

電子雲のガラス内彫刻

○時田那珂子、長尾輝夫¹、木戸冬子²、杉山孝雄²、時田澄男²¹函館工業高専 物質工学科(〒042-8501 函館市戸倉町 14-1)²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】

原子軌道の正しい理解を助けるための描画方法は種々の角度から検討されている。今回、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（いわゆる3Dクリスタル法）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。この試みは、従来の原子軌道の描画方法の virtual 性を補う意図の下に行われた。

【方法】

ガラス内彫刻¹⁾：レーザー彫刻器を用い、3Dクリスタル法で彫刻した。ガラス内のレーザー彫刻は多数の点の集まりとして記録したが、一つ一つの点は完全な球形ではないことを考慮し、軌道の対称性にもとづいて彫刻方向を決定した。ガラスは一辺 60 mm の立方体のかたまりを用いた。

データの作成：電子の存在確率を棄却法で求めるプログラムを C 言語で作成した。適切な棄却条件²⁾を設定して電子雲を構成する微小点の座標を求め、彫刻用データを作成した。

【結果と考察】

ガラス内彫刻による方では、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た。原理的には、没入型の三次元ディスプレイに電子雲を表示すれば、よりリアルな表現が可能のように思える。しかし、この方法で 50000 点の情報をリアルタイムで回転させることは、コンピュータの能力上現時点では不可能である。

ガラス内彫刻の欠点は着色が不可能なことである。したがって没入型ディスプレイでは可能な原子軌道そのものの正負の符号に対応する色付けはできない。しかし、2p 軌道のように対称性が良い場合は、下部から着色 LED 光を照射することで軌道関数値そのものの符号に対応した着色も可能である。

この方法は、「電子雲」を手の中で自由に回転して観察できるため、その形や雲の密度について、これまでにない情報を得ることが可能となった。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。これは従来の方法³⁾では不可能であったことが実現できたという点で画期的である。

1) 長尾輝夫、化学教育ジャーナル 第7巻第1号 (2003)

2) 日本コンピュータ化学会 2004 春季年会ポスター 2p16

3) 日本コンピュータ化学会 2004 春季年会講演 1003

