

演 題	水素原子軌道の可視化プログラムの開発	
発 表 者 ( 所 属 )	○ 平熊 真, 藤井 秀彦, 野口 文雄, 小林秀彦, 木戸冬子, 時田 澄男 (埼玉大学工学部, 埼玉大学 21 世紀総合研究機構プロジェクト 203)	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255 TEL/FAX 048-858-3536 E-mail noguchi@apc.saitama-u.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	OpenGL, 等値曲面, 電子密度, 可視化	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	当研究室で開発した等値曲面表示による水素原子軌道可視化アプリケーションの 対応軌道数を増やし, さらに原子軌道の断面図表示機能を追加した. ユーザーは 手軽に等値曲面及び断面図を見ることができ, 教育用に用いることができる.	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows2000, Windows XP
	ソ ー ス 言 語	C/C++ (コンパイラ ; Borland 社 Borland C++ Builder6)
	周 辺 機 器	特になし
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	具 体 的 方 法
	・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	

## 1. はじめに

原子軌道は, その軌道の式を見ただけでは, 原子軌道の形がわかりにくい. 計算機を利用して水素原子の原子軌道を可視化する研究報告は数多くあり, 筆者の一人時田は,  $1s \sim 6h$  の各軌道を AVS(Application Visualization System)を組み込んだ WS を用いて等値曲面を可視化した<sup>1)</sup>. しかし, 当時の方法では, ひとつの原子軌道のアニメーション可視化に長い時間 (時には 1 日以上) がかかってしまうという問題があった. 最近の PC の高性能化および高普及率には目を見張るものがある. そこで, OpenGL グラフィックスライブラリを利用した C++プログラミングにより, ユーザーが原子軌道の関数値を任意に変更することができ, その関数値に対応した等値曲面を高速で計算及び描画することができるソフトウェアの開発を試みた. すなわち, 遠近ズーム・回転動画等のユーザーインタラクティブにすぐれた高画質な画像として原子軌道を可視化できる Windows 版の PC ソフトウェアを開発した. また, ある原子軌道の任意の断面における, 電子密度を色譜調に対応させて表示する対話機能を加えた.

## 2. 方法

### 2-1. 等値曲面の可視化

ユーザーの設定関数値，空間走査範囲および空間メッシュ情報に基づいて，予備空間走査を行い等値曲面の空間座標を求め，OpenGLの点描画関数により等値曲面の全体像を描画させ，対称性および各軌道胞のおおまかな空間座標範囲を検出させた．2次元空間メッシュを各座標軸方向から等値曲面に接近させて，指定曲面にタッチするとより細かい空間メッシュで再接近させる動作を繰り返し行う再帰関数を考案実装し，等値曲面のx, y, z軸方向の各頂点座標を正確に求め，空間走査範囲を確定させた．再度空間を走査して，経線と緯線で構成されるワイヤーフレームデータを作成し，等値曲面を微小な三角形からなる多面体として描画させた．

### 2-2. 断面図の表示

ユーザーの設定した平面の各点について，軌道の式にその点の座標(x, y, z)を代入すると，関数値が導き出される．この関数値を色譜調に対応させて点描画することにより，原子軌道の断面図を描画させた．

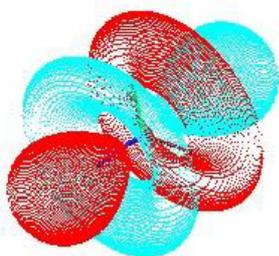
## 3. 結果

### 3-1. 等値曲面の可視化

点描画の出力例を図1に示す．予備空間走査により，形状が未知な等値曲面にも対応が可能となり，しかも対称性が把握できるため，対称変換による軌道胞の増殖が可能となり計算の高速化がはかられた．関数値は $10^{-5} \sim 10^{-2} \text{au}^{-3/2}$ の広範囲に設定可能で， $5g (35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4)$ 軌道のトーラスの消滅などもモニターできる．等値曲面形状の関数値依存性の一例を図2に示す．現在のところ，選択可能な原子軌道は2p, 3d, 4f, 5g, 6hの36種類であり，そのうち6hを除く25種類が等値曲面の可視化が可能である．

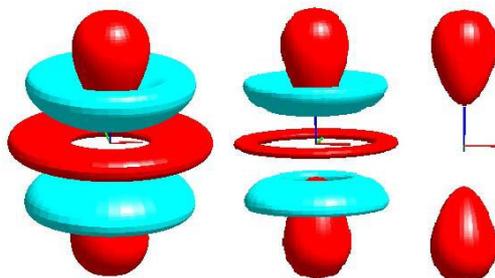
### 3-2. 断面図の表示

断面図の出力例を図3に示す．この機能より，原子軌道の電子密度を可視化することに成功した．この断面図表示機能は，等値曲面の可視化の際に用いる設定を利用するため，可視化された等値曲面と，断面図を同時に見ることも可能である．



関数値： $4.5 \times 10^{-3} \text{au}^{-3/2}$

図1.  $4f 5z^3 - 3zr^2$ 軌道の等値曲面点描画図

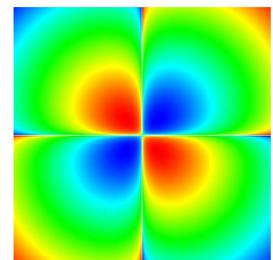


関数値  $2 \times 10^{-3}$

$3 \times 10^{-3}$

$4 \times 10^{-3} (\text{au}^{-3/2})$

図2. 微小三角形による  $5g 35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4$  軌道の等値曲面描画図



関数値： $9.3 \times 10^{-3} \text{au}^{-3/2}$

図3.  $3dxy$ 軌道のxy平面断面図

文献 1) 時田澄男，渡辺智博，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**, 35 (1996).