

原子軌道電子雲の実体模型の製作

○杉山孝雄¹, 時田那珂子, 長尾輝夫², 木戸冬子¹, 時田澄男¹¹ 埼玉大学工学部応用化学科 (〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)² 函館工業高等専門学校物質工学科 (〒042-8501 函館市戸倉 14-1)

【目的】 原子軌道の電子雲の三次元表示として実体模型 (ガラス内レーザー彫刻) を作製した. この新しい電子雲表示を, 筆者らが今まで行ってきた種々の原子軌道の可視化法 (断面表示, 等値曲面表示¹⁾, 没入型仮想現実感装置の利用²⁾) と, 形状, 関数値変化, および節面の表現に関して比較した.

【結果と考察】

1. 断面表示: 擬三次元表示, 等高線表示, 濃淡表示などの方法があり, これらは原子軌道のある平面で切断して, 切断面の関数値の変化を種々の方法で可視化するものである. 擬三次元表示は, 断面の各点の関数値を垂直方向にプロットしたものである. 等高線表示は, 切断面の関数値の等しい点を曲線で結んだものである. 濃淡表示は, 切断面の関数値に応じて濃淡を付けたものである. これらの表示はそれぞれ関数値の変化をどの様に表すかに工夫がされている. しかし, 原子軌道の三次元的形状の情報は表現されていない. 節面 (関数値が 0 の点を結んだ面) に関しては, 球殻状節面は円で, 平面状節面は直線で表わされ, これらは平面から立体への類推が可能である. 円錐状節面は原点から延びる 2 本の直線で表わされ, 平面状節面と区別しにくい

2. 等値曲面表示: 最近, Cu₂O 結晶の d 原子軌道を直接観察した論文³⁾ に, 観察された原子軌道の形状が, 等値曲面表示と類似していると報告された. このように等値曲面表示は, 形状を表わすことに適しているが以下の欠点も持っている. 関数値の等しい点を結んだ曲面であるため, 関数値の変化の情報が失われている. また, 曲面の内部が見えない. このため球殻状節面を持つ 2s 軌道や複雑な構造の 5d_{3z²-r²} 軌道などでは, 外側の等値曲面に内部の等値曲面が隠されてしまう.

3. 等値曲面表示の工夫: 等値曲面表示での関数値の変化の情報が失われ, 曲面の内部が見えないという欠点を補う方法として, 半透明な等値曲面で複数の関数値を表示する方法²⁾ や外側から内側視点を動かした動画表示¹⁾ を行い一定の効果を得た. さらに没入型仮想現実感装置²⁾ も利用した.

4. ガラス内彫刻: 三次元実体模型を手にとりて自由な方向から眺めることが可能であり, 全体の形状や節面が容易に認識出来る. 特に球殻状の節面を持つ軌道 (2s 軌道等) において有効であった. PC 上での類似の可視化法の例として Orbital Viewer⁴⁾ が知られている. ディスプレイ上で電子雲を対話型で回転できるが, 平面上の表示なので, ガラス内彫刻のような立体感は得られない.

【参考文献】 1) 時田澄男他, *J. Computer Aided Chem.*, **1**, 68-75 (2000). 2) 杉山孝雄他 2001 年情報化学討論会 J05. 3) J. M. Zuo, *Nature*, **401**, 49-52, (1999). 4) D. Manthey, url="http://www.orbitals.com/orb/ov.htm"