

CAVE (CAVE Automatic Virtual Environment)を利用した 有機化合物の分子軌道表示

○杉山孝雄¹, 木戸冬子¹, 細矢治夫², 時田澄男¹

¹ 埼玉大学工学部 (〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

² お茶の水女子大学 (〒112-8610 文京区大塚 2-1-1)

【緒言】我々はこれまで原子軌道¹⁾ や水素分子の分子軌道²⁾ を CAVE³⁾ (仮想現実感装置) を利用して表示してきた. 今回は簡単な有機化合物 (光学異性体がある DL-アラニン) を例に取り種々の分子軌道を表示し, HOMO と LUMO の比較や, D-体と L-体の比較を行ない, CAVE による表示がどのように有効であるか確かめることを目的とした.

【方法】今回表示に利用した CAVE とは, 正面, 右面, 左面, 床面を約 3m 四方のスクリーンにした小部屋に人間が入り込んで, 何もない空間上に立体的な物体がその場に存在するかのような仮想現実感を得られる装置である. CAVE を制御するためのソフトウェアとして AVS⁴⁾ (Application Visualization System) を利用した. 今回の方法をフローチャートに示した (右図). 表示の元になる数値データは, 原子軌道や水素分子の時には, 自作のプログラムで作成していた. 今回は, 多様な分子の軌道の数値データを手軽に入手するために, 市販の半経験的分子軌道法計算パッケージを利用した. これから得られた数値データを, 自作プログラムにより, AVS で読み込めるフィールドデータ (三次元空間上の分子軌道の値を順番に並べた物) に変換した. 変換したデータは, AVS で読み込み, CAVE 上で表示した. このとき, CAVE 上で拡大・縮小・自由な回転・分子に近づいていって分子内部に入り込むなどの動きが可能であった.

【結果と考察】分子軌道を三次元立体として表示することができた. この効果として, HOMO と LUMO の変化や, D-体と L-体の構造の差が, わかりやすくなった. このことは複雑な構造の分子に応用したとき, 反応性等を調べる際に, 役立つと考えている.

【参考文献】1) 時田澄男 他,, *J. Computer Aided Chem.*, **1**, 68-75 (2000). 2) 杉山孝雄 他, 2002 年情報化学討論会 J10. 3) The CAVE Virtual Reality System, url="http://www.ev1.uic.edu/pape/CAVE/".

4) AVS Express, url="http://www.avsc.com/software/soft_t/avsxps.html".

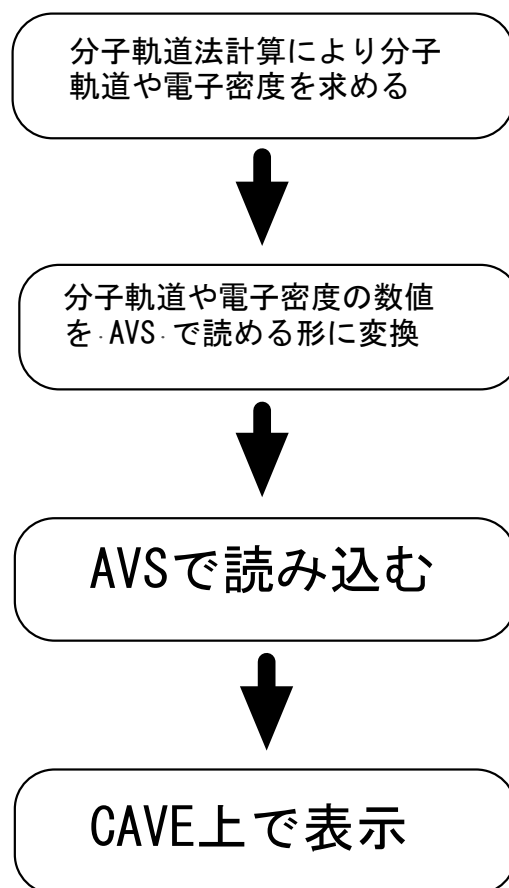


図. 表示の流れ