

原子軌道の様々な可視化方法の組合せとその波動性の表現

時田 澄男^{a*}, 木戸 冬子^a, 杉山 孝雄^a, 渡部 智博^a, 時田 那珂子^b, 東 千秋^b

^a 埼玉大学工学部応用化学科, 〒 338-8570 浦和市下大久保 255

^b 放送大学東京第一学習センター, 〒 154-0002 世田谷区下馬 4-1-1

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

(Received: April 6, 2001; Accepted for publication: July 5, 2001; Published on Web: November 29, 2001)

水素原子の原子軌道をマルチメディア技術(静止画および動画)を用いて種々の表示方法(等値曲面, 擬三次元, 等高線, 断面図)で可視化するとともに, 対応する力学的振動についても同様に可視化した. 可視化結果を, CD-R (Compact Disk Recordable) に格納した. ランダム呼び出し可能な媒体の機能を使用して, 可視化データを任意に組合せて表示して対比させることにより, 節(節面)などの波の特徴を認識し, 原子軌道の波動性の理解を深めるよう工夫した.

キーワード: Hydrogen Atom, Atomic Orbital, Visualization, Combinatorial Representation, Isosurfaces, Pseudo-three-dimensional representations, Contour map, Cross sections, Oscillating Circular Membrane

1 序論

原子軌道の表示については, 多くの研究者がその重要性を述べて可視化の研究をおこなっている [1–16]. これらの多くは, 原子軌道の形に重点を置いて説明したものであり, 力学的振動 [17] との対比を用いて波動性を強調する研究は少ない [18–20]. 特に, 波動性の説明に使用されている表現の大部分は静止画であり, 動画を用いた例はほとんどない [21]. 一方, 原子軌道の形を動画で表現する試みは増加している [22, 23]. R. M. Whitnell らは, 原子軌道の等値曲面や断面を QuickTime Movie [24] で表現し [13], D. Smith は, 原子軌道の等値曲面を MPEG 動画 [25] で表現した [26]. さらに, 近年インターネット上では, 教育機関を中心に量子化学の教材としての原子軌道の静止画や動画での公開が進んでいる [27].

最近, CD-ROM ドライブ [28] の普及により, CD-R [29] や CD-RW [30] など, FD (Floppy Disk) と比べて大量のデータの書き込みが可能な記録媒体が, ソフトウェアの配布用として容易かつ安価に利用出来るようになった.

我々は, これらの記録媒体がランダム読み出し可能

であることに注目し, 原子軌道や力学的振動の可視化結果を様々な組合せで表示し, 軌道における波動性の認識に役立つ方法について研究した.

2 研究方法

2.1 可視化のための環境

水素原子の 1s ~ 6h 原子軌道のうちいくつかを選び, 等値曲面, 擬三次元, 等高線表示, 断面図およびこれらの組合せの画像を作成した.

静止画は, AVS 5.1 [31] と PV WAVE Advantage 1.0 [32] を使用して作成した. 今回使用した AVS のネットワークは, 前回 [17] と同じである.

一部の画像には, Adobe Photoshop 3.0J [33] を用いて説明を付け加えた. 静止画から動画を作成するには Adobe Premiere 5.0 [34] を用いた. 編集には HTML [35] を用い, ブラウザ [36] での閲覧を可能とした. また, 近年 QTVR [37] という動画を任意に操作できる技術が注目されている. QTVR で作成した画像 [22] も組合せ画像のひとつとして使用した. 但し, QTVR を使用するためにはアドオンソフトウェア [38] が必要で

ある。

PV WAVE での作業は、PC/AT (Personal Computer /Advanced Technology) 互換機上で OS (Operation System) として Windows NT 3.5 を使用して行った。AVS は、当初 Silicon Graphics Inc. の EGWS (Engineering Graphic WorkStation) である IRIS INDIGO R4000 XS24Z 上で使用していたが、後に PC でも動作可能になったため、後半は PC 上で OS として Windows 2000 Professional を使用して行った。

2.2 静止画

PC で一般的に用いられる静止画フォーマットとしては、BMP [39], GIF [40], JPEG [41], PNG [42], TIFF [43] などがある。インターネットでは、GIF または JPEG が一般的であり、アドオンソフトウェア無しで表示できる。また、Windows 95/98/NT/2000 (以下、Windows と記す) においては、BMP が標準的なフォーマットであるため、Windows 用のブラウザである Internet Explorer [44] などでは、GIF や JPEG の他に BMP もアドオンソフトウェア無しで表示できる。扱える色数は、GIF が 8bit (256 色) であるのに対し、BMP と JPEG はフルカラー [45] まで扱える。GIF や JPEG は、圧縮処理されるため、ファイルサイズが BMP より小さくなる。また、JPEG は、不可逆圧縮 [46] を採用しているために元画像を完全には再現出来ない。このため、JPEG で編集や保存を繰り返すと画像が劣化する。本研究では、フルカラーの画像を採用したため、編集時に BMP を用いて、最後に JPEG で保存する方法をとった。

2.3 動画と大容量媒体

動画は、画像を連続的に表示するために多くの情報を表現できる反面、静止画と比べて情報量が多くなり、1 つのファイルが FD に入りきらないサイズ (数 Mbytes) となる場合が少なくない。このため、MO [47], CD-R, CD-RW, DVD-R [48], DVD-RAM [49], DVD-RW [50] などの大容量で書き込み可能な媒体が必要となる。本研究では、PC に付属している CD-ROM ドライブでの再生が可能で、FD と比べて大量のデータが書き込み、かつビット単価が安い CD-R を配布用の媒体として選択した。

PC 上で一般的に用いられる動画フォーマットとしては、AVI [51], QuickTime Movie, MPEG がある。このうち、QuickTime Movie と MPEG は、動画を再生す

る際にアドオンソフトウェアが必要である。このため、Windows の標準的な環境でアドオンソフトウェアを必要とせずに再生できる AVI を標準の動画フォーマットとして選択した。

3 結果と考察

3.1 軌道と振動の対比

我々は、水素原子の原子軌道と、周囲を固定した円形膜の力学的振動を対比させることにより、原子軌道の波動性の理解を助けることを目的としたプログラムを開発した。

プログラムは、Figure 1 に示すように、(1) さまざまな可視化表現 (可視化表現一覧), (2) 断面表示, (3) 節面表示から構成されている。原子軌道の波動性を様々な視点から円形膜振動と比較して確認することができるよう工夫した。

3.2 原子軌道の様々な可視化表現と周囲を固定した円形膜の力学的振動の対比

Figure 2(a) は、 $2p_x$ 原子軌道の等値曲面表示である。等値曲面は、原子軌道が特定の関数値となる面で、図 2(a) では、 $2p_x$ 原子軌道が -1.40×10^{-2} , 0 , $+1.40 \times 10^{-2}$ $\text{au}^{-3/2}$ となる面を表している。Figure 2(a) をクリックすると動画が再生され、角度を変えて等値曲面を見ることができる。動画のスナップショットを Figure 3 に示す。Figure 2(b) は、 $2p_x$ 原子軌道の等値曲面表示を中央に描き、 z に一定値を与えたときの断面の等高線を上方の平行四辺形に投影した表示である。Figure 2(b) をクリックすると動画が再生され、 z の値を変えた時の断面の等高線の変化を見ることができる。動画のスナップショットを Figure 4 に示す。Figure 2(c) は、Figure 2(b) の z に 0 を与えた場合の断面 (波動関数の二次元平面 (XY 平面) における関数値変化) の変位量を濃淡で示した図である。Figure 2(b) は、Figure 2(a) と Figure 2(c) の関係を表している。Figure 2(d) は、Figure 2(b) の z に 0 を与えた場合の断面について、等高線表示 (Figure 2(d) 上)、二次元平面における関数値変化を擬似的に三次元のグラフに表示した擬三次元表示 (Figure 2(d) 中)、変位量を濃淡で示した図 (Figure 2(d) 下) を組合せて表示したものである。Figure 2(d) をクリックすると、動画が再生できる。Figure 2(d) の上、中、下は、同じ断面を異なった方法で表現したものである。

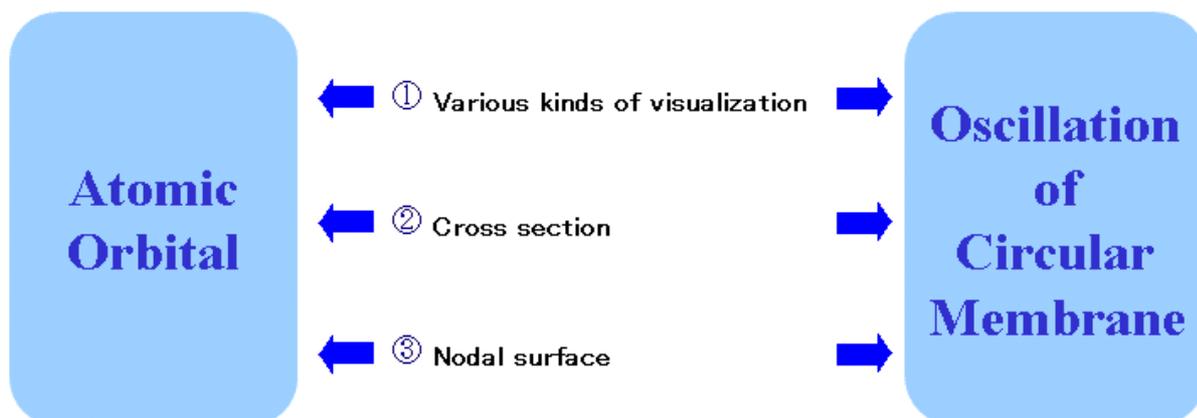


Figure 1. Comparison of the atomic orbital with the oscillation of a circular membrane.

Figure 2(e) は、周囲を固定した円形膜におこる定常波 (力学的振動) のうちの 1 つ ($i=1, j=1$) の最大変位における変位量 [52] をベッセル関数でシミュレートして濃淡で示した図である。Figure 2(f) は、同じ定常波の動画の一画面であり、Figure 2(e) と同じ最大変位における変位量を見取り図で表したものである。Figure 2(e), (f) と Figure 2(a) ~ (d) の対応関係については次節で述べる。

Figure 2 は、メニュー (Figure 1) の (1) を選択すると表示される。

3.3 原子軌道の断面で見る波動性と周囲を固定した円形膜の力学的振動との対応

波には、一定の場所を上下するだけで進行しない定常波 (Stationary Wave) と、正弦波のように伝播していく進行波 (Progressive Wave) がある。定常波とは、弦や膜の振動のように決まった範囲内に局在する固有振動のことである。

Figure 5(a) は、1s 原子軌道の断面を Figure 2(d) と同じ方法で表示したもので、等高線表示 (Figure 5(a) 上), 擬三次元表示 (Figure 5(a) 中), 等高線表示における関数値に適当な色を割り当てて断面の変位量を濃淡で示した図 (Figure 5(a) 下) を組合せて表示したものである。擬三次元表示でも等高線表示でも、関数値を描

画する際の視点は同じである。Figure 5(a) をクリックすると動画が再生できる (動画のスナップショットを Figure 6 に示す) 。

Figure 5(b) は、周囲を固定した円形膜におこる定常波 ($i=1, j=0$) の最大変位について変位量を濃淡で示した図で、Figure 5(a) の上下と類似していると見誤られ易い。しかし、Figure 5(b) は、二次元の膜の力学的振動における実際の変位量をあらわしているのに対し、Figure 5(a) は、三次元の波動性を持つ原子軌道の一断面における関数値を表している。Figure 5(c) は、Figure 5(b) と同じ定常波の動画の一画面である。Figure 5(a) の擬三次元表示と Figure 5(c) の間には類似性が見られるが、物理的意味が異なるのは前述したとおりである。すなわち、擬三次元表示 (Figure 5(a)) は、波動関数の二次元平面における関数値変化を擬似的に三次元のグラフに表示したもので、Figure 5(c) のように変位量を表すものではない。Figure 5(c) をクリックすると動画が再生できる (動画のスナップショットを Figure 7 に示す) 。

三次元の原子軌道の断面の関数値をいろいろな方法で表示することにより、力学的振動との類似性が見られる理由は、二次元の力学的振動 (定常波) の断面図に、一次元の定常波のパターンが現れることに対応している。

Figure 5 は、メニュー (Figure 1) の (2) を選択すると表示される。

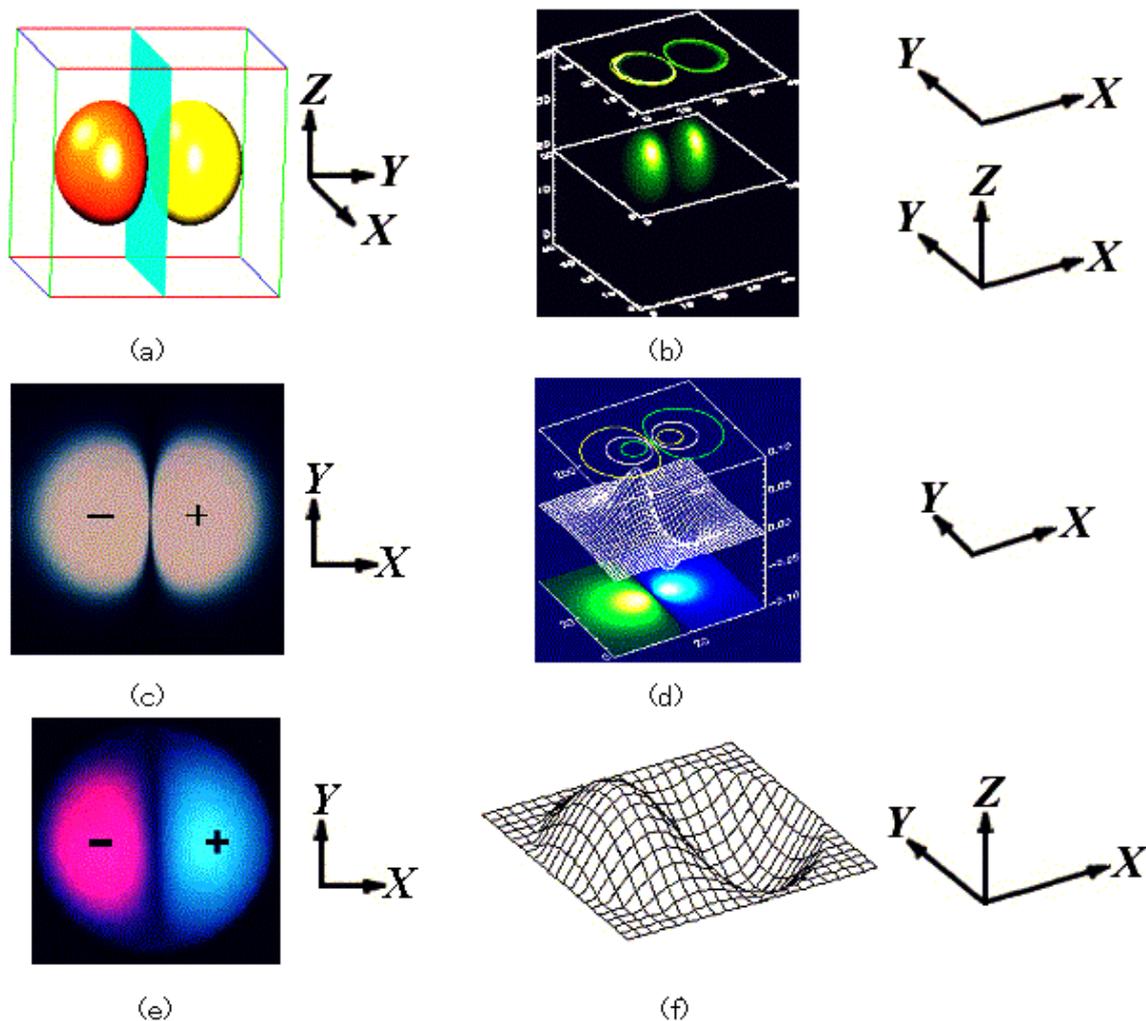


Figure 2. Various kinds of visualization on the atomic orbital of the hydrogen atom (a-d) and the oscillation of the circular membrane (e, f): (a) Representing isosurfaces of a $2p_x$ atomic orbital; (b) Representing isosurfaces of the square of a $2p_x$ atomic orbital together with an animation of their cross sections; (c) The cross section of a $2p_x$ atomic orbital; (d) The pseudo-three-dimensional representation of a $2p_x$ atomic orbital and the contour map of a $2p_x$ atomic orbital; (e) Representing the maximum displacement of the oscillating circular membrane at $i=1$, $j=1$ by Bessel function; (f) Snapshot of the simulation of an oscillating circular membrane at $i=1$, $j=1$ by Bessel function

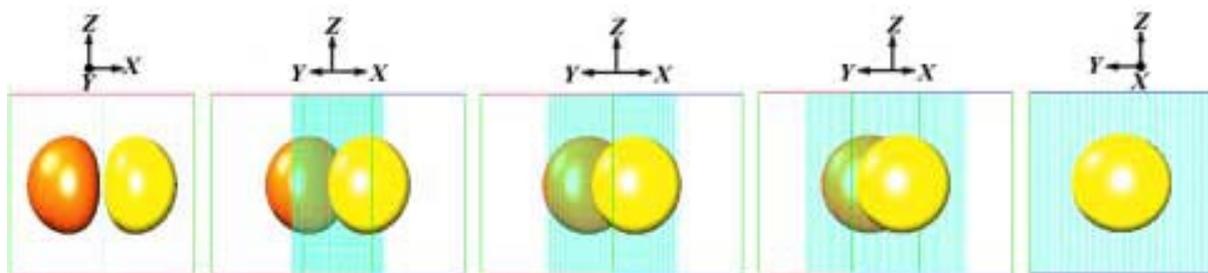


Figure 3. An animation of the isosurfaces of a $2p_x$ atomic orbital of the hydrogen atom.

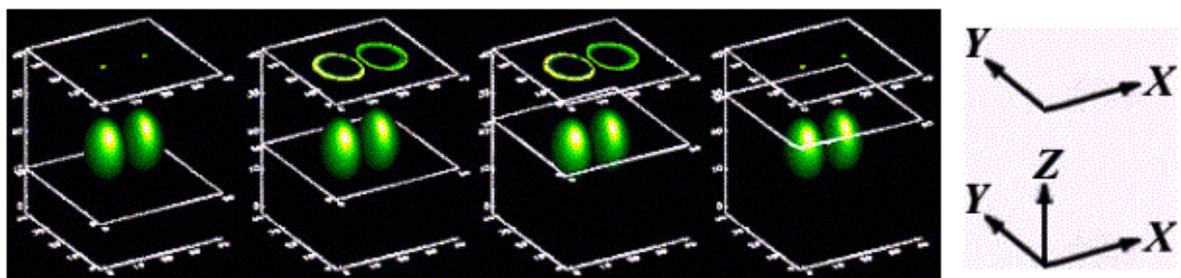


Figure 4. Representing isosurfaces of the square of a $2p_x$ atomic orbital of the hydrogen atom together with an animation of their cross sections.

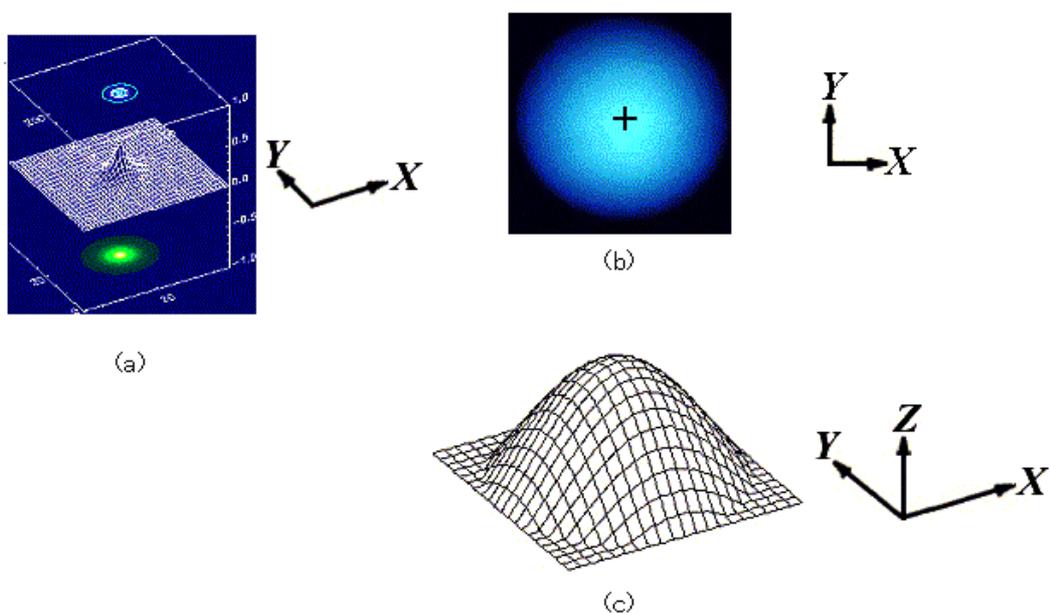


Figure 5. The cross section on the atomic orbital of the hydrogen atom (a) and the oscillation of the circular membrane (b, c): (a) The pseudo-three-dimensional representation of a $1s$ atomic orbital and contour surfaces of a $1s$ atomic orbital; (b) Representing the maximum displacement of an oscillating circular membrane at $i=1, j=0$ by Bessel function; (c) The snapshot of the oscillating circular membrane at $i=1, j=0$ by Bessel function.

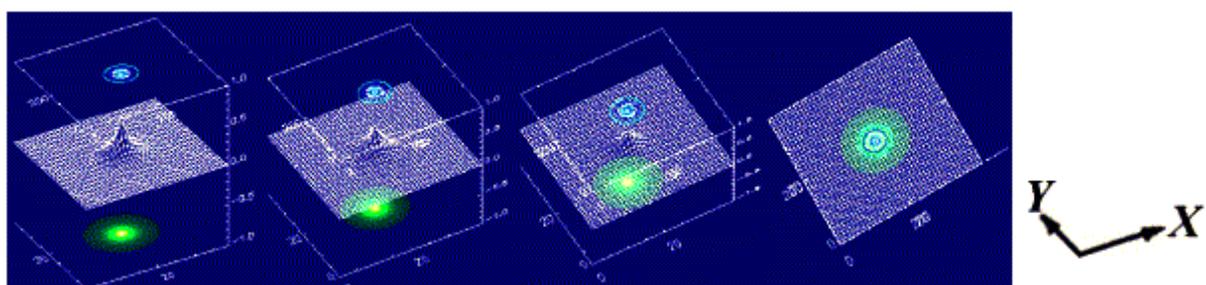


Figure 6. An animation on the pseudo-three-dimensional representation of a $1s$ atomic orbital and contour surfaces of a $1s$ atomic orbital in variation with different viewpoints.

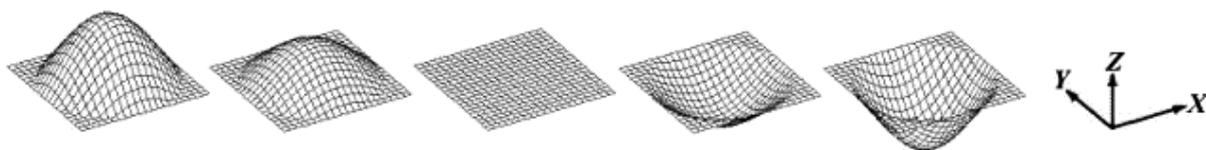


Figure 7. An animation on the oscillating circular membrane at $i=1, j=0$ by Bessel function.

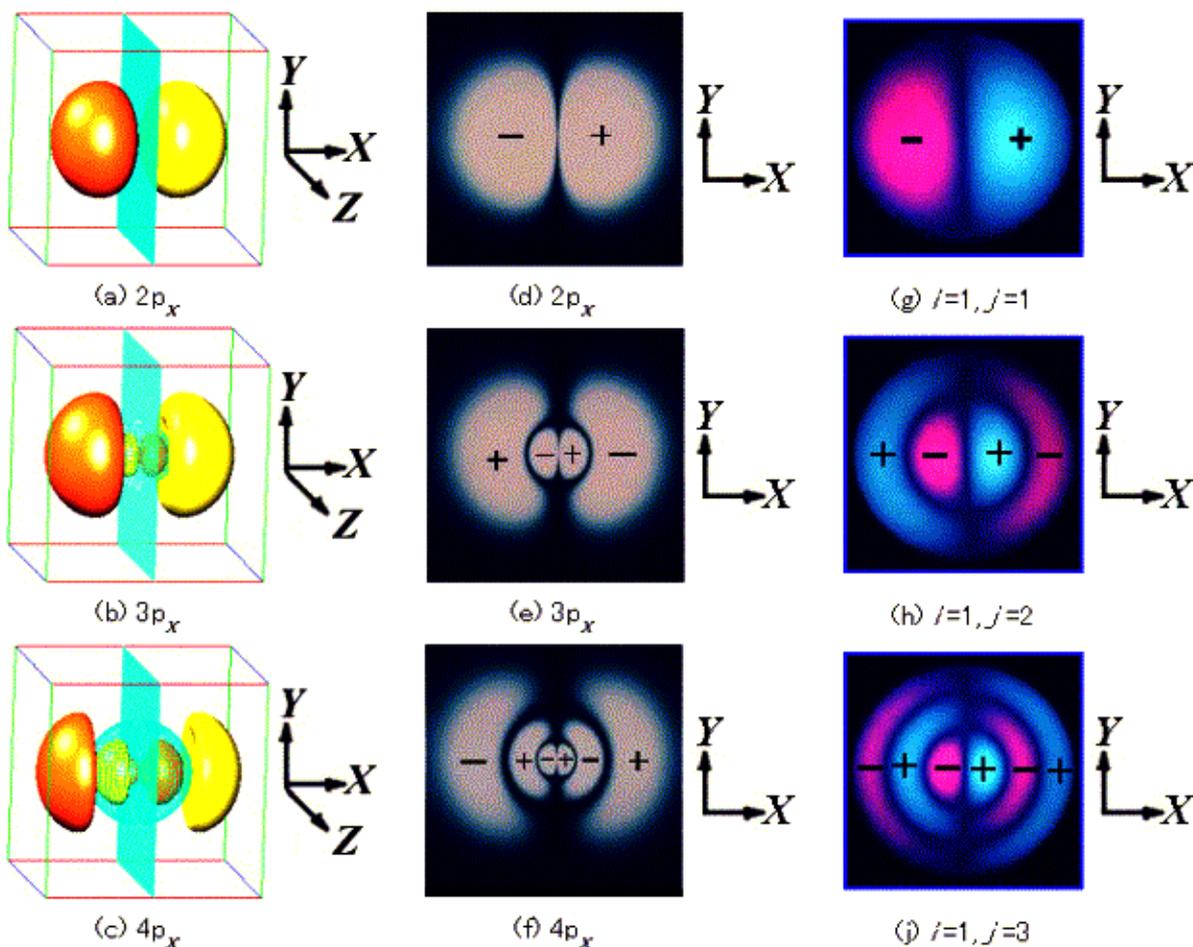


Figure 8. The nodal surfaces on the atomic orbital of the hydrogen atom (a-f) and the oscillation of the circular membrane (g-j): Isosurfaces of a (a) $2p_x$, (b) $3p_x$, and (c) $4p_x$ atomic orbital; The cross sections of a (d) $2p_x$, (e) $3p_x$, and (f) $4p_x$ atomic orbital; Representing the maximum displacement of the oscillating circular membrane at (g) $i=1, j=1$, (h) $i=1, j=2$, (i) $i=1, j=3$ by Bessel functions.

3.4 原子軌道の節面で見える波動性

原子軌道の定常波には、時刻によらずに振幅が常に0になる点(節, Node)と、節と節の間に振幅が最大になる点(腹, Antinode)がある。波動方程式を解いて得られる波動関数は、定常波特有の節面(Nodal Plane):

その両面で原子軌道の符号が変化する面、すなわち軌道関数の値が0となる面)を持つ。したがって、両者のパターンを比較することにより、波としての性質(波動性)の類似性を見ることが可能となる。節面の総数は、主量子数を n とすると、 $n-1$ で表され、角度方向の節面数は方位量子数 l と同じになる。また、動径方向の

節面の数は、 $n - l - 1$ である。節面は、原子軌道の波動性を表すために重要である。

Figure 8 は、 $2p_x$, $3p_x$, $4p_x$ の原子軌道の等値曲面表示 (Figure 8(a), (b), (c)) とこれらの z に 0 を与えた場合の原子軌道の断面について、絶対値の大きさを濃淡で示した図 (Figure 8(d), (e), (f)) について、対応する周囲を固定した円形膜におこる定常波の最大変位における変位量を濃淡で示した図 (Figure 8(g), (h), (i)) を比較表示させたものである。Figure 8(a), (b), (c) のメッシュは、節面を表現している [54]。Figure 8(d), (e), (f) は、+ から - への符号変化から、その間にある節面を表現している。Figure 8 からは、主量子数の増加とともに節面が規則的に増加する様子が理解できる。また、Figure 8(d), (e), (f) と Figure 8(d), (e), (f) の間には、明らかな類似性が見られる。

Figure 8 は、メニュー (Figure 1) の (3) を選択すると表示される。

4 結論

様々な原子軌道、力学的振動の静止画や動画を、CD-R などに記録して、利用者が対話的に操作できるソフトウェアを作成した。このソフトウェアにより、以下のことが可能となった。

1. 原子軌道の様々な可視化表現における対比が可能となった。
2. 原子軌道の断面や節面で見える波動性と周囲を固定した円形膜の力学的振動との対応が可能となった。
3. 静止画のみで全体が把握できない原子軌道の等値曲面の形について、見る位置を変えて動画にすることにより、わかりやすく表現することが可能になった。また、円形膜の力学的振動については、動画で表現することによって波動性について具体的な表現することが可能になった。

本ソフトウェアは、原子軌道を可視化することにより、数式との対応が容易になる。また、本ソフトウェアを、量子化学や物理化学の授業に取り入れることにより、原子軌道の波動性の理解が深まることが期待できる。

参考文献

- [1] 森野米三, 藍原有敬, 現代物理化学講座 2 原子の構造と化学結合, 化学同人 (1967).
- [2] 井田幸次郎, 粒子性・波動性, 裳華房 (1969).
- [3] G. I. Brown 著, 鳥居泰男訳, 初等化学結合論, 培風館 (1973).
- [4] M. Orchin, H. H. Jaffe 著, 中原勝儼, 広田穰訳, 化学結合論 - 分子軌道と対称性 -, 培風館 (1974).
- [5] J. P. Lowe, *Quantum chemistry*, Academic Press (1978).
- [6] 吉田政幸, 分子軌道法をどう理解するか, 化学同人 (1979).
- [7] 菊池修, 鐸木啓三, 電子の軌道, 共立出版 (1984).
- [8] 平野康一, 量子化学の基礎, 共立出版 (1986).
- [9] 時田澄男, 目で見る量子化学, 講談社 (1987).
- [10] G. Breneman, *Computer in Science*, **1**, 18-22 (1989).
- [11] 小出昭一郎, 量子論 (改訂版), 裳華房 (1990).
- [12] 時田澄男, 渡部智博, 木戸冬子, 前川仁, 下沢隆, *J. Chem. Software*, **3**, 37-48 (1996).
<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v3n1/a5/abstj.html>
- [13] R. M. Whitnell, E. A. Fernandes, F. Almasszadeh, J. J. C. Love, B. M. Dugan, B. A. Sawrey, K. R. Wilson, *J. Chem. Educ.*, **71**, 721-725 (1997).
http://science.widener.edu/svb/at_orbital/orbitals.html
- [14] 河原林研, 数理科学, **440**, 34-40 (2000).
- [15] 宇田川康夫, 高橋雅彦, 現代化学, **352**, 32-40 (2000).
- [16] 西本吉助, 化学と工業, **53**, 569-576 (2000).
- [17] W. C. Elmore, M. A. Heald, *Physics of Waves*, McGraw-Hill (1969).
- [18] 時田澄男, 木戸冬子, 杉山孝雄, 細矢治夫, *J. Chem. Software*, **7**, 29-46 (2001).
<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v7n1/a2/abstj.html>

- [19] G. C. Pimentel, R. D. Spratley 著, 千原秀昭, 大西俊一訳, 化学結合 - その量子論的理解 -, 化学同人 (1974).
- [20] 時田澄男, 現代化学, **190**, 43-45 (1987).
 時田澄男, 現代化学, **191**, 27-29 (1987).
 時田澄男, 現代化学, **193**, 51-53 (1987).
 時田澄男, 現代化学, **194**, 51- 53 (1987).
 時田澄男, 現代化学, **208**, 51-54 (1988).
 時田澄男, 現代化学, **209**, 46-49 (1988).
 時田澄男, 現代化学, **211**, 57- 61 (1988).
 時田澄男, 現代化学, **213**, 50-55 (1988).
- [21] 時田澄男, 濱田嘉昭, 計算化学補助ビデオ教材 - オービタルとは何か - 水素原子の原子軌道, 放送大学 (1992).
- [22] 時田澄男, 杉山孝雄, 近藤智嗣, 菊川健, *J. Chem. Software*, **5**, 129-136 (1999).
<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v5n3/a4/abstj.html>
- [23] 時田澄男, 杉山孝雄, *J. Chem. Software*, **7**, 87-98 (2001).
<http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/jcs/v7n2/a5/abstj.html>
- [24] QuickTime Movie とは, Apple Computer Inc. が開発した動画と音声と同時に扱うソフトウェア QuickTime の動画フォーマットである.
- [25] MPEG (Moving Pictures Experts Group) とは, ISO (International Organization for Standardization, 国際標準化機構) の下部組織として設置された団体によって標準化された動画の規格である. 圧縮率は高いが, 再生するのにアドオンソフトウェアを必要とする.
- [26] Chemistry Animation Project;
<http://bond.caltech.edu/index.html>
- [27] a) http://www.chem.latech.edu/~ramu/ramu_aorbs.html
 b) <http://www.chem.brown.edu/chem50/Notes/Atomic-Orbital.html>
 c) <http://sugagw.ci.noda.sut.ac.jp/~hashimo/Chemistry/Orbital2/index.html>
 d) <http://www.colby.edu/chemistry/OChem/demoindex.html>
- e) <http://wunmr.wustl.edu/EduDev/Orbitals/movie.html>
 f) http://wunmr.wustl.edu/EduDev/Orbitals/Old_Orbitals/
 g) http://www.urban.ne.jp/home/ichiya/vrml/VRML_index.html
 h) <http://yip5.chem.wfu.edu/yip/VR/3DAO.html>
 i) <http://dauger.com/orbitals/index.html>
 j) <http://www.wfu.edu/~yipcw/yip/organic/movie-index.html>
 k) <http://www-wilson.ucsd.edu/education/gchem/atomorbs/>
 l) http://www.knowledgebydesign.com/products/ao_millikan.html
 m) <http://qlink.queensu.ca/~7esk/index.html>
 n) <http://www.albany.net/~cprimus/orb/index.html>
 o) [http://reseda-hs9.lausd.k12.ca.us/Magnet/kmcmahon/QMA%20HTML/QMA_Text_\(WP\).html](http://reseda-hs9.lausd.k12.ca.us/Magnet/kmcmahon/QMA%20HTML/QMA_Text_(WP).html)
 p) http://www.chem.ufl.edu/~itl/2045_s99/lectures/lec_10.html
 q) <http://www.science.nus.edu.sg/~webchm/1101/1101ch1.htm>
 r) <http://www.chem.uidaho.edu/~honors/schrod.html>
 s) <http://www.c-park.com/oparkold/quantum/chap1/chap1.html>
- [28] CD-ROM (Compact Disk Read Only Memory) とは, 製造工程で一度データを書き込むと, 追加・消去が行えなくなる CD (Compact Disk) で, 容量は 650 Mbytes が主流である.
- [29] CD-R (Compact Disk Recordable) とは, データを一度だけ書き込める CD で, 容量は 650 Mbytes が主流である. 追加記録は可能だが書き込んだデータは消去できない.
- [30] CD-RW (Compact Disk Re-writable) とは, 書き換え可能な CD で, 容量は 650 Mbytes が主流である. 相変化記録方式を採用している.
- [31] AVS (Application Visualization System) とは, Advanced Visual Systems Inc. が開発した科学技術計算結果を可視化するためのソフトウェアであり, 幾何データ, イメージデータ, ボリュームデータ, グラフの表示, およびこれらの統一的な可視化機能を持つ. 入力から画像表示までのデータの処理

と流れを、長方形で示すモジュールと呼ばれる処理とそれらを結ぶ線からなるネットワークと呼ばれるグラフィカルなプログラミング表現が特徴である。

- [32] PV WAVE とは、Visual Numerics Inc. が開発した科学技術計算結果の可視化ソフトウェアである。様々な二次元グラフ、等高線、鳥瞰図、ベクトル場、さらにはイメージ処理、動画処理など多種多様な可視化機能を持ち、コマンドベースでのプログラミングが可能である。あらかじめ用意された可視化用の関数を組合せてプログラミングすることにより、ユーザ独自の可視化表示が出来る。
- [33] Adobe Photoshop とは、Adobe Systems Inc. が提供している画像編集用のアプリケーションソフトウェアである。
- [34] Adobe Premiere とは、Adobe Systems Inc. が提供しているデジタルビデオ編集用のアプリケーションソフトウェアである。
- [35] HTML (Hyper Text Markup Language) とは、インターネットの Web ページを記述するために用いられる言語であり、Web ページ中に画像、動画、などを埋め込むことが出来る。HTML で記述された文書を開覧するにはブラウザが必要である。
- [36] ブラウザ (Browser) とは、インターネットの Web ページを開覧するためのソフトウェアであり、Internet Explorer や Netscape Navigator / Netscape Communicator などがある。
- [37] QTVR (QuickTime Virtual Reality) とは、Apple Computer Inc. が開発した動画と音声を同時に扱うソフトウェア QuickTime で扱う動画フォーマットの 1 つであり、マウス操作により対話的に画像を操作できるため、VR (Virtual Reality) を容易に実現できる。
- [38] アドオンソフトウェア (Add-on Software) とは、アプリケーションソフトに追加して機能を拡張するソフトのことである。例えば、Internet Explorer などのブラウザにアドオンソフトウェアを追加して使うことにより、標準機能では扱えないフォーマットの静止画や動画を扱うことができる。
- [39] BMP (Bitmap) とは、Windows 標準の静止画ファイルフォーマットで、画像の各点(ドット)に RGB の色情報を割り付けて表現する方式である。非圧縮のものとして RLE (Run Length Encoded) という符号化アルゴリズムで圧縮したものがあるが、非圧縮のものが一般的である。
- [40] GIF (Graphics Interchange Format) とは、CompuServe Interactive (CSi) が開発した静止画ファイルフォーマットである。
- [41] JPEG (Joint Photographic Experts Group) とは、画像圧縮技術の標準化を推進している ITU-TS (International Telecommunication Union Telecommunication Standardization sector, 旧 CCITT: Consultative Committee for International Telephony and Telegraphy) と ISO (International Organization for Standardization) の合同の標準作成委員会 (Joint Photographic Expert Group) で定めた画像圧縮方式または JPEG 圧縮を用いた静止画ファイルフォーマットである。
- [42] PNG (Portable Network Graphics) とは、W3C (World Wide Web Consortium) がインターネットの標準フォーマットとして推奨している静止画ファイルフォーマットである。
- [43] TIFF (Tagged Image File Format) とは、Aldus Corp. (現在は Adobe Systems Inc. に併合) が開発した静止画ファイルフォーマットである。
- [44] Internet Explorer とは、Microsoft Co. が開発したブラウザである。
- [45] フルカラー (Full Color) とは、表示できる色数をあらかず言葉であり、True Color とも言われる。24bits で約 1677 万種類の色を表現する。
- [46] 不可逆圧縮とは、圧縮された画像を元に戻しても完全に元の画像に戻らないことを意味する圧縮方式である。フルカラーの画像を効率よく圧縮できる。
- [47] MO (Magneto Optical Disk) とは、レーザー光線で記録部分に熱を加え、磁界を変化させてデータを記録する光磁気ディスクである。媒体には、3.5 インチと 5 インチがあり、3.5 インチタイプの MO が一般的である。3.5 インチの容量は約 128 ~ 640 Mbytes で、5 インチの容量は 600 Mbytes ~ 2.6 GBytes である。

- [48] DVD-R (Digital Versatile Disk Recordable) とは、データを一度だけ書き込める DVD (Digital Versatile Disk) である。追加記録は可能だが書き込んだデータは消去できない。バージョン 1.0 規格の容量は、片面 3.95 GBytes であったが、バージョン 2.0 規格で、片面 4.7GBytes となった。
- [49] DVD-RAM (Digital Versatile Disk Random Access Memory) とは、書き換え可能な DVD である。バージョン 1.0 規格の容量は、片面 2.6 GBytes、であったが、バージョン 2.0 規格で、片面 4.7 GBytes となった。DVD-ROM (Digital Versatile Disk Read Only Memory) と規格が異なる為、DVD-ROM 専用ドライブでは読み込むことができない。
- [50] DVD-RW (Digital Versatile Disk Re-writable) とは、書き換え可能な DVD で、容量は片面 4.7 GBytes である。相変化記録方式を採用している。DVD-ROM と互換性があり、DVD-ROM ドライブで読み込むことが可能である。
- [51] AVI (Audio Video Interleaved) とは、Microsoft Co. が開発した動画フォーマットである。
- [52] 川橋正昭, 豊岡了, 加藤寛, 時田澄男, 目で見える力学, 講談社 (1990).
- [53] 時田澄男, 杉山 孝雄, 細矢 治夫, *Journal of Computer Aided Chemistry*, **1**, 68-75 (2000).
<http://jcac.jstage.jst.go.jp/>

A Combination of Various Visualization Methods of Atomic Orbitals and Representations of Their Wave Character

Sumio TOKITA^{a*}, Fuyuko KIDO^a, Takao SUGIYAMA^a, Tomohiro WATANABE^a,
Nakako TOKITA^b and Chiaki AZUMA^b

^aDepartment of Applied Chemistry, Faculty of Engineering, Saitama University
255 Shimo-Ohkubo, Urawa, Saitama, 338-8570 Japan

^bDepartment of Science and Liberal Arts, The University of the Air
4-4-1 Shimouma, Setagaya-ku, Tokyo, 154 -0002 Japan

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

This paper reports various kinds of visualization (isosurfaces, pseudo-three-dimensional representations, contour map, and cross sections) on the atomic orbitals of a hydrogen atom using multimedia techniques (animation and still image), and relation to visualization of the wave character by the oscillating circular membrane. These visualizations are very important, because they are suitable methods to understand the character of the atomic orbital wavefunctions. Interactive visualization methods on the wave character of the atomic orbitals of a hydrogen atom were investigated using large capacity and random accessible recording media, *i.e.*, CD-R (Compact Disk Recordable). The wave character of atomic orbitals, such as a node or a nodal surface, was represented by using their classical oscillator in contrast to the atomic orbitals of a hydrogen atom through the interactive operations on a computer.

Keywords: Hydrogen Atom, Atomic Orbital, Visualization, Combinatorial Representation, Isosurfaces, Pseudo-three-dimensional representations, Contour map, Cross sections, Oscillating Circular Membrane