

CAVE (CAVE Automatic Virtual Environment)を利用した 有機化合物の分子軌道表示(2)

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や水素分子の分子軌道を CAVE (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 (エチレン $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ とホルムアルデヒド $\text{CH}_2=\text{O}$) を例に取り、種々の分子軌道を表示し、HOMO と LUMO や、 $\text{C}=\text{C}$ 二重結合と $\text{C}=\text{O}$ 二重結合との比較に、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、何も無い空間上に立体的な物体がその場に存在するかの様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 AVS (Application Visualization System) を利用した。その他の表示方法は前回の講演で報告した¹⁾。

【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 (図)。図では π -結合のみ表示した。右上がエチレンの HOMO，左上がエチレンの LUMO，左下がホルムアルデヒドの HOMO-1 (HOMO は酸素原子上の n 軌道)，右下がホルムアルデヒドの LUMO である。エチレンの HOMO とホルムアルデヒドの HOMO-1 の差や、それぞれの LUMO 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、反応性等の予測などに役立つと考えている。

【参考文献】1) 杉山孝雄 他，2005 年コンピュータ化学会春季年会，1001.

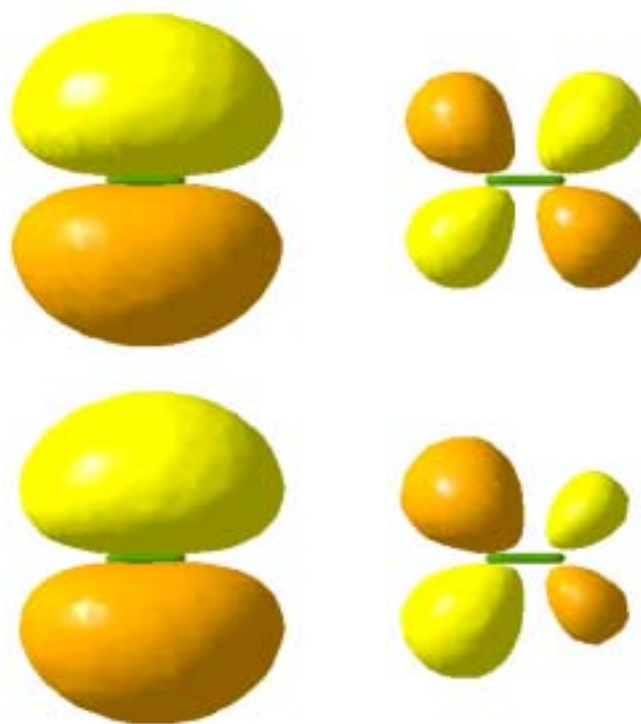


図 HOMO (HOMO-1) & LUMO