

演 題	ナノサイズ分子に対応した PPP-MO 法計算プログラムの開発	
発 表 者 (所 属)	○大久保 直也、藤井 秀彦、野口 文雄、時田 澄男、*西本 吉助 (埼玉大工、*岡山理科大)	
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	PPP-MO 法計算、ナノサイズ分子	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	容易に縮合多環芳香族の分子や 5 員環ポリマーをモデリングでき、PPP-MO 法を用いてナノサイズ分子までの分子軌道エネルギー・分子軌道の係数 (LCAO 係数)・電子スペクトルを計算できるプログラムを開発した。	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows2000 / XP
	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	具 体 的 方 法
	・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	

1. はじめに

当研究室では以前から PPP-MO 法プログラムを開発してきた。しかし今までのプログラムで用いられていたモデリング方法ではナノサイズの巨大な分子を作成することは困難であった。そこで特に縮合多環芳香族炭化水素を簡単にモデリングできるように、モデリング部分の改良を行った。それに伴い、巨大分子も短時間で計算できるように、固有値問題を解く計算アルゴリズムも改良した。また分子軌道エネルギーや LCAO の係数、電子スペクトルを計算することも可能になった。

2. モデリング

以前のモデリングの方法を図 1 に示す。この方法では左の図のように原子を 1 つ加えるためにもさまざまなパラメーター (結合の長さや角度、二面对角など) を指定する必要があった。この図はベンゼンに炭素原子を 1 つ加えてトルエンにする場合であるが、原子を 1 つ加えるたびにこのような指定をするのはとても手間がかかる。

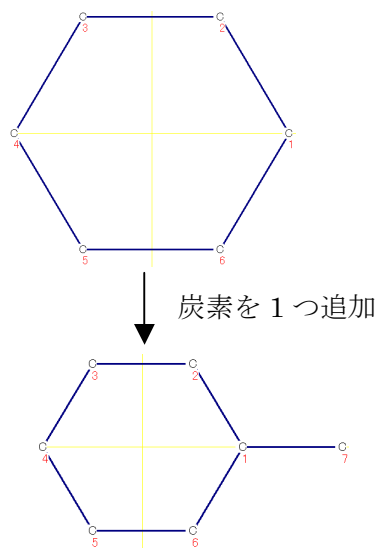
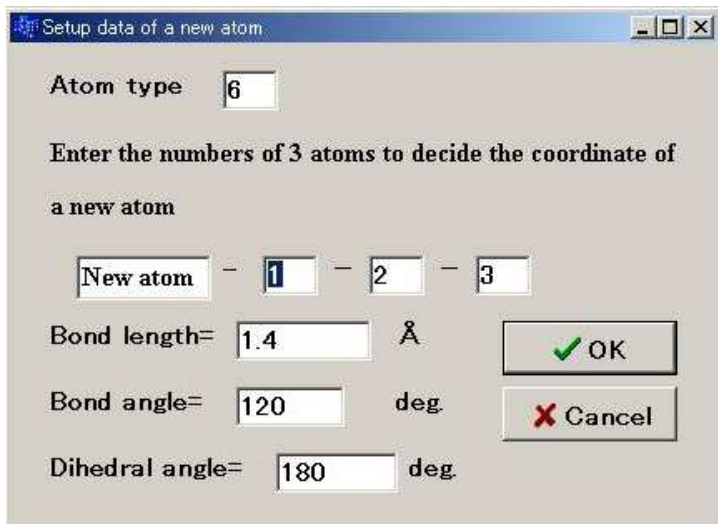


図1 以前の方法によるモデリング方法

一方、改良したモデリング方法を使用すると、巨大な縮合多環芳香族炭化水素を簡単にモデリングできる。図2はプログラムを起動したときに表示される画面であり、原子を配置できる位置が白丸で表されている。この白丸をクリックまたはドラッグして選択することにより、炭素原子を配置できる。またこの丸を数回クリックすると、配置する原子の種類（炭素、窒素、酸素、硫黄など）をかえられる。

また5員環を含むような一般の分子をモデリングするモードもある。

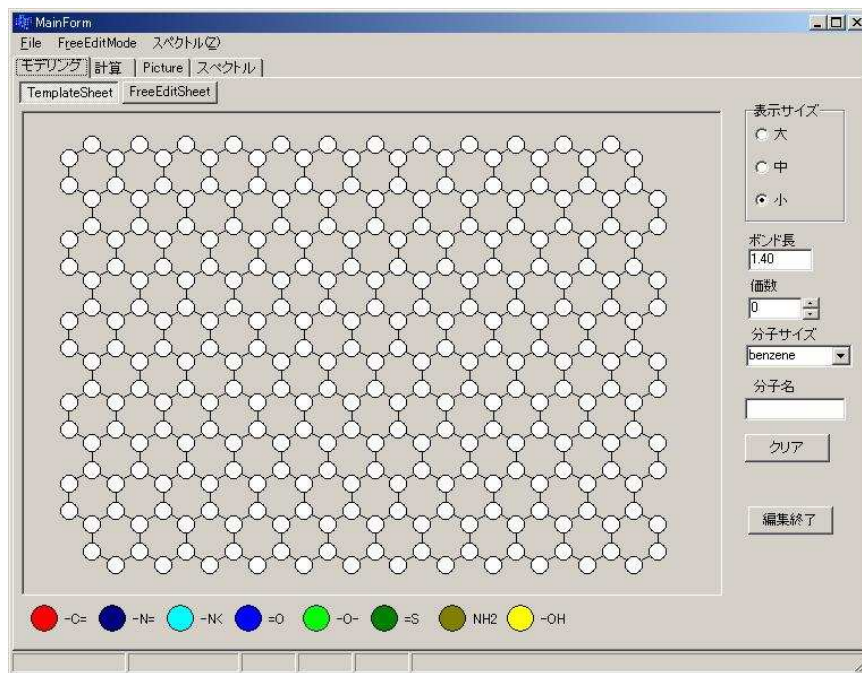


図2 改良した方法のモデリング画面

3. 固有値問題を解く計算アルゴリズム

表1は固有値問題を解く時間を比較したものである。新しい方法には最適化されたQR法を使用している。この表の結果から、計算速度はおよそ3倍に高速化されたことがわかる。

表1 計算時間の比較

行列の大きさ	以前の方法	QR法
900 × 900	163s	51s
1225 × 1225	443s	132s
1600 × 1600	1070s	293s