演　　　題	n 次元の $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道に関する研究	
発　表　者 （所　属）	○木戸冬子（埼玉大工），細矢治夫（お茶の水女子大理），時田澄男（埼玉大工）	
連　絡　先	〒338-8570 埼玉県さいたま市下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 TEL: 048-858-3511/3516, FAX: 048-857-9653 E-mail: fkido@microsoft.com	
キーワード	n 次元, $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道，角部分，立体構造	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	n 次元の $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の角部分の式について，立体構造(Structure)，頂点(Vertex)，稜(Edge)，面(Face)，胞(Cell)の関係を明らかにした. n 次元の $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の一般式を示し, n 次元と $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の関係を数学的に体系化した.	
環　　　境	適応機種名	PC/AT 互換機
	ＯＳ名	Windows XP
	ソース言語	
	周辺機器	
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　　○未定	具体的方法

1. 目的

n 次元空間における $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の関係を統合する数学的な体系化について，研究した.

2. 方法および結果

n 次元の $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の角部分の式について，立体構造(Structure)，頂点(Vertex)，稜(Edge)，面(Face)，胞(Cell)の関係を明らかにした(表 1). この結果，n 次元の $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道の立体構造が，頂点，稜，面，胞の数を表す一般式にもとづき統一的に表現できた．表 1 は, $\chi_{n,1}$ の場合のまとめである．本研究ではさらに, $\chi_{n,m}$ の一般式を(1), (2)のように求めることができた．以上により, n 次元空間の中での $sp^n d^{n-1}$ 混成原子軌道をすべて統一的に表現できた.

Table 1. n-dimensional sp^{n}d^{n-1} hybridized atomic orbital

n	sp^{n}d^{n-1}	$\chi_{n,1}$	Structure	Vertex	Edge	Face	Cell
1	sp	$\frac{1}{\sqrt{2}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}$	Digonal (edge)	2	-	-	-
2	sp^{2}d	$\frac{1}{2}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}+\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}$	2-cube (square)	4	4	-	-
3	sp^{3}d^2	$\frac{1}{\sqrt{6}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_x+\frac{1}{2}d_{x^2-y^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{3}}d_{z^2}$	regular octahedron	6	12	8	-
4	sp^{4}d^3	$\frac{1}{2\sqrt{2}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}+\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{3}}d_{x_3^2}-\frac{1}{2\sqrt{6}}d_{x_4^2}$	16-cell (4-dimensional "regular octahedron")	8	24	32	16
5	sp^{5}d^4	$\frac{1}{\sqrt{10}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}+\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{3}}d_{x_3^2}-\frac{1}{2\sqrt{6}}d_{x_4^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{10}}d_{x_5^2}$	5-dimensional "regular octahedron"	10	40	80	80
6	sp^{6}d^5	$\frac{1}{2\sqrt{3}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}+\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{3}}d_{x_3^2}-\frac{1}{2\sqrt{6}}d_{x_4^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{10}}d_{x_5^2}-\frac{1}{2\sqrt{15}}d_{x_6^2}$	6-dimensional "regular octahedron"	12	60	160	240
n	sp^{n}d^{n-1}	$\frac{1}{\sqrt{2n}}s+\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_1}+\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{3}}d_{x_3^2}-\frac{1}{2\sqrt{6}}d_{x_4^2}$ $-\frac{1}{2\sqrt{10}}d_{x_5^2}$ $\ldots-\frac{1}{\sqrt{2(n-2)(n-3)}}d_{(n-2)^2}$ $-\frac{1}{\sqrt{2(n-1)(n-2)}}d_{(n-1)^2}$ $-\frac{1}{\sqrt{2n(n-1)}}d_{n^2}$	n-dimensional "regular octahedron"	$\frac{2^1}{1!}n$	$\frac{2^2}{2!}n\cdot(n-1)$	$\frac{2^3}{3!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)$	$\frac{2^4}{4!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)\cdot(n-3)$

$$l=\left[\frac{m+1}{2}\right]$$

$1\le m\le 4,\quad n\ge 1$

$$\chi_{n,m}=\frac{1}{\sqrt{2n}}s+(-1)^{m-1}\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_l}+(1-\delta_{n1})\left\{(-1)^{\left[\frac{m-1}{2}\right]}\frac{1}{2}d_{x_1^2-x_2^2}\right\}-\sum_{k=3}^{n}\frac{1}{\sqrt{2k(k-1)}}d_{x_k^2} \qquad (1)$$

$m\ge 5,\quad n\ge 3$

$$\chi_{n,m}=\frac{1}{\sqrt{2n}}s+(-1)^{m-1}\frac{1}{\sqrt{2}}p_{x_l}+\sqrt{\frac{l-1}{2l}}d_{x_l^2}-\sum_{k=l+1}^{n}\frac{1}{\sqrt{2k(k-1)}}d_{x_k^2} \qquad (2)$$