

演 題	結晶構造情報を用いた結晶電子密度の計算	
発 表 者 ( 所 属 )	○藤井 秀彦, 野口 文雄, 小林 秀彦 (埼玉大学工学部)	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 225 TEL/FAX 048-858-3536 E-mail <a href="mailto:noguchi@apc.saitama-u.ac.jp">noguchi@apc.saitama-u.ac.jp</a>	
キ ー ワ ー ド	結晶, 電子密度, X線回折	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	当研究室で開発されてきた結晶構造可視化アプリケーションに任意の結晶面の電子密度図 (electron-density map) を表示させる機能の開発。 結晶構造の理解をより深められる。初学者の勉強の手助けになる。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows2000/WindowsXP
	ソ ー ス 言 語	C/C++ (Borland 社 BorlandC++Builder6 使用)
	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	具 体 的 方 法
	・未定○	

## 1. はじめに

結晶の構造の確定には、X線の回折を用いたX線結晶解析がよく使われる。測定によって得られた回折X線は、見かけ上結晶のそれぞれの格子面からの反射と捉えられる。つまり、それぞれの回折線は実空間の電子密度分布を反映した全ての反射波の合成波が回折により各次数に分離されたものであり、回折線全体として、結晶の実空間の電子密度分布を保存している。よって、回折線の反射強度情報をフーリエ変換する事によって実空間の電子密度分布が得られ、結晶構造が求められる。逆に結晶構造が分かれば構造因子（構造因子の二乗の総和が回折線の反射強度に比例する）が計算できる。そして、構造因子の逆フーリエ変換によって、電子密度を求めることができる。

本アプリケーションでは、結晶構造はCIF (Crystallographic Information File)形式のファイルから読み取り、原子・イオンの散乱因子を文献値データベースから取得し構造因子を計算して、ユーザーの指定する結晶面 (hkl) の任意のサブ層における結晶電子密度分布を表示する機能の開発を試みた。

## 2. 計算

単位格子内に N 個の原子が存在し j 番目の原子の原子散乱因子  $f_j$  で、その原子座標が  $(x_j, y_j, z_j)$  な

らば (1) 式の構造因子  $F_{hkl}$  が計算できる。また、(1) 式の虚部の実部に対する比の逆正接から、構造因子の位相角  $\phi_{hkl}$  が算出される。

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp\{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)\} \quad (1)$$

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |F_{hkl}| \cos\{2\pi(hx + ky + lz) - \phi_{hkl}\} \quad (2)$$

$V$  : 単位格子の体積

(2)式から求まる任意の点(xyz)での電子密度  $\rho$  は、 $hkl$  それぞれ  $-\infty \sim +\infty$  までの積分になっているが、それでは、計算不能なので、近似計算として範囲を  $-\text{IndexMax} \sim \text{IndexMax}$  にすることによって、電子密度が求まる。また、計算範囲については、ユーザーが指定した結晶面(hkl)の基本並進ベクトル  $\mathbf{U}, \mathbf{V}$  を求め、更に単位体積  $V$  と  $\mathbf{UVW}$  のスカラー3重積が等しくなるようにベクトル  $\mathbf{W}$  を算出した。ベクトル  $\mathbf{W}$  はサブ層の位置を与えるので、ユーザーは  $0 \sim 1$  の範囲で指定できる。ベクトル  $\mathbf{W}$  で与えられたサブ層を、ユーザーが指定したステップ数でメッシュを切り、各計算点(xyz)の電子密度の値に対して色を与え、bitmapとして出力した。

### 3 出力例

ベンゼンの(212)面における電子密度分布の出力の一例として図1に示す。

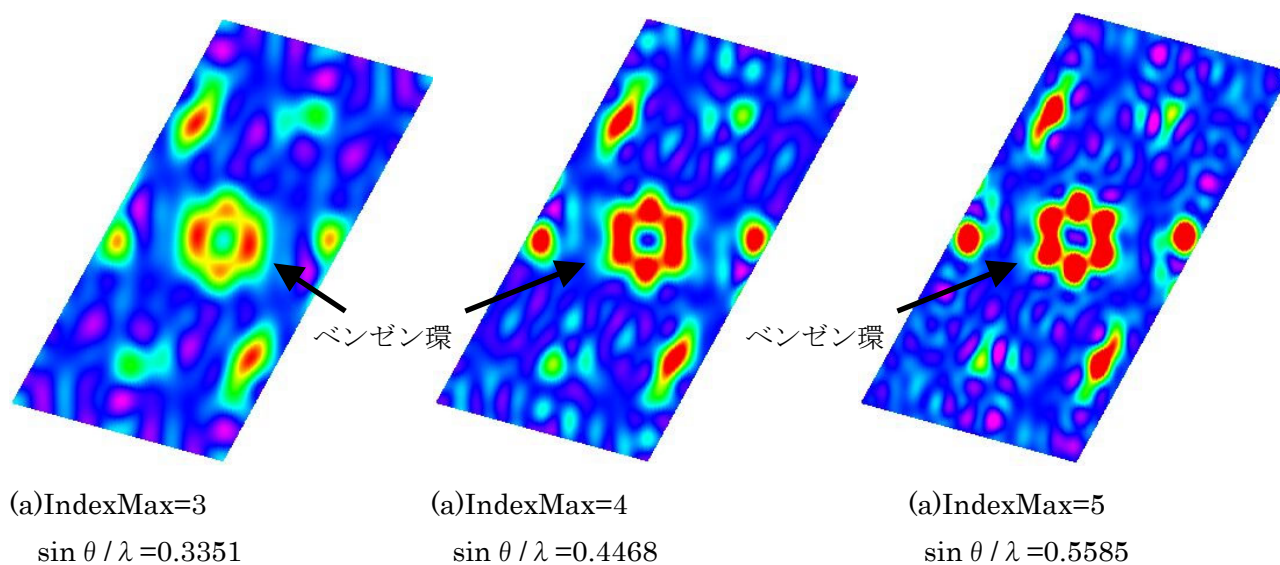


図1 ベンゼン ( $C_6H_6$ ) の(212)面の電子密度分布

得られた電子密度分布図を見ると、確かにベンゼンの6員環が見て取れる。また、(2)式の  $\text{IndexMax}$  の値を大きくするほど、近似精度が上がるのでより形がシャープになる事が確かめられた。

### 4 今後の展望

まず、計算の高速化が挙げられる。どうしても結晶に多くの原子・イオンが含まれると計算に時間がかかる。結晶の対称を利用して、計算量を削減するなどすれば対称性の高い結晶系については有効であろう。また、出力図が色譜調だけであるので、等高線表示機能などを付けるつもりである。

文献

1) Harold P. Klug, X-ray diffraction procedures (John Wiley & Sons, New York, 1973)