

## 電子雲の三次元模型の彫刻

○時田那珂子、長尾輝夫<sup>1</sup>、木戸冬子<sup>2</sup>、杉山孝雄<sup>2</sup>、時田澄男<sup>2</sup>

<sup>1</sup>函館工業高専 物質工学科(〒042-8501 函館市戸倉町 14-1)

<sup>2</sup>埼玉大学工学部応用化学科(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

### 【目的】

電子の存在確率をいわゆる「電子雲」で表す方法は、確率（関数値の平方）の大小が雲の濃さで表わされるため、軌道の形と関数値変化の両方の情報を表示しうる可能性がある。しかし、「雲」を三次元空間に描く適切な技法が見出せなかったために、この方法はこれまで二次元平面への投影図にしか利用されなかった。著者らは、ガラスのかたまりの中にレーザー彫刻を施す新しい技法を採用することにより電子雲の三次元表示を初めて試み、原子軌道の電子雲の実体模型を制作した。

### 【方法】

ガラス内彫刻：3Dクリスタル法により彫刻した。

データの作成：棄却法による乱数発生法を用い、電子の存在確率を求めるプログラムをC言語で作成した。変域範囲内での原子軌道各座標点における関数値の平方の最大値を計算し、棄却条件を設定して電子雲を構成する微小点の座標を求めた。中心から一定以上離れた特異点をカットすることにより最終的な彫刻用データを作成した。

### 【結果と考察】

原子軌道関数の変数(x, y, z)の変域は狭すぎれば正しい形が得られず、広すぎれば棄却率が大きくなってしまう。s軌道の動径方向の電子の広がり方を考慮し、各軌道の変域を1sは $\pm 6$ 、2s, 2pは $\pm 15$ 、3s, 3p, 3dは $\pm 25$ 、4fでは $\pm 40$  auとした。この変域で電子雲を構成する1点を決めるための乱数の発生回数を図に示した。この棄却法は効率が悪く、今後工夫を要する。

データ点数は10000~50000点を10000点毎に点検したところ今回用いたガラスの体積（一辺60mmの立方体）に対しては50000点が適当であった。

従来から、電子雲の三次元出力を二次元ディスプレイに投影して描く技法はあったが、これを三次元回転しても、出力は二次元になってしまうために雲の形についての情報はほとんど得られなかった。また、電子密度についても二次元平面への投影（すなわち、奥行方向に加算した密度）のみの情報しか得られなかった。ガラス内彫刻による方法では、これまで三次元実体としては描くことができなかった電子雲の表示を実体として捉えることができ、特に主量子数の増加に伴い球殻状の節面が増える様子も観察された。以上により、従来の方法では不可能であったことが実現できた。

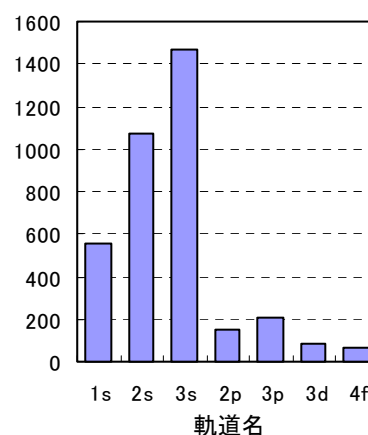


図1 データ点一つ得る必要な乱数発生回数