演　　　題	n 次元の混成原子軌道に関する研究	
発　表　者 （所　属）	○木戸冬子，細矢治夫*，時田澄男 （埼玉大工・埼玉大学 21 世紀総合研究機構プロジェクト 115, *お茶の水女子大理・埼玉大学 21 世紀総合研究機構プロジェクト 103）	
連　絡　先	〒338-8570　埼玉県さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 TEL: 048-858-3511/3516, FAX: 048-858-3511/3516 E-mail:fkido@microsoft.com	
キーワード	n 次元，混成原子軌道，角度部分，配位数, Vertex, Edge, Face, Cell , Structure, 結合角 θ	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	現実の3次元 Schrödinger 波動方程式の数学的および物理化学的意味をより明らかにするために，仮想的な3次元を超える高次元を含め，Schrödinger 波動方程式の数学的構造について，混成原子軌道の形の要素（Vertex, Edge, Face, Cell）を子細に調べることによって，混成原子軌道の数式を n 次元の中で統一的に捉え，数学的体系化を行った.	
環　　　境	適応機種名	
	ＯＳ名	
	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

本研究では，現実の3次元Schrödinger波動方程式の数学的および物理化学的意味をより明らかにするために，仮想的な3次元を超える高次元を含め，Schrödinger波動方程式の数学的構造を子細に調べることによって，混成原子軌道の数式をn次元の中で統一的に捉えることにより，数学的体系化を行った.

2. 方法および結果

n 次元の sp^n 混成原子軌道の角度部分の式から，n 次元と配位数, Vertex (1 次元の要素), Edge (2 次元の要素), Face (3 次元の要素), Cell (4 次元の要素), Structure, 結合角 θ の関係を表 1 にまとめ，Vertex, Edge, Face, Cell それぞれについて，n 次元との関係を一般式で表した．その結果，s, sp, sp^2, sp^3, sp^4, sp^5,…, sp^n 系列が n 次元空間の n-Simplex と対応する（sp^n 混成原子軌道間の角度の一般式である)ことを発見した．更に n 次元の sp^n を一般式(1)で表現した.

$$\chi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} s - \sum_{i=1}^{m-1} \frac{1}{\sqrt{(n+2-i)(n+1-i)}} p_i + \frac{\sqrt{n-(m-1)}}{\sqrt{n-(m-2)}} p_m \quad (1)$$

ただし，n=0, 1, 2,….;　m=1, 2, 3,…., n, n+1

同様に, n次元のsp^nd^{n-1}混成原子軌道の角度部分の式から, n次元と配位数, Vertex (1 次元の要素), Edge (2 次元の要素), Face (3 次元の要素), Cell (4 次元の要素), Structure, 結合角 θ の関係を表 2 にまとめ, Vertex, Edge, Face, Cell それぞれについて, n 次元との関係を一般式で表した. その結果, sp, sp^2d, sp^3d^2, sp^4d^3, sp^5d^4, …, sp^nd^{n-1} 系列は, n 次元空間の n-Cross Polytope と対応することを発見した. 更に, n 次元の sp^nd^{n-1} を一般式(2), (3)で表現した.

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

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

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

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

$$\chi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{2n}} s + (-1)^{m-1} \frac{1}{\sqrt{2}} p_{x_l} + \sqrt{\frac{l-1}{2l}} d_{{x_l}^2} - \sum_{k=l+1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2k(k-1)}} d_{{x_k}^2} \tag{3}$$

以上により, 従来, 3次元空間だけで捉えられていたsp^nおよびsp^nd^{n-1}混成原子軌道が, n次元空間の中ですべて統一できる一般式で表すことが出来た. 混成軌道の直線形（配位数2）, 平面正三角形（配位数3）, 正四面体（配位数4）, 平面正四角形（配位数4）, 正八面体（配位数6）を, sp^nおよびsp^nd^{n-1}混成原子軌道関数のn次元の一般式として, 数学的な解析により説明した. この結果, 3次元の三方両錘形および四角錘などの配位数5の混成軌道や7以上の配位数の混成軌道を数学的に解析する糸口が得られた.

表1　n次元のsp^n混成原子軌道

n	sp^n	Vertex	Edge	Face	Cell	Structure	$\cos\theta$	θ
0	s	1	0	0	0	Point	-	-
1	sp	2	1	0	0	Line	$-\frac{1}{1}$	180°00’
2	sp^2	3	3	1	0	Triangle	$-\frac{1}{2}$	120°00’
3	sp^3	4	6	4	1	Tetrahedron	$-\frac{1}{3}$	109°28’
4	sp^4	5	10	10	5	5-Cell (tetrahedron)	$-\frac{1}{4}$	104°29’
5	sp^5	6	15	20	15	5-Simplex	$-\frac{1}{5}$	101°32’
n	sp^n	$\frac{1}{1!}(n+1)$	$\frac{1}{2!}(n+1)\cdot n$	$\frac{1}{3!}(n+1)\cdot n\cdot(n-1)$	$\frac{1}{4!}(n+1)\cdot n\cdot(n-1)(n-2)$	n-Simplex	$-\frac{1}{n}$	arccosθ

表 2　n 次元の sp^nd^{n-1} 混成原子軌道

n	sp^nd^{n-1}	Vertex	Edge	Face	Cell	Structure	θ
1	sp	2	0	0	0	Line	-
2	sp^2d	4	4	0	0	Square	90°00’
3	sp^3d^2	6	12	8	0	Octahedron	90°00’
4	sp^4d^3	8	24	32	16	16-Cell (hexadecachoron)	90°00’
5	sp^5d^4	10	40	80	80	5-Cross Polytope	90°00’
n	sp^nd^{n-1}	$\frac{2^1}{1!}n$	$\frac{2^2}{2!}n\cdot(n-1)$	$\frac{2^3}{3!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)$	$\frac{2^4}{4!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)\cdot(n-3)$	n-Cross Polytope	90°00’