

# 原子軌道の動画表示とその数式の理解に関する研究

時田 澄男\*, 杉山 孝雄

埼玉大学工学部応用化学科, 〒 338-8570 浦和市下大久保 255

\*e-mail: tokita@apc.saitama-u.ac.jp

(Received: September 13, 2000; Accepted for publication: September 27, 2000; Published on Web: November 25, 2000)

QTVR (QuickTime Virtual Reality) と呼ばれるソフトウェアを利用して、水素原子の原子軌道 19 種について対話型動画表示を実現させた。この動画表示が、量子化学の教育にどのように役立つか調査した。対話型動画の利用は、軌道の形状と数式の関係、節の形状と数式を理解する手助けとなることがわかった。

キーワード: Atomic Orbital Wavefunction, Interactive Animation, QTVR, Virtual Reality

## 1 目的

原子軌道は化学結合をはじめ化学の理解に重要であるといわれている。最近、 $\text{Cu}_2\text{O}$  結晶の X 線結晶構造解析により、d 原子軌道を直接観測した報告がなされた [1]。この報告は種々の二次情報誌でも紹介された [2, 3a, b]。コンピューターを利用した原子軌道の可視化手法も種々行なわれ、特に近年は動画表示の報告が増加している [4]。これらはパーソナルコンピューター上で単独で動作するソフトウェア [4a, b] とインターネット経由で Web site 上の画像データを取り込み、端末上で表示するソフトウェア [4c, d] に分類できる。

われわれは、水素原子の原子軌道の表示について、さまざまな角度から研究を行ってきた [5, 6]。その一環として QTVR (QuickTime Virtual Reality) [7] を利用した動画表示も試みている [8]。QTVR とは、複数の静止画像を基にして、立体図形の動画を作り出すソフトウェアである。

動画の化学教育への利用は、概念の理解には適する。しかし、一般に、マルチメディアの利用は数式の理解には適していないとの報告がある [9]。本研究では、QTVR を利用した動画表示が、原子軌道の立体形状認識にどのように役立つか、またそのもとになる数式の理解にどのように利用できるか検討した。

## 2 方法

前報 [8] では、左右方向を X 軸、上下方向を Y 軸、それらに垂直な方向を Z 軸とした 3 次元空間 (右手系) 上の原子軌道の等値曲面 (isosurface) を 2 次元平面に投影した画像を作成した。

これらは，QTVR を利用して対話型で等値曲面を 2 方向に回転できる動画であり，マウスの上下方向の移動で X 軸まわりに 0 度 - 90 度回転し，水平方向の移動で Y 軸まわりに 0 度 - 360 度回転させることができる．このとき，回転の順番は X 軸まわり回転が先に，Y 軸まわり回転が後に固定されている．すなわちマウスをななめに移動したときには X 軸まわりの回転の後に Y 軸まわりに回転する．

今回は，前報 [8] で作成した 3d 軌道 5 種類と 4d 軌道 5 種類に加えて，2p 軌道，3p 軌道，4p 軌道それぞれ 3 種類づつを作成した．もとになる数式を式 (1) - (19) に示す．

$$\chi_{2p_z} = (1/4\sqrt{2\pi}) \exp(-r/2)z \quad (1)$$

$$\chi_{2p_x} = (1/4\sqrt{2\pi}) \exp(-r/2)x \quad (2)$$

$$\chi_{2p_y} = (1/4\sqrt{2\pi}) \exp(-r/2)y \quad (3)$$

$$\chi_{3p_z} = (2/81\sqrt{2\pi})(6-r) \exp(-r/3)z \quad (4)$$

$$\chi_{3p_x} = (2/81\sqrt{2\pi})(6-r) \exp(-r/3)x \quad (5)$$

$$\chi_{3p_y} = (2/81\sqrt{2\pi})(6-r) \exp(-r/3)y \quad (6)$$

$$\chi_{3d_{3z^2-r^2}} = (1/81\sqrt{6\pi}) \exp(-r/3)(3z^2 - r^2) \quad (7)$$

$$\chi_{3d_{yz}} = (2/81\sqrt{2\pi}) \exp(-r/3)yz \quad (8)$$

$$\chi_{3d_{zx}} = (2/81\sqrt{2\pi}) \exp(-r/3)zx \quad (9)$$

$$\chi_{3d_{xy}} = (2/81\sqrt{2\pi}) \exp(-r/3)xy \quad (10)$$

$$\chi_{3d_{x^2-y^2}} = (1/81\sqrt{2\pi}) \exp(-r/3)(x^2 - y^2) \quad (11)$$

$$\chi_{4p_z} = (1/512\sqrt{5\pi})(80 - 20r + r^2) \exp(-r/4)z \quad (12)$$

$$\chi_{4p_x} = (1/512\sqrt{5\pi})(80 - 20r + r^2) \exp(-r/4)x \quad (13)$$

$$\chi_{4p_y} = (1/512\sqrt{5\pi})(80 - 20r + r^2) \exp(-r/4)y \quad (14)$$

$$\chi_{4d_{3z^2-r^2}} = (1/3072\sqrt{\pi})(12 - r) \exp(-r/4)(3z^2 - r^2) \quad (15)$$

$$\chi_{4d_{yz}} = (1/512\sqrt{3\pi})(12 - r) \exp(-r/4)yz \quad (16)$$

$$\chi_{4d_{zx}} = (1/512\sqrt{3\pi})(12 - r) \exp(-r/4)zx \quad (17)$$

$$\chi_{4d_{xy}} = (1/512\sqrt{3\pi})(12 - r) \exp(-r/4)xy \quad (18)$$

$$\chi_{4d_{x^2-y^2}} = (1/1024\sqrt{3\pi})(12 - r) \exp(-r/4)(x^2 - y^2) \quad (19)$$

動画の効果確かめるために、講義中に原子軌道に関する問を出題し、解答させた。被験者は、化学系学科2年次生(半期の量子力学の講義を受けたがまだ初学者と言える)約60人である。無作為抽出により2つに分け、一方に等値曲面の投影図の静止画(Figures 1-1, 1-2)を配布し、他方にはパーソナルコンピュータ上で動作する等値曲面の動画を操作させて、2つのグループの比較を試みた。また、2つのグループそれぞれに、原子軌道の数式(1)-(19)原子軌道の断面表示の静止画12種(Figure 2)[10]を参考資料として与えた。

実際の問題の例を下記に示す。

- 
- 問1 複数の原子軌道のなかから同じ形のものを選び、一方を他方に重ね合わせるためにはどのような操作をすればよいか答えよ。
- 問2 原子軌道の画像と数式との対応を問1との関連で答えよ。
- 問3 原子軌道の節の数と形状を答えよ。
- 

### 3 結果と考察

#### 3.1 水素原子の原子軌道の分類

原子軌道について理解するには、その形状や関数値の変化に注目する必要がある。水素原子の原子軌道はその複雑さの程度により以下の4種類に分類できる。

- 主量子数  $n = 1, 2, 3, \dots$ , 方位量子数  $l = 0$ , 磁気量子数  $m = 0$   
これらの量子数を持つ原子軌道は、球対称で方向性を持たない。静止画(等値曲面表示と中心を通る断面表示の併用)で理解に達すると思われる。これらは、  
 $1s, 2s, 3s, \dots$   
などの軌道である。
- 主量子数  $n = 2, 3, 4, \dots$ , 方位量子数  $l = 1$ , 磁気量子数  $m = 0, \pm 1$ ,  
または、主量子数  $n = 3, 4, 5, \dots$ , 方位量子数  $l = 2, 3, \dots, n-1$ , 磁気量子数  $m = 0$   
これらの量子数を持つ原子軌道は、直交座標系変数( $x, y$  または  $z$ )のうちの1つの座標軸に関して円筒対称性を持つ(たとえば式(1)では $Z$ 軸, 式(2)では $X$ 軸など)。これらは、等値曲面の動画と、1種類の特定の座標軸を含む断面の静止画の併用で理解に達すると思われる。具体的には、  
 $2p, 3p, 4p, \dots$   
 $3d_{3z^2-r^2}, 4d_{3z^2-r^2}, 5d_{3z^2-r^2}, \dots$   
 $4f_{5z^3-3zr^2}, 5f_{5z^3-3zr^2}, 6f_{5z^3-3zr^2}, \dots$   
 $5g_{35z^4-30z^2r^2+3r^4}, 6g_{35z^4-30z^2r^2+3r^4}, 7g_{35z^4-30z^2r^2+3r^4}, \dots$   
などの軌道がこれにあたる。
- 主量子数  $n = 3, 4, 5, \dots$ , 方位量子数  $l = 2, 3, 4, \dots, n-1$ , 磁気量子数  $m = \pm 1, \pm l$   
これらの量子数を持つ原子軌道は、たとえば式(8)-(11)のように2種の直交座標系変数( $yz, zx, xy$ , または  $x^2-y^2$ )を含んでいて、2つの平面に関する面対称性を持っている。これらは、等値曲面の動画と、対称面に直交する平面を断面とする静止画の併用で理解に達すると思われる。具体的には、

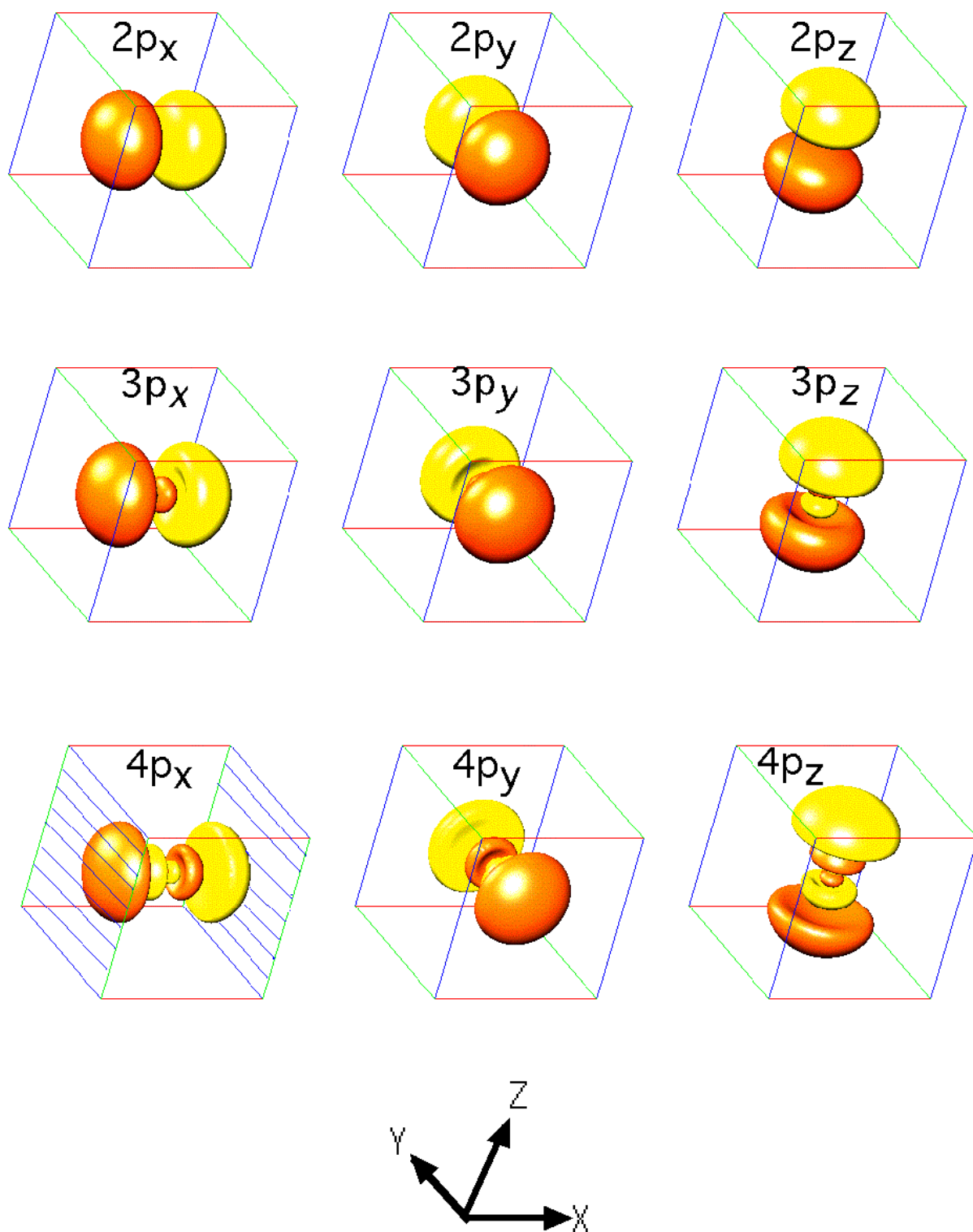


Figure 1-1. Isosurfaces of hydrogen atomic orbitals

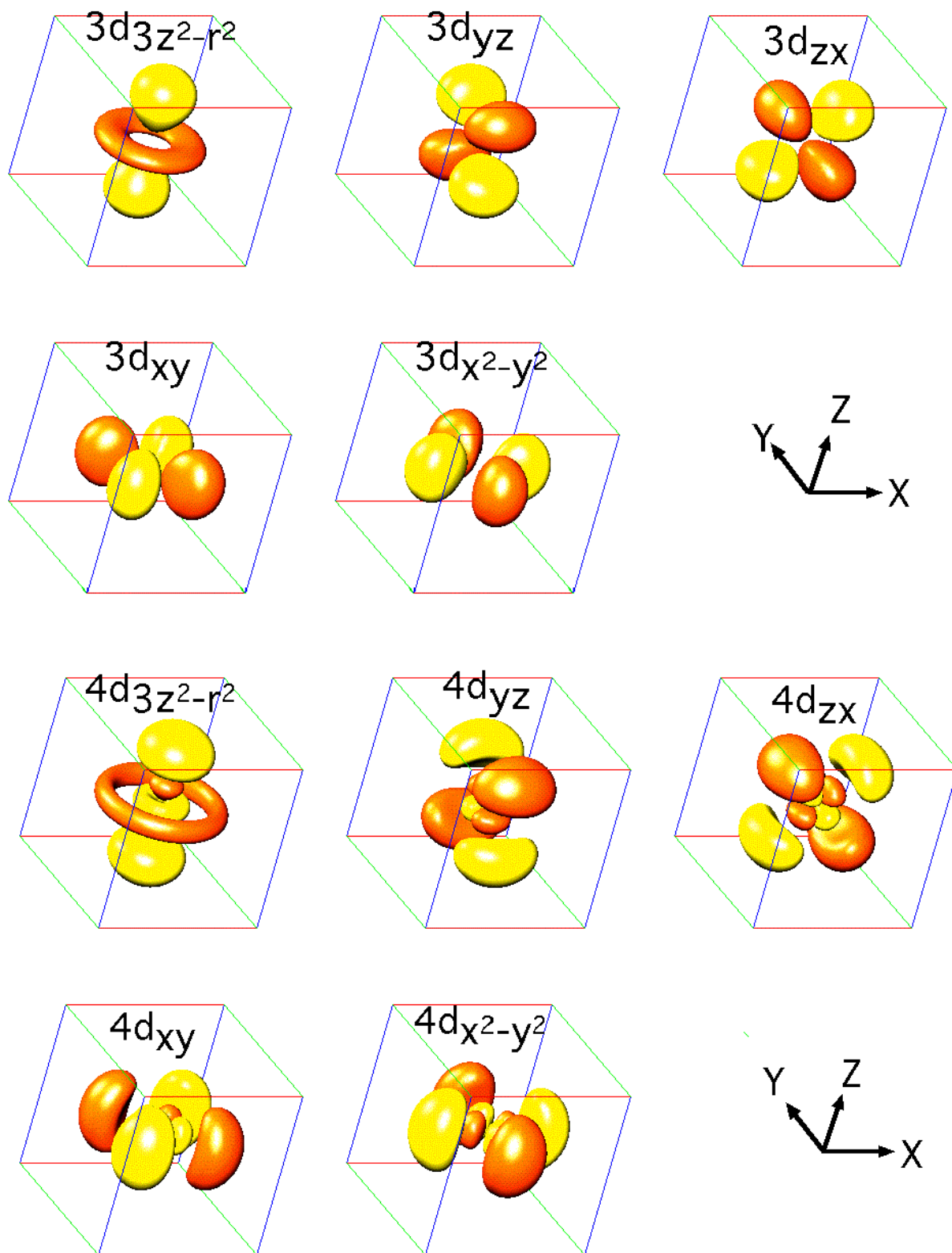


Figure 1-2. Isosurfaces of hydrogen atomic orbitals

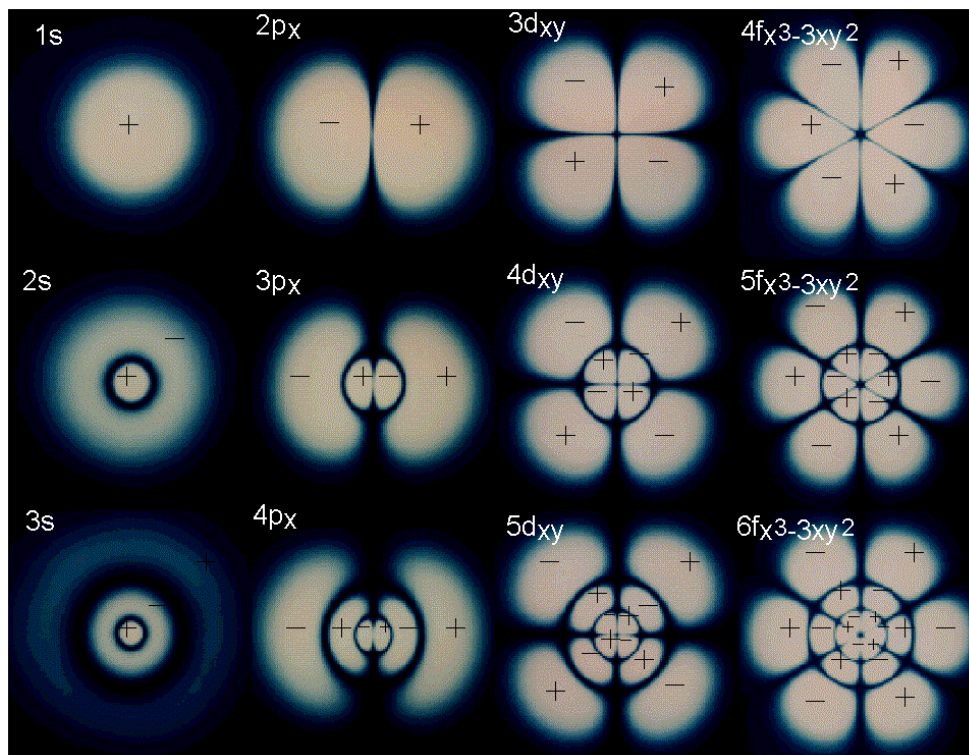


Figure 2. Cross sections of hydrogen atomic orbitals

$$3d_{yz}, 3d_{zx}, 3d_{xy}, 3d_{x^2-y^2}, \dots$$

$$4d_{yz}, 4d_{zx}, 4d_{xy}, 4d_{x^2-y^2}, \dots$$

$$4f_{5xz^2-xr^2}, 4f_{5yz^2-yr^2}, 4f_{x^3-3xy^2}, 4f_{3yx^2-y^3}, \dots$$

などの軌道がこれにあたる。

4. 主量子数  $n = 4, 5, 6, \dots$ , 方位量子数  $l = 3, 4, 5, \dots, n-1$ , 磁気量子数  $m = \pm 2, \dots, \pm (l-1)$   
 これらの量子数を持つ原子軌道は，たとえば， $xyz$  のような 3 種の直交座標系変数を含むため，等値曲面の動画のほかに，複数の断面の静止画を用いなければ理解に達することが困難と考えられる。これらは

$$4f_{xyz}, 4f_{zx^2-zy^2}, 5f_{xyz}, 5f_{zx^2-zy^2}, \dots$$

などの軌道である。

今回は，動画を用いることが有効と予想される 2. と 3. の軌道の一部を取り上げた。

### 3.2 動画の特徴

今回利用した QTVR 動画は 2 方向（上下，左右）に，対話型で操作できるという特徴を持っている。このことは，3 次元空間を自由に回転できる動画と比較すると動作に制限がある。しかし，自由に 3 次元回転できると，現在の位置を見失って混乱してしまう可能性がある。今回の目的には，ある程度動作に制限があるほうが適していると考えた。

### 3.3 数式の理解

#### 3.3.1 重ね合わせについての解答の分析

Table 1. Percentage of correct answer for the superposition of two different atomic orbitals with the aid of animated or still pictures

No.	atomic orbitals		correct answer %	
			still pictures	animated pictures
1	$2p_z$ ,	$2p_x$	70	100
2	$3p_z$ ,	$3p_x$	68	100
3	$3d_{x^2-y^2}$ ,	$3d_{yz}$	57	96
4	$4p_z$ ,	$4p_x$	14	52
5	$4d_{x^2-y^2}$ ,	$4d_{yz}$	18	45

複数の原子軌道のなかから同じ形のものを選び、一方を他方に重ね合わせるためにはどのような操作をすればよいかという問(問1)に対する解答を、静止画、動画の順に述べる。

等値曲面の投影図の静止画 ( Figures 1-1, 1-2 ) + 数式 (1)-(19) + 断面図 ( Figure 2 ) の場合

問1は、投影図から頭の中で立体図形を連想し、回転させて重ね合わせを行なうことにより、解答が可能になる。最も正答率の高かったのは2p軌道の重ね合わせ ( Table 1 静止画, No. 1 の70% ) で、低かったのは4p軌道の重ね合わせ ( Table 1 静止画, No. 4 の14% ) であった。2p軌道は、今回質問した原子軌道の中で最も単純な図形で、正の等値曲面1個と負の等値曲面1個の対からなる。したがって投影図から立体図形への連想が容易であるので正答率が比較的良かったと考察できる。3p軌道の重ね合わせ ( Table 1 静止画, No. 2 の68% ) の場合は、2p軌道と同程度の正答率であった。3p軌道は、大、小、小、大、の正負の等値曲面2対からなる。1対から2対になったことで正答率はわずかに悪くなった。4p軌道は、大、中、小、小、中、大、の正負の等値曲面3対からなる。2対から3対になったこと、中心部分の小および中の等値曲面が外側部分の大に等値曲面に遮られて見にくくなっていることから、投影図から立体図形への連想が困難になったので、正答率が低下したと言える。3d軌道の重ね合わせ ( Table 1 静止画, No. 3 の57% ) と4d軌道の重ね合わせ ( Table 1 静止画, No. 5 の18% ) の場合も、正負の対が2から4に増えたこと、中心部分の小さい等値曲面が外側部分の大きい等値曲面に遮られて見にくくなっていることから、正答率が低下している。これらのことから、静止画では、正負の対が3組以上あり、中心部分に小さい等値曲面があるという条件では、原子軌道の形状の認識が困難であるという結果であった。

等値曲面の対話型動画 + 数式 (1)-(19) + 断面図 ( Figure 2 ) の場合

動画の利用は、静止画の場合と比較して正答率が増加した。特に2p, 3p, 3d軌道の重ね合わせ ( Table 1 動画, No. 1 - No. 3 ) では正答率ほぼ100%であった。これは対話型動画で実際に操作して重ね合わせられることができる利点が反映したものと考察できる。また、4p, 4d軌道の重ね合わせ ( Table 1 動画, No. 4, No. 5 ) では、正答率は静止画より増加したが5割程度にとどまった。このことは今回の動画は静止画よりは役立つが、改良の余地があることを示している。

### 数式との対応

2p 軌道 3 種 ( Figure 1-1 の上段 ) が同じ形であると認識できてから , 数式 (1) - (3) を見比べると , 最後の部分  $x, y, z$  以外は全く同じ数式であることから , この部分  $x, y, z$  が原子軌道の方向を決める働きをしていることが理解できる . すなわち , それぞれの軸に対して円筒対称になっている . 3p, 4p 軌道についても同様に画像 ( Figure 1-1 の中段 ) と数式 (4) - (6) , ならびに , 画像 ( Figure 1-1 の下段 ) と数式 (12) - (14) の対応がつけられる .

問 2 ( 原子軌道の画像と数式との対応を問 1 との関連で答えよ ) の解答の分析

この問は自由形式で答えさせた . 解答した被験者は全体の 1/3 程度であり , 一部の数式についてのみの解答が多かった . そのなかで , 4p 軌道に関する解答を分析すると , 次のような結果を得た . 数式 (12) - (14) の最後の項  $x, y, z$  が原子軌道の方向を決めると解答した被験者が , 静止画で 21 % , 動画で 32 % であった . ここでも動画の正答率が高かった .

4p 軌道には 2p 軌道には存在しない球形の節を含む複数の節が存在するが , この場合については次に述べる .

### 3.3.2 節についての解答の分析

Table 2. Percentage of correct answer for the node of atomic orbitals with the aid of animated or still pictures

No.	atomic orbital	node	correct answer %	
			still pictures	animated pictures
1	2p <sub>z</sub>	plane	38	100
2	3p <sub>z</sub>	plane	43	100
3		sphere	30	86
4	3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	plane	21	100
5	4p <sub>z</sub>	plane	14	50
6		sphere	14	50
7	4d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	plane	17	57
8		sphere	17	54
9	4d <sub>3z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub>	sphere	0	25
10		cone	0	14

節とは , 原子軌道関数の値が 0 になる点の集合で , 原子軌道により , 平面 , 球面 , 円錐面などの形状になる . 主量子数を  $n$  とするとき , 節の数は  $n-1$  となり , その形の理解は原子軌道が 3 次元の波動であることと対応して重要である . 原子軌道の節の数と形状を答えよという問 ( 問 3 ) に対する解答を Table 2 に示す . これを以下のように解析した .

等値曲面の投影図の静止画 ( Figures 1-1, 1-2 ) + 数式 (1)-(19) + 断面図 ( Figure 2 ) の場合

正答率は , 最も良いもので 4 割程度であった ( Table 2 静止画 , No. 1 (38 %) - No. 2 (43 %) ) . 曲面状の節の存在には気づくが , 原子軌道全体に球面の節があることに気づかない解答が目立った . 円錐面の節の存在を解答した被験者はいなかった ( Table 2 静止画 , No. 10 (0 %) ) . これら



のことは、静止画だけで節の存在を理解することが困難であることを示している。

等値曲面の対話型動画 + 数式 (1)-(19) + 断面図 (Figure 2) の場合

正答率が高いもの (Table 2 動画, No. 1 - No. 4), 半分程度のもの (Table 2 動画 No. 5 - No. 8), 低いもの (Table 2 動画, No. 9, No. 10) に分かれた。これを節の数と形状から分析すると、次のようになった。節の形状が平面や球面で、数が 1 (Table 2 動画, No. 1) ないし 2 (Table 2 動画, No. 2 - No. 4) の場合は正答率が高かった。節の形状が平面や球面で、数が 3 の場合 (Table 2 動画, No. 5 - No. 8) は、正答率が半分程度であった。このことは節の数が 3 を越えると形状の認識がむずかしくなることを示している。平面と球面を比較 (Table 2 動画, No. 2 - No. 3) すると、平面の方が少し正答率が高いがその差はわずかであった。節の形状が円錐面の場合 (Table 2 動画, No. 10) は正答率がきわめて低かった。このことは、円錐面が平面や球面に比較して認識しにくいことを示している。 $4d_{3z^2-r^2}$  軌道の球状の節 (Table 2 動画, No. 9) の正答率が低いのは、円錐面の節の共存のために球面が認識しにくくなっていることを示している。

以下に  $4p_x$  軌道,  $4d_{3z^2-r^2}$  軌道を例にとり、数式 (13) および (15) から節 (関数値が 0 となる面) の形状を導き、数式と画像の対応付けをする過程を示す。

数式 (13) はいくつかの項の積で表わされている。すなわち各項のうち、どの 1 項でも 0 になれば関数値全体も 0 になる。そこで、それぞれの項を見ると第 1 項と第 3 項は 0 になる可能性はない。第 2 項は 0 になる可能性があるので 2 次方程式 (20)

$$80 - 20r + r^2 = 0 \quad (20)$$

を  $r$  について解くと、解 (21) が得られる。

$$r = 10 \pm 2\sqrt{5} \quad (21)$$

概算すると  $r = 5.53 \text{ au}$ ,  $r = 14.47 \text{ au}$  となる。このことから、節が半径 5.53 au と 14.47 au の 2 つの球面であることが示される ( $1 \text{ au} = 0.5292 \text{ \AA} = 52.92 \text{ pm}$ )。断面表示 (Figure 2) では、左から 2 列目最下段の図において、これらは暗い 2 つの同心円で示され、等値曲面表示 (Figure 1-1) では、左から 1 列目上から 3 段目で示される図において、異なる符号の等値曲面 (異なる色で表示) の間に球面状の曲面が存在する可能性があるものとして理解できる。

数式 (13) の第 4 項から式 (22) が得られる。

$$x = 0 \quad (22)$$

このことから残るもう 1 つの節は  $YZ$  平面であることが示される。Figure 2 (左から 2 列目最下段) では、これは中央にある上下方向の暗い線で示され、Figure 1-1 (左から 1 列目上から 3 段目) では、ハッチングをつけた 2 つの面の中央の面の存在を想像すれば理解できる。

今回の問の中でもっとも正答率が低かったのは、 $4d_{3z^2-r^2}$  軌道の節の形状についての問 (Table 2 動画, No. 10) であった。 $4d_{3z^2-r^2}$  軌道 (Figure 3 の右側) では 2 種類の節 (円錐面と球面) が存在しわかりにくいので、節が円錐面のみ  $3d_{3z^2-r^2}$  軌道 (Figure 3 の左側) を先に説明する。

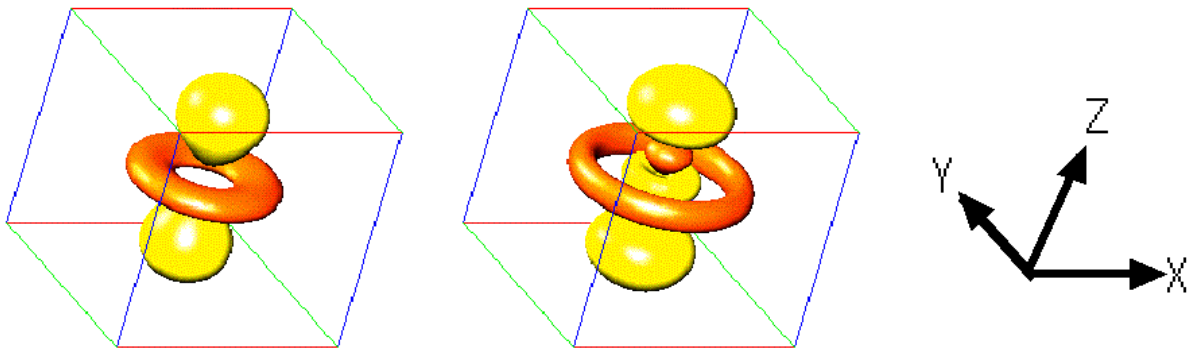


Figure 3. Isosurfaces of  $3d_{3z^2-r^2}$  (left) and  $4d_{3z^2-r^2}$  (right) hydrogen atomic orbitals

$3d_{3z^2-r^2}$  軌道の数式 (7) は 3 個の項に分けられる．この中で第 1 項と第 2 項は 0 になる可能性はない．第 3 項から式 (23) の 2 次方程式

$$3z^2 - r^2 = 0 \quad (23)$$

をたててそこに，式 (24)

$$z = r \cos \theta \quad (24)$$

を代入にして  $\theta$  について解くと

$$3r^2 \cos^2 \theta - r^2 = 0 \quad (25)$$

$$\cos \theta = \pm 1 / (\sqrt{3}) \quad (26)$$

となる． $\theta$  を概算すると  $\pm 54.7$  度である．この解は，節が原点から  $Z$  軸の正方向及び負方向に広がる 2 つの円錐面であることを示している．

同様にして， $4d_{3z^2-r^2}$  軌道の数式 (15) の第 4 項 ( $3d_{3z^2-r^2}$  軌道の数式の第 3 項と同じ) から，節は前項と同じ 2 つの円錐面であることがわかる．別に，第 2 項から半径 12 au の球面も節であることが示される．この軌道の節に関する問において，静止画では正答率 0 % であったが，対話型動画の場合は正答率 25 % (球面)，および 14 % (円錐面) であった (Table 2 動画, No. 9, No. 10)．このことは，今回の動画 (Figures 1-1, 1-2) では節を明示していないにもかかわらず，動画を操作することにより，節についての理解に達した者がいたことを示している．動画表示は，以前の報告 [8] とは異なり，問 2 のような数式の理解を問う問題に関しても有効な場合があることが示された．

### 3.4 今後の課題

今回の動画では，正負の等値曲面は表示しているが，節 (原子軌道関数値が 0 の等値曲面) は表示していない．このため，節の数や形状の違いによる認識のしやすさにおいて静止画のみ

をたよりにする場合とは差があるという結果となった。節をメッシュや半透明で表示する工夫も、球面状の節が重なると困難になる。等値曲面と節の同時表示系に節を突き破って内部を観察する等の工夫を付け加え、原子軌道の認識に役立つ新しい動画を作成する試みについては別に報告した [11]。

## 4 結論

原子軌道の可視化画像とそのもととなる数式との対応をとることにより、軌道自身の形状と数式の関係、節の形状と数式の関係、数式の理解の手助けとなる。この際、対話型動画の利用が特に有効であることがわかった。

今回の研究にさいして、御助言をいただいたメディア教育開発センターの菊川健教授および近藤智嗣助手に感謝いたします。

## 参考文献

- [1] J. M. Zuo, M. Kim, M. O'Keeffe, J. C. H. Spence, Direct observation of *d*-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu<sub>2</sub>O, *Nature*, **401**, 49-52 (1999).
- [2] M. Jacoby, Picture-perfect orbitals, *Chem. Eng. News*, **77**, No. 36, 9 (1999).
- [3a] 現代化学編集部, 電子オービタルが見えた, 現代化学, No. 345, 11-12 (1999).
- [3b] 宇田川康夫, 高橋正彦, 電子オービタルの形を見る, 現代化学, No. 352, 32-40 (2000).
- [4] たとえば, 以下の URL で参照可能:
  - a) Orbital Viewer, "A program for drawing orbitals. This has many features, and comes in both a Windows version and a command-line interface version."  
url = (<http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>)
  - b) Atom in a Box, "Real-Time Visualization of the Quantum Mechanical Atomic Orbitals"  
url = (<http://www.physics.ucla.edu/~dauger/orbitals/>)
  - c) VRML(Virtual Reality Modeling Language) の利用  
url = (<http://quanta0.nihs.go.jp/vrml/>)
  - d) QuickTime Movie の利用  
url = (<http://www-wilson.ucsd.edu/education/qm/Orbitals.html>)
- [5] 時田澄男, 目で見る量子化学, 講談社 (1988).
- [6] 時田澄男, 渡部智博, 木戸冬子, 前川仁, 下沢隆, 水素原子の原子軌道の可視化, *J. Chem. Software*, **3**, 37-48 (1996).  
url = (<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v3n1/a5/abst.html>)

- [7] QuickTime VR の Web site,  
url = (<http://www.apple.co.jp/quicktime/qtvr/>)  
url = (<http://www.apple.com/quicktime/qtvr/>)
- [8] 時田澄男, 杉山孝雄, 近藤智嗣, 菊川健, QTVR を用いた水素原子の原子軌道の動画表示, *J. Chem. Software*, **5**, 129-136 (1999).  
url = (<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v5n3/a4/abst.html>)  
url = ([http://www.apc.saitama-u.ac.jp/~ygosei/atomic\\_orbital.htm](http://www.apc.saitama-u.ac.jp/~ygosei/atomic_orbital.htm))
- [9] R. M. Whitnell, Multimedia Chemistry Lectures, *J. Chem. Educ.*, **71**, 721-725 (1994).
- [10] 時田澄男, 量子化学教育におけるコンピュータの活用, *化学工業*, **42**, 377 (1991).
- [11] 時田澄男, 杉山孝雄, 細矢治夫, *J. Computer Aided Chemistry*, **1**, 68-75 (2000).

## Interactive Animation to Facilitate Understanding of the Visual Characteristics of Atomic Orbital Wavefunctions

Sumio TOKITA\* and Takao SUGIYAMA

Department of Applied Chemistry, Faculty of Engineering, Saitama University  
255 Shimo-Ohkubo, Urawa, Saitama, 338-8570 JAPAN

\*e-mail: [tokita@apc.saitama-u.ac.jp](mailto:tokita@apc.saitama-u.ac.jp)

Multimedia have been thought to be most successful in illustrating concepts, and least successful when applied to the derivation of equations. We have developed interactive animation of hydrogen atomic orbitals using a software called QuickTime Virtual Reality (QTVR). The use of these pictures was shown to increase student interest and participation in the process to understand the mutual relation of the shapes with the mathematical functions of atomic orbitals.

**Keywords:** Atomic Orbital Wavefunction, Interactive Animation, QTVR, Virtual Reality