

OpenGL を用いた水素原子の原子軌道の各種関数値に対応する等値曲面の可視化

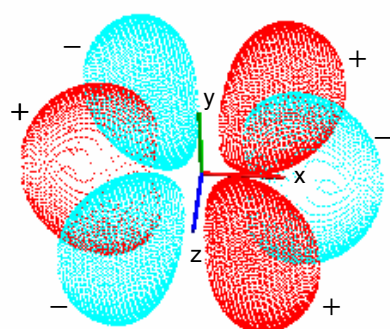
○野口文雄、藤井秀彦、平熊真、時田澄男

埼玉大学工学部応用化学学科(〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)

【緒言】 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~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¹⁾。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、原子軌道の関数値の変化に対応し等値曲面を高速で計算し、しかも遠近ズーム・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手軽に可視化できる Windows 版の PC ソフトウェアを開発した。

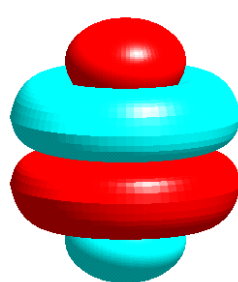
【方法】 ユーザーの設定関数値、空間走査範囲および空間メッシュ情報に基づいて、予備空間走査を行い等値曲面の空間座標を求め、OpenGL の点描画関数により等値曲面の全体像を描画させ、対称性および各軌道胞のおおまかな空間座標範囲を検出させた。2 次元空間メッシュを各座標軸方向から等値曲面に接近させて、曲面にタッチするとより細かい空間メッシュで再接近させる動作を繰り返す再帰関数を考案実装し、等値曲面の x, y, z 軸方向の各頂点座標を正確に求め、空間走査範囲を確定させた。再度空間を走査して、経線と緯線で構成されるワイヤーフレームデータを作成し、等値曲面を微小な三角形からなる多面体として描画させ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

【結果】 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、 $4f\ 5z^3 - 3zr^2$ 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、原子軌道は 2p, 3d, 4f の 15 種類に限定されるが、プログラムには汎用性があるため主量子数の大きな他の軌道についても容易に拡張できると考えている。

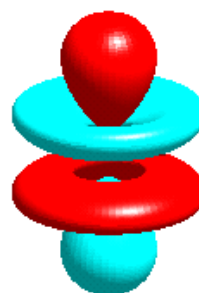


関数値: $4.5 \times 10^{-3} \text{au}^{-3/2}$

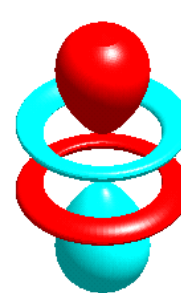
図 1. $4f\ 5xz^2 - xr^2$ 軌道の等値曲面点描画図



関数値 ($\text{au}^{-3/2}$) 7×10^{-5}



4.5×10^{-4}



6×10^{-3}

図 2. 微小三角形による $4f\ 5z^3 - 3zr^2$ 軌道の等値曲面描画図

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).