

演 題	VRML を用いた Zeolite の骨格構造の可視化	
発 表 者 ( 所 属 )	藤井 秀彦, 奥 清高, 内堀 可奈子, 野口 文雄, 小林 秀彦 ( 埼玉大学工学部 )	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市下大久保 255 TEL/FAX 048-858-3536 E-mail noguchi@apc.saitama-u.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	Zeolite , framwork , 員環 , VRML	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	当研究室で開発してきた結晶構造可視化アプリケーションに Zeolite の骨格構造の簡易表示機能を追加した上で, 任意の n 員環を認識し, 強調して描画する機能を開発した .	
環 境	適 応 機 種 名	D O S / V
	O S 名	Windows2000 , WindowsXP
	ソ ー ス 言 語	C/C++(コンパイラ : Borland 社 Borland C++ Builder6)
	周 辺 機 器	特になし
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス, 出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 未定	具 体 的 方 法

## 1 はじめに

Zeolite は近年の化学工業の世界にはなくてはならない物質であり, その優れた特性から石油の接触分解触媒, 固体酸触媒, 触媒担体, 分離膜など広い範囲で利用されている. Zeolite は, 多孔質結晶性アルミノケイ酸塩 ( およびメタロケイ酸塩 ) をさす物質名である. その基本構造単位は,  $(Al, Si)O_4$  四面体 (  $Al, Si$  を合わせて T 原子とする ) である.  $TO_4$  四面体の各頂点の酸素は, それぞれ隣の  $TO_4$  四面体に共有され三次元的に  $TO_4$  四面体がつながっていき, 三次元網目状の結晶を構成している. 当研究室で, 現在までに開発してきた結晶構造可視化アプリケーションには, 単セルもしくは複数セルに含まれる全原子・イオンを剛体球で表示し, 配位多面体を用いて簡素化表示することができた. Zeolite の場合, 配位多面体を用いた簡易表示でも画面が多面体自身によって埋まってしまい, 構造を見るのが困難であった. そこで, Zeolite の構造単位である  $TO_4$  四面体のつながりから, 中心 T 原子と頂点共有されている O をつないで T-O-T 結合として一本のフレームとして表示する機能を新たに追加した. この表示法を骨格フレーム表示と名づけた. また, この骨格フレーム表示時に Zeolite の性質を大きく決定付ける細孔構造理解の手助けになるように任意の n 員環を認識し, 強調描画する機能も新たに開発した.

## 2 骨格フレーム表示

骨格フレーム表示を行うには、T-O-T 結合の情報が必要である。そのために、配位多面体表示から得られる情報を利用して、 $TO_4$  四面体情報を作成した。T-O-T 結合とは、四面体同士が頂点共有することであるから、頂点共有をしている四面体を検索し、互いの T 原子の中心座標を両端とするフレーム情報を作成した。図 1-a にフレーム情報の元になる  $TO_4$  四面体で描画した Mordenite の 4 セル表示を示した。図 1-b は、図 1-a の骨格フレームのみを抽出して描画した例である。

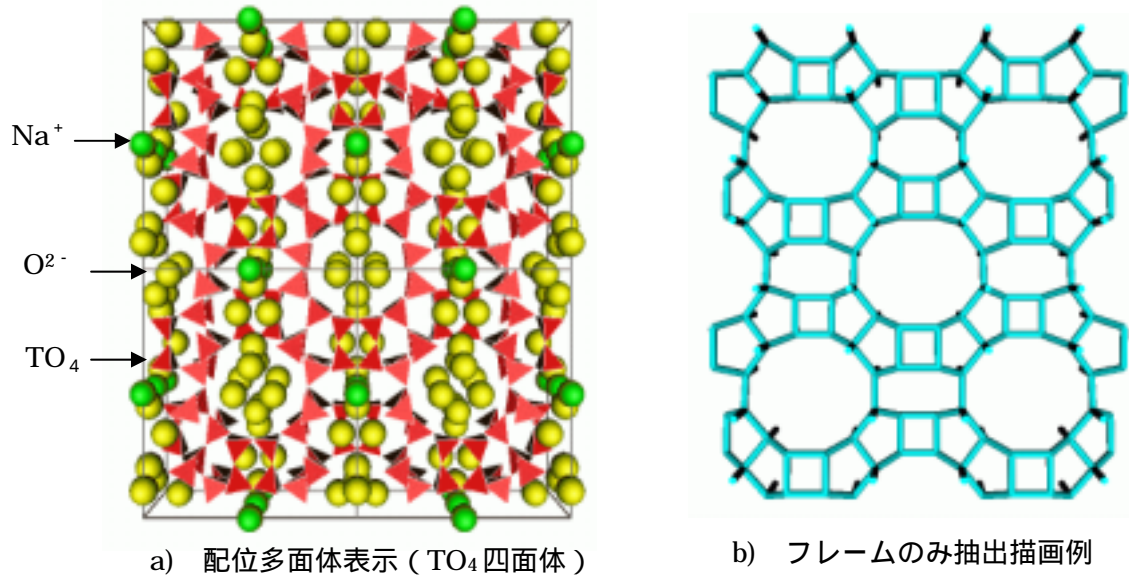


図 1  $^+Mordenite (Na_{7.79} (Al_{7.87} Si_{40.13} O_{96}) (H_2 O)_{10.16})$  の表示例

## 3 n 員環抽出

本アプリケーションの特徴として、Zeolite の骨格フレーム表示時に任意の  $n$  員環 ( $n$  は環構造中の O 原子数もしくは T 原子数) を自動で認識し、色付けする機能がある。フレーム情報より得られた各 Si の接続情報より、組み合わせ可能な全ての経路を探索し、員環であるか否かの判定をする。この探索アルゴリズムを再帰構文にて記述することによって、任意の  $n$  員環に対応できるようにした。図 2 に図 1 で示した 4 セルの Mordenite の骨格構造中に含まれる 12 員環を色付けした結果を示す。

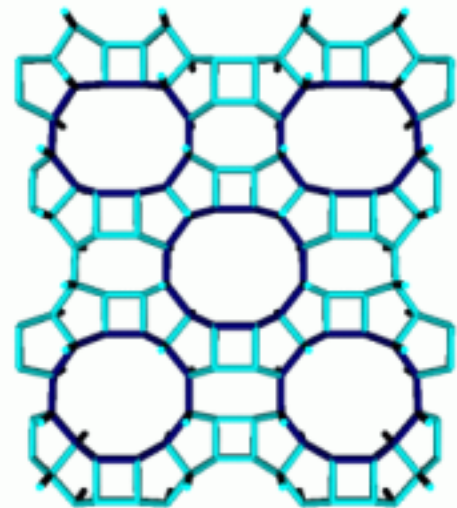


図 2 Mordenite の 4 セル内から 12 員環を認識させた結果

## 4 おわりに

現在の員環探索アルゴリズムでは、大きな員環を探索させたときに実際は員環では無いものを誤認してくるケースがある。今後は、誤認が発生しないように探索ルーチンを改良していく。