2P18

混成原子軌道の n 次元への一般化

○ 木戸冬子[1]，細矢治夫[2]，時田澄男[1]

[1] 埼玉大学工学部（〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255）

[2] お茶の水女子大学（〒112-8610 文京区大塚 2-1-1）

【緒言】3 次元空間を越える n 次元空間上の原子軌道は細矢論文[1-4]で定義されているが，これを混成原子軌道に拡張している研究はない．本論文では規格化直交条件を n 次元空間に適用して，混成原子軌道の一般式を求め，数学的体系化を行うことを目的とした．

【方法および結果】

本研究では，n次元目の軸は，n - 1次元空間の全ての軸に直交する幾何学的なn次元空間を扱うものとし，0次元空間は頂点(Vertex)，1次元空間は稜(Edge)，2次元空間は面(Face)，3次元空間は胞(Cell)で表す．

n次元空間の混成原子軌道の式は，空間次元のnと式の番号mによって $\chi_{n,m}$ で表す．n次元空間においては，sp混成軌道は1次元のsp^{n}，sp^2混成軌道は2次元のsp^{n}，sp^3混成軌道は3次元のsp^{n}混成軌道としてとらえる事ができる．同様に，s原子軌道は0次元のsp^{n}混成軌道してとらえる事ができる．1, 2, 3次元のsp^{n}混成軌道は規格化直交条件の下で求められている．3次元を超える高次元空間のsp^{n}混成軌道を同様に，規格化直交条件下で求めた．これらのsp^{n}混成軌道の式に規則性として，一般式(1)を次のように見出した．

$$\chi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\mathrm{s} - \sum_{i=1}^{m-1}\frac{1}{\sqrt{(n+2-i)(n+1-i)}}\mathrm{p}_i + \frac{\sqrt{n-(m-1)}}{\sqrt{n-(m-2)}}\mathrm{p}_m \tag{1}$$

ただし，n = 0, 1, 2, ….; m = 1, 2, 3… n, n+1 である．

n 次元空間においては，sp^2d 混成軌道は 2 次元の $sp^{n}d^{n-1}$，sp^3d^2 混成軌道は 3 次元の $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道としてとらえる事ができ，sp 原子軌道は 1 次元の $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道ととらえる事ができる．1, 2, 3 次元の $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道は規格化直交条件の下で求められている．3 次元を超える高次元空間の $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道を同様に，規格化直交条件下で求めた．n 次元空間の $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道の式に規則性として，一般式(2), (3)を次のように見出した． $1 \le m \le 4$， $n \ge 1$ のときの $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道の一般式：

$$\chi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{2n}}\mathrm{s} + (-1)^{m-1}\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{p}_{x_1} + (1-\delta_{n1})\left\{(-1)^{\left[\frac{m-1}{2}\right]}\frac{1}{2}\mathrm{d}_{x_1{}^2-x_2{}^2}\right\} - \sum_{k=3}^{n}\frac{1}{\sqrt{2k(k-1)}}\mathrm{d}_{x_k{}^2} \tag{2}$$

$m \ge 5$， $n \ge 3$ のときの $sp^{n}d^{n-1}$ 混成軌道の一般式：

$$\chi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{2n}}\mathrm{s} + (-1)^{m-1}\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{p}_{x_l} + \sqrt{\frac{l-1}{2l}}\mathrm{d}_{x_l{}^2} - \sum_{k=l+1}^{n}\frac{1}{\sqrt{2k(k-1)}}\mathrm{d}_{x_k{}^2} \tag{3}$$

ただし，この 2 つの式において， $l = \left[\frac{m+1}{2}\right]$ である．

n次元空間のsp^{n}混成軌道の式から，n次元空間と配位数，Vertex, Edge, Face, Cell，幾何学的構造(Geometrical structure)，結合角θの関係を表1にまとめ，Vertex, Edge, Face, Cellそれぞれについて，n次元空間との関係を一般式で表した．その結果，sp^{n}混成軌道が式の数と同じ数のVertexを持つn次元空間のn-simplex [5-7]と対応する（sp^{n}混成軌道の角度の一般式である）ことを発見した．同様に，n次元空間の$sp^{n}d^{n-1}$混成軌道の式から，n次元空間とVertex, Edge, Face, Cell, Geometrical structure，結合角θの関係を表2にまとめ，Vertex, Edge, Face, Cellそれぞれについて，n次元空間との関係を一般式で表した．その結果，$sp^{n}d^{n-1}$混成軌道は，n次元空間のn-Cross polytope [5, 6, 8]と対応す

ることを発見した.

表1. n次元空間のsp^{n}混成軌道

n	sp^n	Vertex	Edge	Face	Cell	Geometrical structure	cosθ	θ
1	sp	2	1	0	0	Line segment	$-\frac{1}{1}$	180°00'
2	sp^2	3	3	1	0	Regular triangle	$-\frac{1}{2}$	120°00'
3	sp^3	4	6	4	1	Regular tetrahedron	$-\frac{1}{3}$	109°28'
4	sp^4	5	10	10	5	Regular 5-Cell (Regular pentachoron)	$-\frac{1}{4}$	104°29'
5	sp^5	6	15	20	15	5-simplex	$-\frac{1}{5}$	101°32'
n	sp^n	$n+1$	$\frac{1}{2!}(n+1)\cdot n$	$\frac{1}{3!}(n+1)\cdot n\cdot(n-1)$	$\frac{1}{4!}(n+1)\cdot n\cdot(n-1)(n-2)$	n-simplex	$-\frac{1}{n}$	arccosθ

表 2. n 次元空間の sp^{n}d^{n-1} 混成軌道

n	sp^{n}d^{n-1}	Vertex	Edge	Face	Cell	Geometrical structure	θ
2	sp^{2}d	4	4	0	0	Regular square	90˚00'
3	sp^{3}d^2	6	12	8	0	Regular octahedron	90˚00'
4	sp^{4}d^3	8	24	32	16	Regular 16-Cell (Regular hexadecachoron)	90˚00'
5	sp^{5}d^4	10	40	80	80	5-Cross polytope	90˚00'
n	sp^{n}d^{n-1}	$2n$	$\frac{2^2}{2!}n\cdot(n-1)$	$\frac{2^3}{3!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)$	$\frac{2^4}{4!}n\cdot(n-1)\cdot(n-2)\cdot(n-3)$	n-Cross polytope	90˚00'

【参考文献】

[1] H. Hosoya, *J. Mol. Struct.*, **352/353**, 561-565 (1995).

[2] H. Hosoya, *Int. J.Quantum Chem.*, **64**, 35-42 (1997).

[3] H. Hosoya, *J. Phys. Chem.*, **A 101**, 418-421 (1997).

[4] H. Hosoya, *J. Math..Chem.*, **23**, 169-178 (1998).

[5] H. Hosoya, F. Kido, S. Tokita, The Mathematics of the Periodic Table, Nova Science Publishers, New York, 59-74 (2005).

[6] H. S. M. Coxeter, Regular Polytopes, Dover Publications Inc. (1973).

[7] n-simplex とは, n 次元空間において n+1 個の点によって形成される各次元で最も単純な図形で, n=1 は線分（Line segment）, n=2 は正三角形（Regular triangle）, n=3 は正四面体（Regular tetrahedron）, n=4 は正五胞体（Regular 5-Cell, Regular pentachoron）である.

[8] n-Cross Polytope とは, n 次元空間において 2 n 個の点によって形成される図形のことでで, n=2 は正四角形（Regular square）, n=3 は正八面体（Regular octahedron）, n=4 は正十六胞体（Regular 16-Cell , Regular hexadecachoron）である.