

1P08 エクセル ワークシート上に軌道関数の等高線を

プロットするプログラム

浜渦 允紘

沼津工業高等専門学校（〒410-8501 沼津市大岡3600）

はじめに

原子軌道関数や混成軌道関数のプロットは、1931年に L.Pauling [1] によって角度部分だけ表示する polar graph が描かれ、化学結合の考察に利用された。この polar graph は今日の化学のテキストにもよく載っている。その後、計算機の発達とともに軌道関数の等高線図や等値曲面図 [2-5] などが描かれ論文や化学のテキストに載っていて、軌道関数の理解に役立っている。

演者は、物理化学の授業で学生にこれまで電卓で軌道関数を計算させ、グラフ用紙上に polar graph や等高線図を鉛筆で描かせてきた。これは実り多い作業だが、根気が要る。最近、学生はパソコンを所有し、表計算ソフト エクセルを日常的に利用できる状況にある。そこで、演者はエクセル VBA でエクセル ワークシート上に軌道の等高線を描くプログラムを作り、学生に使用してもらっているので、このプログラムと利用結果等について報告したい。

作図法

等高線を描きたい矩形の領域を希望する数の三角形に分割する。この三角形の辺を描きたい等高線が通過するか否かを調べ、通過するときはその座標を線形近似で求め、これらの点を線で結び、次から次へとこの操作をすべての三角形について行う。

エクセル ワークシートにこの等高線を描くとき、y 軸の正の向きが下方方向になっていること、セルのサイズがデフォルトで高さが 13.5mm、幅が 4x13.5mm になっていることに注意して、実際の原子、分子座標系から変換しなければいけない。プログラムはエクセル VBA で書いた。

結果および討論

原子軌道は、水素原子の $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ 軌道、混成軌道は sp, sp^2, sp^3 、分子軌道はエチレン、ブタジエン、ベンゼン、ナフタレンの単純ヒュッケル法で計算した分子軌道の等高線図を描いている。polar graph で描いた p_x 軌道と等高線図の $3p_x$ 軌道の違いに学生はびっくりすることが多い。等高線図の方が関数の位相関係がよくわかって教育上有用であると実感している。

参考文献

- [1] L.Pauling, J. Amer. Chem. Soc. **53**(1931)1367.
- [2] B.Perlmutter-Hayman, J. Chem. Ed. **46**(1969)428.
- [3] O.Kikuchi and K.Suzuki, J. Chem. Ed. **62**(1985)206.
- [4] H.M.Morrison, et al., J. Chem. Ed. **62**(1985)298.
- [5] 時田澄男、木戸冬子、杉山孝雄、細矢治夫、J. Chem. Software **7**(2001)29.