

ガラス内彫刻による電子の三次元確率密度表示

時田那珂子、長尾輝夫¹、時田澄男²

¹函館工業高専 物質工学科(〒042-8501 函館市戸倉町 14-1)

²埼玉大学大学院理工学研究科(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

【緒言】

電子の存在確率を表す方法では、確率（関数値の平方）の大小が密度で表わされるため、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。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の存在確率の三次元表示を初めて試み、原子軌道の実体模型を製作した^{1,2,3}。

今回、4d軌道を加えることにより、量子数 $n=4$ までの軌道の実体模型を作成し、さらに炭素の sp , sp^2 , sp^3 混成原子軌道についても検討した。

【方法】

電子の存在確率の密度分布を棄却法で求めるプログラムをC言語で作成した。変域範囲内の原子軌道各座標点における関数値の平方の最大値をもとめ、その値を棄却条件とし、電子の密度分布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】

原子軌道の等値曲面表示は軌道の形を表すのに適し、断面図表示は内部情報を示すというように、従来の方法では軌道の特性全てを同時に表現する事は難しかった。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）のみの情報になってしまう。

ガラス内彫刻により確率密度を点の数で表した本研究の三次元実体模型は、これまで描くことができなかった電子雲表示をあたかも実体のように捉えることができ、軌道の形と軌道の関数値の変化の様子を同時に表現する事を可能にした。主量子数の増加に伴い、球殻状の内部節面が増える様子（関数値の変化）が観察できた（Fig. 1, Fig.2）。軌道の形についても線や面を使うことなく三次元空間における電子の広がりの様子を見ることができ、より誤解の少ない軌道のイメージが表現出来た。 $3d_{3z^2-r^2}$ 軌道がその良い例である（Fig. 3）。

ガラス内彫刻をした三次元実体模型は、実際に手に取り、任意の方向から軌道の全体像を把握出来るという長所を持っている。これはコンピュータ上の三次元可視化ではディスプレイが二次元または virtual な三次元立体視であるために不可能なことであり、従来の原子軌道の描画方法の virtual 性を補うものとしても意義がある。

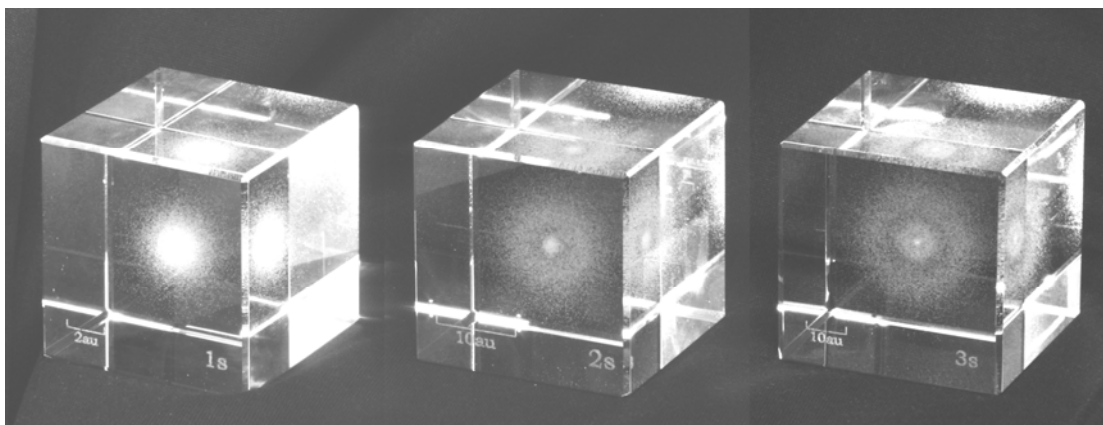


Figure 1 Images of the 3-D probability densities of hydrogen 1s, 2s, and 3s orbitals in a glass block show the spherical shape of the orbitals together with the inner nodes

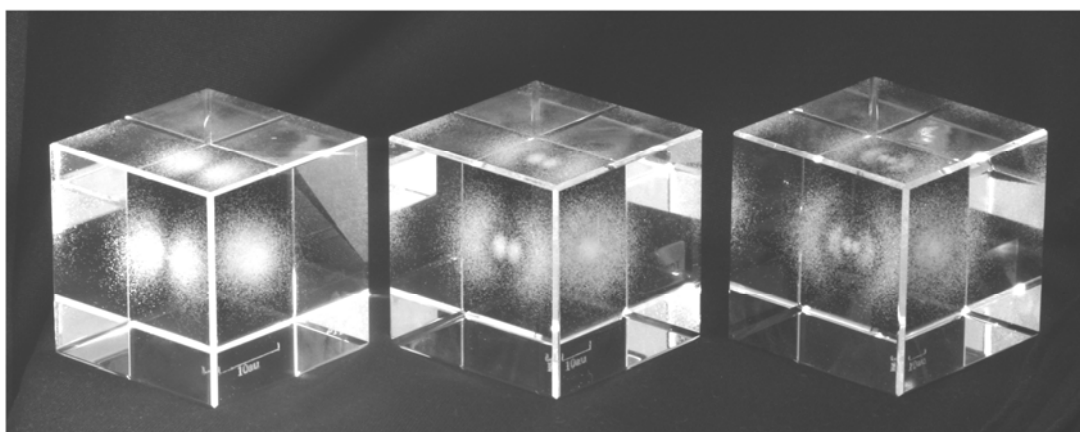


Figure 2 Images of the 3-D probability densities of hydrogen $2p_z$, $3p_z$, and $4p_z$ orbitals in a glass block.

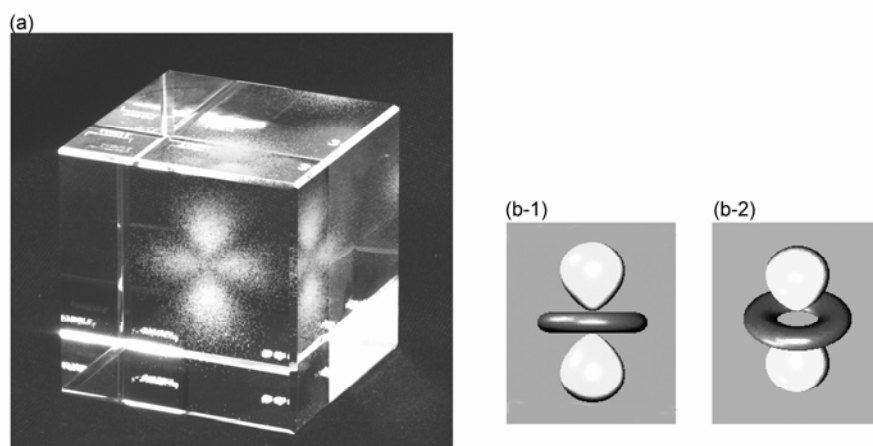


Figure 3 Representations of the hydrogen $3d_{3z^2-r^2}$ orbital. The probability density in a glass block is shown in (a). Conventional isosurface representations, (b-1) and (b-2), differ from the real 3-D picture in (a).

- 1) 日本コンピュータ化学会 2004 春季年会 2P16, RD02.
- 2) N. Tokita, S. Tokita, and T. Nagao, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **5**, (2006) in press.
- 3) 時田澄男、時田那珂子、意匠登録第 1280636 号 (2006).