ion_Vp5.txt	ion_Wp1.txt	ion_Wp2.txt	ion_Wp3.txt	ion_Wp4.txt
ion_Wp5.txt	ion_Wp6.txt	ion_Xep2.txt	ion_Xep4.txt	ion_Xep6.txt
ion_Xep8.txt	ion_Ybp2.txt	ion_Ybp3.txt	ion_Yp3.txt	ion_Znp2.txt
ion_Zrp2.txt	ion_Zrp3.txt	ion_Zrp4.txt	nonrel	

#### 4. データ自動入力機能「Auto-eduDV」のメニュー

eduDV のデータ自動入力機能「Auto-eduDV」における孤立原子計算プログラム atomn および孤立イオン計算プログラム ionn のメニューは以下のように改訂した。

##### 4-1. 孤立原子計算プログラム atomn

秀丸エディタ (DV- $X\alpha$ 法計算支援環境) の[eduDV...]ボタンより, [00. Automatic 【データ自動入力】...] – [Auto 21. 対称なし 【単原子】 原子軌道関数を見るときなどに便利です...] で, 図 1 に示すプルダウンメニューが現れる。

atom 原子番号 1～20 (ノンスピン版・全自動実行)...

atom 原子番号 21～40 (ノンスピン版・全自動実行)...

atom 原子番号 41～60 (ノンスピン版・全自動実行)...

atom 原子番号 61～80 (ノンスピン版・全自動実行)...

atom 原子番号 81～100 (ノンスピン版・全自動実行)...

atom 原子番号 101～118 (ノンスピン版・全自動実行)...

図 1. Auto-eduDV の atomn メニュー

次に 6 つの原子番号範囲 (1～20, 21～40, 41～60, 61～80, 81～100, 101～118) のいずれかを選択すると, それぞれ以下に示すプルダウンメニューが現れるので (図 2～7), 計算したい元素を選択すれば, 全自動で孤立原子計算プログラム atomn が起動する。

1 H Hydrogen 水素 1s1  
 2 He Helium ヘリウム 1s2  
 3 Li Lithium リチウム [He] 2s1  
 4 Be Beryllium ベリリウム [He] 2s2  
 5 B Boron ホウ素 [He] 2s2 2p1  
 6 C Carbon 炭素 [He] 2s2 2p2  
 7 N Nitrogen 窒素 [He] 2s2 2p3  
 8 O Oxygen 酸素 [He] 2s2 2p4  
 9 F Fluorine フッ素 [He] 2s2 2p5  
 10 Ne Neon ネオン [He] 2s2 2p6  
 11 Na Sodium ナトリウム [Ne] 3s1  
 12 Mg Magnesium マグネシウム [Ne] 3s2  
 13 Al Aluminium アルミニウム [Ne] 3s2 3p1  
 14 Si Silicon ケイ素 [Ne] 3s2 3p2  
 15 P Phosphorus リン [Ne] 3s2 3p3  
 16 S Sulfur 硫黄 [Ne] 3s2 3p4  
 17 Cl Chlorine 塩素 [Ne] 3s2 3p5  
 18 Ar Argon アルゴン [Ne] 3s2 3p6  
 19 K Potassium カリウム [Ar] 4s1  
 20 Ca Calcium カルシウム [Ar] 4s2

図 2. 原子番号 1～20

21 Sc Scandium スカンジウム [Ar] 3d1 4s2  
 22 Ti Titanium チタン [Ar] 3d2 4s2  
 23 V Vanadium バナジウム [Ar] 3d3 4s2  
 24 Cr Chromium クロム [Ar] 3d5 4s1  
 25 Mn Manganese マンガン [Ar] 3d5 4s2  
 26 Fe Iron 鉄 [Ar] 3d6 4s2  
 27 Co Cobalt コバルト [Ar] 3d7 4s2  
 28 Ni Nickel ニッケル [Ar] 3d8 4s2  
 29 Cu Copper 銅 [Ar] 3d10 4s1  
 30 Zn Zinc 亜鉛 [Ar] 3d10 4s2  
 31 Ga Gallium ガリウム [Ar] 3d10 4s2 4p1  
 32 Ge Germanium ゲルマニウム [Ar] 3d10 4s2 4p2  
 33 As Arsenic ヒ素 [Ar] 3d10 4s2 4p3  
 34 Se Selenium セレン [Ar] 3d10 4s2 4p4  
 35 Br Bromine 臭素 [Ar] 3d10 4s2 4p5  
 36 Kr Krypton クリプトン [Ar] 3d10 4s2 4p6  
 37 Rb Rubidium ルビジウム [Kr] 5s1  
 38 Sr Strontium ストロンチウム [Kr] 5s2  
 39 Y Yttrium イットリウム [Kr] 4d1 5s2  
 40 Zr Zirconium ジルコニウム [Kr] 4d2 5s2

図 3. 原子番号 21～40



41 Nb Niobium ニオブ [Kr] 4d4 5s1  
 42 Mo Molybdenum モリブデン [Kr] 4d5 5s1  
 43 Tc Technetium テクネチウム [Kr] 4d5 5s2  
 44 Ru Ruthenium ルテニウム [Kr] 4d7 5s1  
 45 Rh Rhodium ロジウム [Kr] 4d8 5s1  
 46 Pd Palladium パラジウム [Kr] 4d10  
 47 Ag Silver 銀 [Kr] 4d10 5s1  
 48 Cd Cadmium カドミウム [Kr] 4d10 5s2  
 49 In Indium インジウム [Kr] 4d10 5s2 5p1  
 50 Sn Tin スズ [Kr] 4d10 5s2 5p2  
 51 Sb Antimony アンチモン [Kr] 4d10 5s2 5p3  
 52 Te Tellurium テルル [Kr] 4d10 5s2 5p4  
 53 I Iodine ヨウ素 [Kr] 4d10 5s2 5p5  
 54 Xe Xenon キセノン [Kr] 4d10 5s2 5p6  
 55 Cs Caesium セシウム [Xe] 6s1  
 56 Ba Barium バリウム [Xe] 6s2  
 57 La Lanthanum ランタン [Xe] 5d1 6s2  
 58 Ce Cerium セリウム [Xe] 4f1 5d1 6s2  
 59 Pr Praseodymium プラセオジウム [Xe] 4f3 6s2  
 60 Nd Neodymium ネオジウム [Xe] 4f4 6s2

図 4. 原子番号 41～60

61 Pm Promethium プロメチウム [Xe] 4f5 6s2  
 62 Sm Samarium サマリウム [Xe] 4f6 6s2  
 63 Eu Europium ユロピウム [Xe] 4f7 6s2  
 64 Gd Gadolinium ガドリニウム [Xe] 4f7 5d1 6s2  
 65 Tb Terbium テルビウム [Xe] 4f9 6s2  
 66 Dy Dysprosium ジスプロシウム [Xe] 4f10 6s2  
 67 Ho Holmium ホルミウム [Xe] 4f11 6s2  
 68 Er Erbium エルビウム [Xe] 4f12 6s2  
 69 Tm Thulium ツリウム [Xe] 4f13 6s2  
 70 Yb Ytterbium イッテルビウム [Xe] 4f14 6s2  
 71 Lu Lutetium ルテチウム [Xe] 4f14 5d1 6s2  
 72 Hf Hafnium ハフニウム [Xe] 4f14 5d2 6s2  
 73 Ta Tantalum タンタル [Xe] 4f14 5d3 6s2  
 74 W Tungsten タングステン [Xe] 4f14 5d4 6s2  
 75 Re Rhenium レニウム [Xe] 4f14 5d5 6s2  
 76 Os Osmium オスミウム [Xe] 4f14 5d6 6s2  
 77 Ir Iridium イリジウム [Xe] 4f14 5d7 6s2  
 78 Pt Platinum 白金 [Xe] 4f14 5d9 6s1  
 79 Au Gold 金 [Xe] 4f14 5d10 6s1  
 80 Hg Mercury 水銀 [Xe] 4f14 5d10 6s2

図 5. 原子番号 61～80

81 Tl Thallium タリウム [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p1  
 82 Pb Lead 鉛 [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p2  
 83 Bi Bismuth ビスマス [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p3  
 84 Po Polonium ポロニウム [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p4  
 85 At Astatine アスタチン [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p5  
 86 Rn Radon ラドン [Xe] 4f14 5d10 6s2 6p6  
 87 Fr Francium フランシウム [Rn] 7s1  
 88 Ra Radium ラジウム [Rn] 7s2  
 89 Ac Actinium アクチニウム [Rn] 6d1 7s2  
 90 Th Thorium トリウム [Rn] 6d2 7s2  
 91 Pa Protactinium プロタクトニウム [Rn] 5f2 6d1 7s2  
 92 U Uranium ウラン [Rn] 5f3 6d1 7s2  
 93 Np Neptunium ネプツニウム [Rn] 5f4 6d1 7s2  
 94 Pu Plutonium プルトニウム [Rn] 5f6 7s2  
 95 Am Americium アメリシウム [Rn] 5f7 7s2  
 96 Cm Curium キュリウム [Rn] 5f7 6d1 7s2  
 97 Bk Berkelium バークリウム [Rn] 5f9 7s2  
 98 Cf Californium カリホルニウム [Rn] 5f10 7s2  
 99 Es Einsteinium アインスタイニウム [Rn] 5f11 7s2  
 100 Fm Fermium フェルミウム [Rn] 5f12 7s2

図 6. 原子番号 81～100

101 Md Mendelevium メンデレヴィウム [Rn] 5f13 7s2  
 102 No Nobelium ノーベリウム [Rn] 5f14 7s2  
 103 Lr Lawrencium ローレンシウム [Rn] 5f14 7s2 7p1  
 104 Rf Rutherfordium ラザホーヅウム [Rn] 5f14 6d2 7s2  
 105 Db Dubnium ドブニウム [Rn] 5f14 6d3 7s2  
 106 Sg Seaborgium シーボーギウム [Rn] 5f14 6d4 7s2  
 107 Bh Bohrium ボーリウム [Rn] 5f14 6d5 7s2  
 108 Hs Hassium ハッシウム [Rn] 5f14 6d6 7s2  
 109 Mt Meitnerium マイトネリウム [Rn] 5f14 6d7 7s2  
 110 Ds Darmstadtium ダームスタチウム [Rn] 5f14 6d9 7s1  
 111 Rg Roentgenium レントゲニウム [Rn] 5f14 6d10 7s1  
 112 Cn Copernicium コペルニシウム [Rn] 5f14 6d10 7s2  
 113 Nh Nihonium ニホニウム [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p1  
 114 Fl Flerovium フレロビウム [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p2  
 115 Mc Moscovium モスコビウム [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p3  
 116 Lv Livermorium リバモリウム [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p4  
 117 Ts Tennessine テネシン [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p5  
 118 Og Oganesson オガネソン [Rn] 5f14 6d10 7s2 7p6

図 7. 原子番号 101～118

#### 4-2. 孤立イオン計算プログラム ionn

秀丸エディタ (DV- $X\alpha$ 法計算支援環境) の[eduDV...]ボタンより, [00. Automatic 【データ自動入力】...] - [Auto 22. 対称なし 【単原子イオン】 原子軌道関数を見るときなどに便利です...] で, 図 8 に示すプルダウンメニューが現れる.

ion 原子番号 01～20 (ノンスピン版・全自動実行)...

ion 原子番号 21～40 (ノンスピン版・全自動実行)...

ion 原子番号 41～60 (ノンスピン版・全自動実行)...

ion 原子番号 61～80 (ノンスピン版・全自動実行)...

ion 原子番号 81～100 (ノンスピン版・全自動実行)...

ion 原子番号 101～118 (ノンスピン版・全自動実行)...

図 8. Auto-eduDV の ionn メニュー

次に 6 つの原子番号範囲 (1～20, 21～40, 41～60, 61～80, 81～100, 101～118) のいずれかを選択すると、それぞれ以下に示すプルダウンメニューが現れるので (図 9～14)、計算したい元素を選択する。

1 H Hydrogen 水素...

2 He Helium ヘリウム...

3 Li Lithium リチウム...

4 Be Beryllium ベリリウム...

5 B Boron ホウ素...

6 C Carbon 炭素...

7 N Nitrogen 窒素...

8 O Oxygen 酸素...

9 F Fluorine フッ素...

10 Ne Neon ネオン...

11 Na Sodium ナトリウム...

12 Mg Magnesium マグネシウム...

13 Al Aluminium アルミニウム...

14 Si Silicon ケイ素...

15 P Phosphorus リン...

16 S Sulfur 硫黄...

17 Cl Chlorine 塩素...

18 Ar Argon アルゴン...

19 K Potassium カリウム...

20 Ca Calcium カルシウム...

図 9. 原子番号 1～20

21 Sc Scandium スカンジウム...

22 Ti Titanium チタン...

23 V Vanadium バナジウム...

24 Cr Chromium クロム...

25 Mn Manganese マンガン...

26 Fe Iron 鉄...

27 Co Cobalt コバルト...

28 Ni Nickel ニッケル...

29 Cu Copper 銅...

30 Zn Zinc 亜鉛...

31 Ga Gallium ガリウム...

32 Ge Germanium ゲルマニウム...

33 As Arsenic ヒ素...

34 Se Selenium セレン...

35 Br Bromine 臭素...

36 Kr Krypton クリプトン...

37 Rb Rubidium ルビジウム...

38 Sr Strontium ストロンチウム...

39 Y Yttrium イットリウム...

40 Zr Zirconium ジルコニウム...

図 10. 原子番号 21～40

41 Nb Niobium ニオブ...

42 Mo Molybdenum モリブデン...

43 Tc Technetium テクネチウム...

44 Ru Ruthenium ルテニウム...

45 Rh Rhodium ロジウム...

46 Pd Palladium パラジウム...

47 Ag Silver 銀...

48 Cd Cadmium カドミウム...

49 In Indium インジウム...

50 Sn Tin スズ...

51 Sb Antimony アンチモン...

52 Te Tellurium テルル...

53 I Iodine ヨウ素...

54 Xe Xenon キセノン...

55 Cs Caesium セシウム...

56 Ba Barium バリウム...

57 La Lanthanum ランタン...

58 Ce Cerium セリウム...

59 Pr Praseodymium プラセオジム...

60 Nd Neodymium ネオジム...

図 11. 原子番号 41～60

61 Pm Promethium プロメチウム...

62 Sm Samarium サマリウム...

63 Eu Europium ユロピウム...

64 Gd Gadolinium ガドリニウム...

65 Tb Terbium テルビウム...

66 Dy Dysprosium ジスプロシウム...

67 Ho Holmium ホルミウム...

68 Er Erbium エルビウム...

69 Tm Thulium ツリウム...

70 Yb Ytterbium イッテルビウム...

71 Lu Lutetium ルテチウム...

72 Hf Hafnium ハフニウム...

73 Ta Tantalum タンタル...

74 W Tungsten タングステン...

75 Re Rhenium レニウム...

76 Os Osmium オスミウム...

77 Ir Iridium イリジウム...

78 Pt Platinum 白金...

79 Au Gold 金...

80 Hg Mercury 水銀...

図 12. 原子番号 61～80



81 Tl Thallium タリウム...  
 82 Pb Lead 鉛...  
 83 Bi Bismuth ビスマス...  
 84 Po Polonium ポロニウム...  
 85 At Astatine アスタチン...  
 86 Rn Radon ラドン...  
 87 Fr Francium フランシウム...  
 88 Ra Radium ラジウム...  
 89 Ac Actinium アクチニウム...  
 90 Th Thorium トリウム...  
 91 Pa Protactinium プロトアクチニウム...  
 92 U Uranium ウラン...  
 93 Np Neptunium ネプツニウム...  
 94 Pu Plutonium プルトニウム...  
 95 Am Americium アメリシウム...  
 96 Cm Curium キュリウム...  
 97 Bk Berkelium バークリウム...  
 98 Cf Californium カリホルニウム...  
 99 Es Einsteinium アインスタイニウム...  
 100 Fm Fermium フェルミウム...

101 Md Mendelevium メンデレヴィウム...  
 102 No Novellium ノーベリウム...  
 103 Lr Lawrencium ローレンシウム...  
 104 Rf Rutherfordium ラザホーヅウム...  
 105 Db Dubnium ドブニウム...  
 106 Sg Seaborgium シーボーギウム...  
 107 Bh Bohrium ボーリウム...  
 108 Hs Hassium ハッシウム...  
 109 Mt Meitnerium マイトネリウム...  
 110 Ds Darmstadtium ダームスタチウム...  
 111 Rg Roentgenium レントゲニウム...  
 112 Cn Copernicium コペルニシウム...  
 113 Nh Nihonium ニホニウム...  
 114 Fl Flerovium フレロビウム...  
 115 Mc Moscovium モスコビウム...  
 116 Lv Livermorium リバモリウム...  
 117 Ts Tennessine テネシン...  
 118 Og Oganesson オガネソン...

図 1 3. 原子番号 81~100

図 1 4. 原子番号 101~118

すると、それぞれの元素で取り得る酸化数（表 2）が表示されるので、計算したい酸化数を選択すれば、全自動で孤立イオン計算プログラム ionn が起動する。図 1 5 にはアメリシウム( ${}^{95}\text{Am}$ )の例を示した。

表 2. Auto-eduDV の ionn で計算可能な酸化数

原子番号	元素記号	酸化数	原子番号	元素記号	酸化数	原子番号	元素記号	酸化数
1	H	-I, I	21	Sc	III	41	Nb	II, III, IV, V
2	He		22	Ti	II, III, IV	42	Mo	I, II, III, IV, V, VI
3	Li	I	23	V	II, III, IV, V	43	Tc	II, III, IV, V, VI, VII
4	Be	II	24	Cr	II, III, IV, V, VI	44	Ru	II, III, IV, V, VI, VII, VIII
5	B	III	25	Mn	II, III, IV, V, VI, VII	45	Rh	I, II, III, IV, V
6	C	II, IV	26	Fe	II, III, IV, VI	46	Pd	II, III, IV
7	N	-III, I, II, III, IV, V	27	Co	I, II, III, IV	47	Ag	I, II, III
8	O	-II	28	Ni	I, II, III, IV	48	Cd	II
9	F	-I	29	Cu	I, II, III	49	In	II, III
10	Ne		30	Zn	II	50	Sn	II, IV
11	Na	I	31	Ga	II, III	51	Sb	-III, III, V
12	Mg	II	32	Ge	II, IV	52	Te	-II, IV, VI
13	Al	III	33	As	-III, III, V	53	I	-I, I, III, V, VII
14	Si	IV	34	Se	-II, IV, VI	54	Xe	II, IV, VI, VIII
15	P	-III, III, V	35	Br	-I, I, III, V, VII	55	Cs	I
16	S	-II, IV, VI	36	Kr		56	Ba	II
17	Cl	-I, I, III, IV, V, VI, VII	37	Rb	I	57	La	III
18	Ar		38	Sr	II	58	Ce	III, IV
19	K	I	39	Y	III	59	Pr	III, IV
20	Ca	II	40	Zr	II, III, IV	60	Nd	III

表 2. Auto-eduDV の ionn で計算可能な酸化数 (続き)

原子番号	元素記号	酸化数	原子番号	元素記号	酸化数	原子番号	元素記号	酸化数
61	Pm	III	81	Tl	I, III	101	Md	I, II, III
62	Sm	II, III	82	Pb	II, IV	102	No	II, III
63	Eu	II, III	83	Bi	III, V	103	Lr	II, III
64	Gd	III	84	Po	-II, II, IV, VI	104	Rf	II, III, IV
65	Tb	III, IV	85	At	-I, I, III, V, VII	105	Db	II, III, IV, V
66	Dy	III	86	Rn		106	Sg	I, II, III, IV, V, VI
67	Ho	III	87	Fr	I	107	Bh	I, II, III, IV, V, VI, VII
68	Er	III	88	Ra	II	108	Hs	II, III, IV, V, VI, VII, VIII
69	Tm	III	89	Ac	III	109	Mt	I, II, III, IV
70	Yb	II, III	90	Th	II, III, IV	110	Ds	II, III, IV, V, VI
71	Lu	III	91	Pa	III, IV, V	111	Rg	I, II, III
72	Hf	II, III, IV	92	U	II, III, IV, V, VI	112	Cn	I, II
73	Ta	II, III, IV, V	93	Np	II, III, IV, V, VI, VII	113	Nh	I, II, III
74	W	I, II, III, IV, V, VI	94	Pu	II, III, IV, V, VI, VII	114	Fl	II, IV
75	Re	I, II, III, IV, V, VI, VII	95	Am	II, III, IV, V, VI	115	Mc	III, V
76	Os	II, III, IV, V, VI, VII, VIII	96	Cm	II, III, IV	116	Lv	-II, II, IV, VI
77	Ir	I, II, III, IV	97	Bk	II, III, IV	117	Ts	-I, I, III, V, VII
78	Pt	II, III, IV, V, VI	98	Cf	II, III, IV	118	Og	
79	Au	I, II, III	99	Es	II, III			
80	Hg	I, II	100	Fm	II, III, IV			

Am (酸化数: 0) 【atomn】  
 Am 2+ (酸化数: II) 【ionn】  
 Am 3+ (酸化数: III) 【ionn】  
 Am 4+ (酸化数: IV) 【ionn】  
 Am 5+ (酸化数: V) 【ionn】  
 Am 6+ (酸化数: VI) 【ionn】

図 15. アメリシウム ( $_{95}\text{Am}$ ) のプルダウンメニュー

## 5. 計算例

eduDV のデータ自動入力機能「Auto-eduDV」を用い、孤立原子計算プログラム atomn で原子番号 113 番のニホニウム(Nh)原子を計算した。計算条件は表 3 のように自動設定されている。

表 3. ニホニウム(Nh)原子の計算条件

MSCF = SCCS	サンプル点数 = 20,000	原子軌道数 = 19	全電子数 = 113
使用原子軌道 (基底関数) = 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p, 6d, 7s, 7p			

秀丸エディタを起動し、[eduDV...]ボタンをクリックすると、図 1 6 のようなプルダウンメニューが現れるので、[00. Automatic 【データ自動入力】 ...]を選択、図 1 7 のプルダウンメニューで[AUTO 21. 対称なし 【単原子】原子軌道関数を見るときなどに便利です...]を選択する。

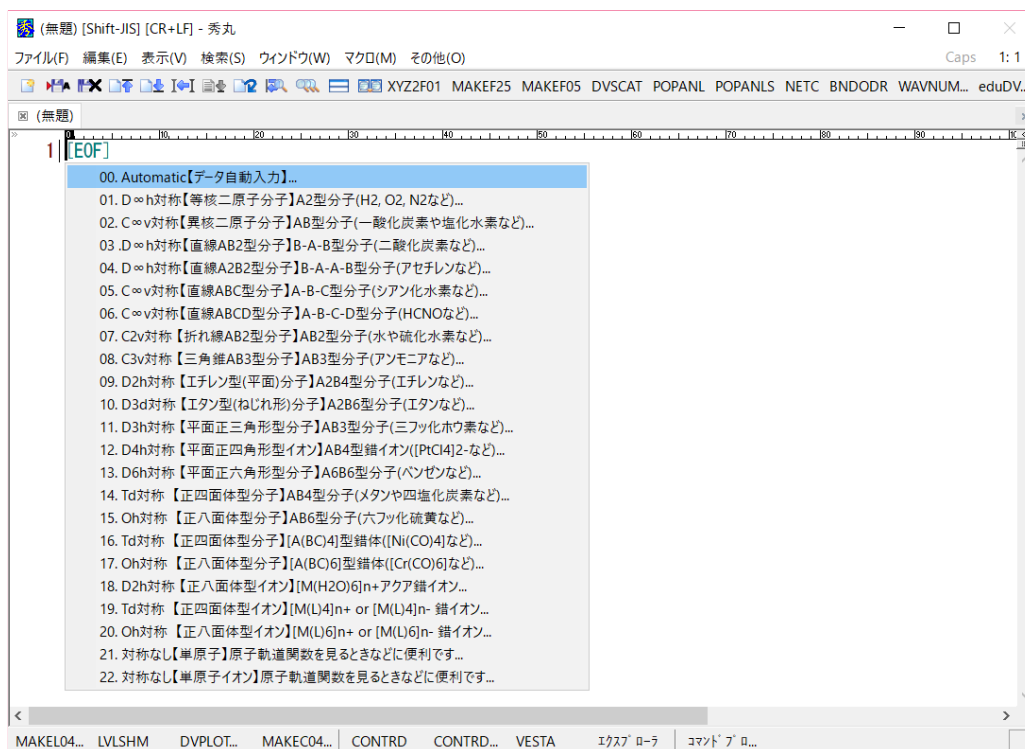


図 1 6. eduDV プルダウンメニュー



図 1 7. Auto-eduDV プルダウンメニュー

[atom 原子番号 101~118 (ノンスピン版・全自動実行) ...]を選択 (図 1 8), [113 Nh Nihonium ニホニウム [Rn]5f<sup>14</sup>6d<sup>10</sup>7s<sup>2</sup>7p<sup>1</sup>] (図 1 9) を選択するとニホニウム原子の計算が始まり, すぐに終了する (図 2 0).

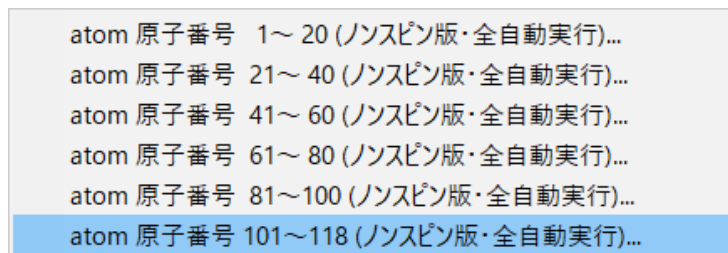


図 1 8. 原子番号範囲の選択

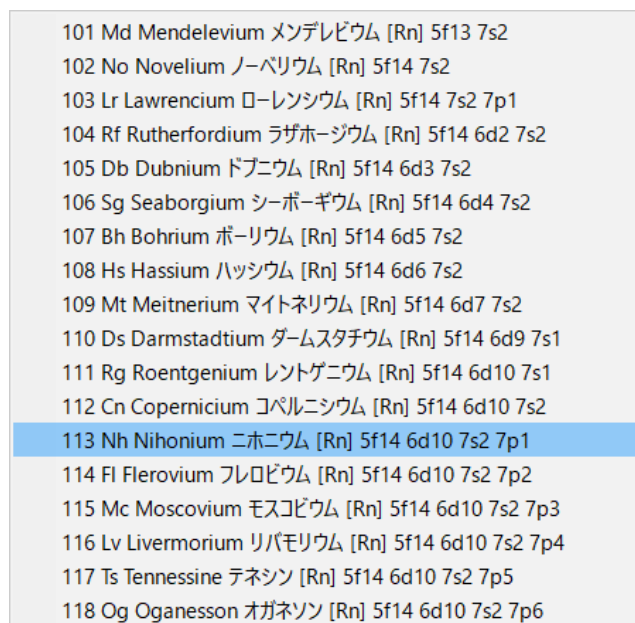


図 1 9. 計算する元素の選択

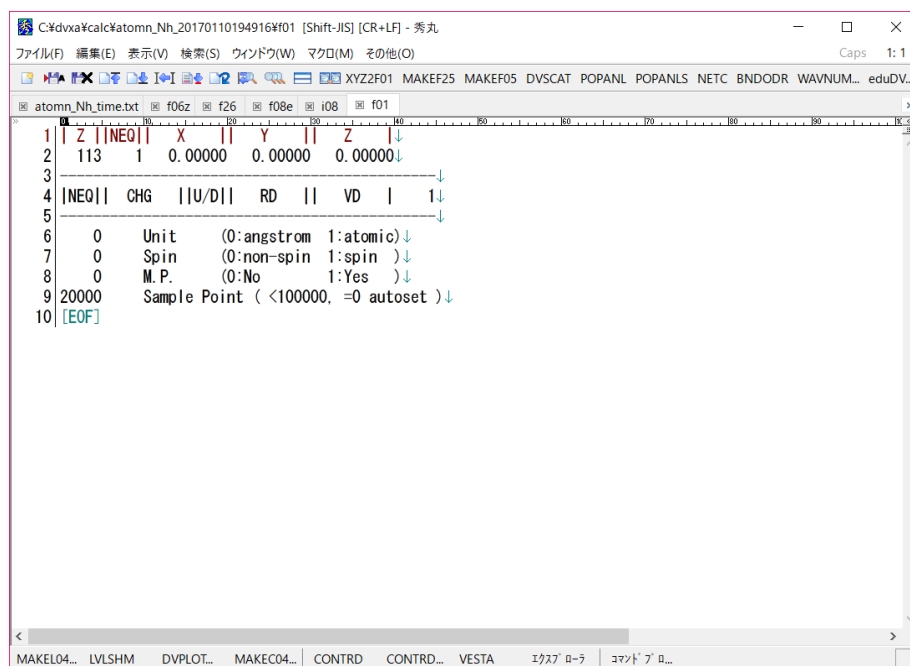


図 2 0. ニホニウム原子の電子状態計算が終了した画面

秀丸エディタの下方のステータスバー上にある[VESTA]ボタンをクリックして VESTA を起動し(図 2 1), VESTA のメニューバーの[Edit]をクリック, [Edit Data] の [Volumetric Data...]をクリックすると, 図 2 2 に示すような Edit Data ダイアログボックスの Volumetric data ページが開く.

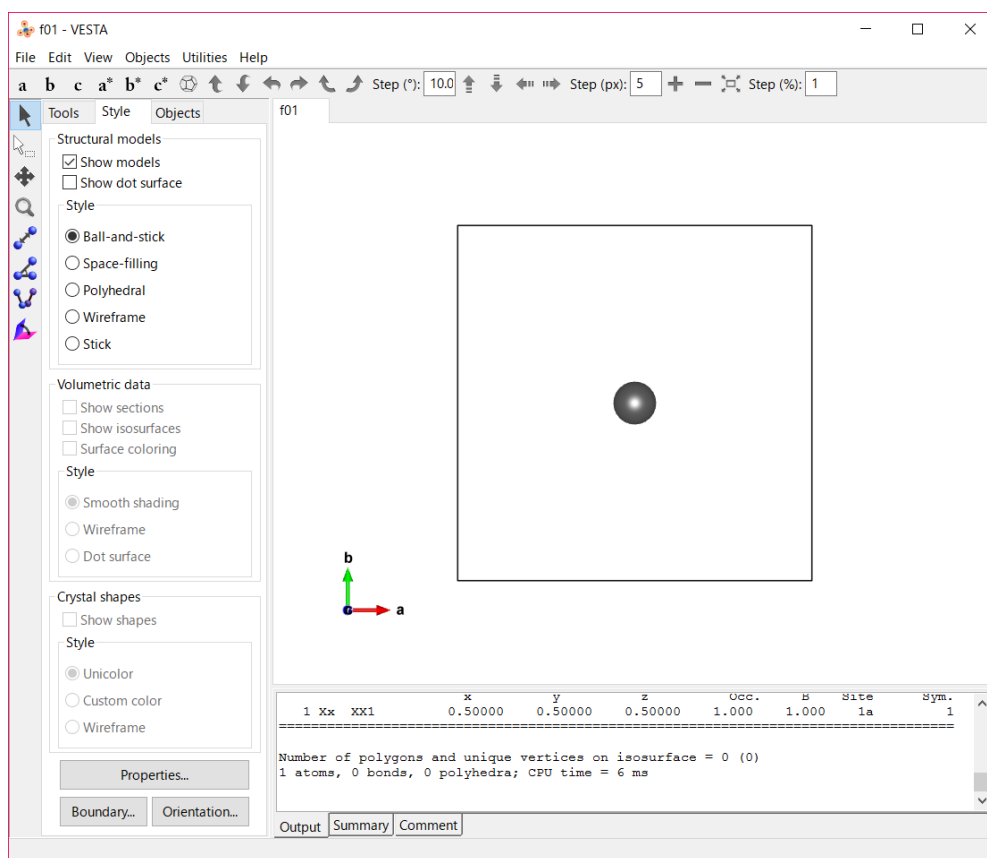


図 2 1. 三次元データ可視化プログラム VESTA 起動画面

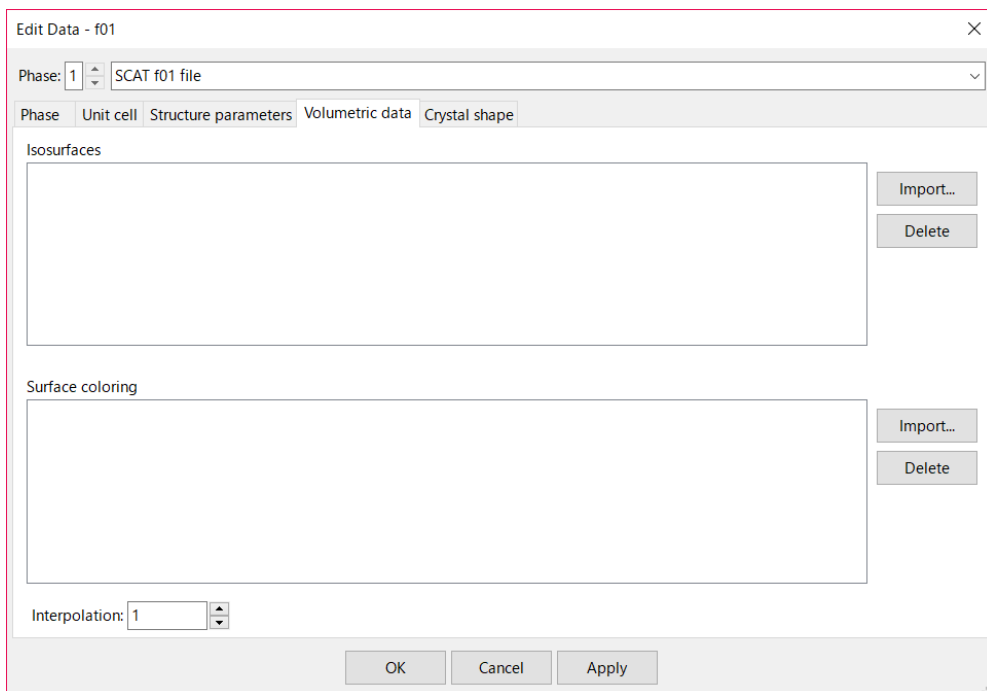


図 2 2. Edit Data ダイアログボックスの Volumetric data ページ

Isosurfaces の[Import...]ボタンをクリックし、三次元可視化したい原子軌道ファイルを選択して[開く]ボタンをクリック、Choose operations ダイアログボックスの[OK]ボタンをクリック、最後に[Apply]ボタンと[OK]ボタンをクリックすれば、VESTA 画面に原子軌道の等値表面図が表示される。7p<sub>z</sub>軌道（主量子数  $n = 7$ , 方位量子数  $l = 1$ , 磁気量子数  $m = 0$ , ファイル名: Nh7p—10.scf）を描いた画面を示す（図 2 3）。

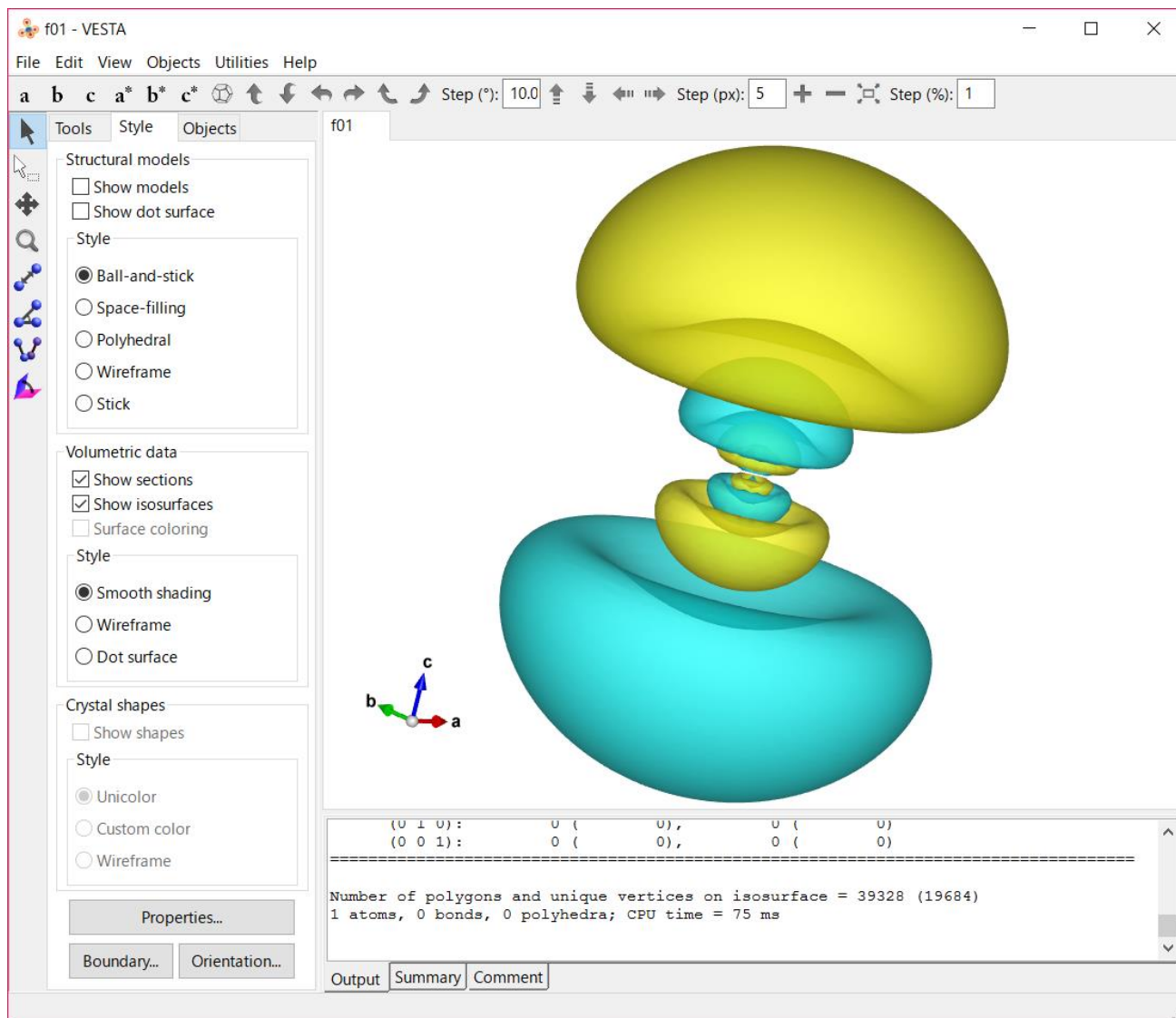


図 2 3. eduDV で計算し VESTA で描いたニホニウム( $_{113}\text{Nh}$ )の 7p<sub>z</sub>軌道

## 6. まとめ

eduDV に含まれる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 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。

教育用分子軌道計算システム eduDV には、atom, atomn, ion, ionn 以外に、60 個のプログラムが登録されているが、それらは現在、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( $_{94}\text{Pu}$ )までしか対応していない。来年度の研究では、これら 60 個のプログラムすべてを拡張し、原子番号 95 番のアメリカシウム( $_{95}\text{Am}$ )から 118 番のオガネソン( $_{118}\text{Og}$ )までにも対応する予定である。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）に対応することになる。



## 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”, 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, “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>
- [12] 坂根弦太, “はじめての DV- $X\alpha$ 法分子軌道計算支援環境ータブエディタ (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 (2015), <http://www.chem.ous.ac.jp/~gsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [13] 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)
- [14] 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).
- [15] 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.
- [16] 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  $[\text{Mo}_3\text{X}_4(\text{H}_2\text{O})_9]^{4+}$  ( $\text{X} = \text{O}, \text{S}$ ) 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).
- [17] 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  $[\text{Mo}_3\text{MS}_4(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{4+}$  ( $\text{M} = \text{Fe}, \text{Ni}$ ) 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).
- [18] 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).

- [19] 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).
- [20] 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.
- [21] 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).
- [22] 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).
- [23] 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.
- [24] 小和田善之, 山田善信, “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, 次世代版 dvscat プログラム, dvxa\_v1\_04,  
<http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html>
- [25] 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>
- [26] 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)
- [27] 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>
- [28] 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)
- [29] Open Watcom, version 2, <http://open-watcom.github.io/open-watcom/>