

EX02 [研究展示]

原子軌道のガラス内彫刻 混成軌道の表示

時田那珂子、 時田澄男¹

¹埼玉大学名誉教授(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

【概要】一連の混成軌道を1つのガラス内に原点共通で彫刻すると、球対称や円筒対称（ドーナツ形）になる。われわれは、混成軌道をそのひろがりの大きい方向に原点移動した表示を工夫した。この新しい方法の有用性を、実物を展示することにより発表したい。

【方法】レーザー彫刻機として、LeLeeLaser 製 MiniType YF-YAG-200 を用い[1]、ガラスブロック内に原子軌道の確率密度を彫刻した。

【結果】図1は3個の sp^2 混成軌道の原点を、それぞれ、正三角形の3個の頂点に移動して彫刻したものである。2種の p 軌道の透視により円筒対称性が認識できることは前回報告した[1]。たとえば、 $2p_x$ と $2p_y$ 軌道の確率密度を原点共通で描けば、 $x^2 + y^2$ の対称性を持つことになるので、当然のことである。多くの教科書では、図2のように、あたかも原点共通で3個の sp^2 軌道が描けるような説明があるが、これは正しくない。図3は4個の sp^3 混成軌道の原点を、それぞれ、正四面体の4個の頂点に移動して彫刻したものである。 sp^3d^2 混成軌道の場合、特定の2個の d 軌道の表示で、6方混成の概念を示すことができる（図4）。図5に、1個の sp^3d^2 混成軌道、図6に、6個の sp^3d^2 混成軌道（原点移動済）を示す。

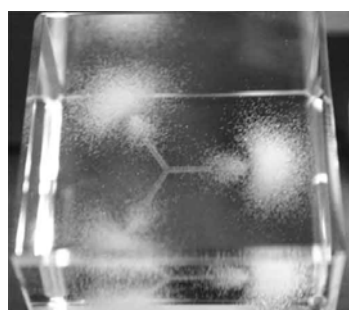


図1 3個の sp^2 混成軌道

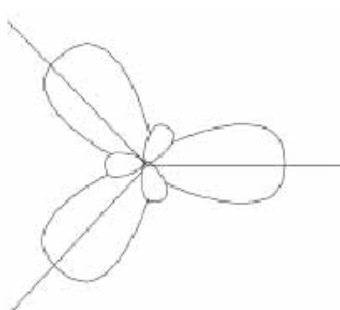


図2 教科書の sp^2 混成軌道



図3 4個の sp^3 混成軌道



図4 特定の2個の d 軌道



図5 1個の sp^3d^2 混成軌道



図6 6個の sp^3d^2 混成軌道

【参考文献】 [1] 時田那珂子, 時田澄男, "原子軌道のガラス内彫刻 軌道の組み合わせ表示", 日本コンピュータ化学会 2008 春季年会(大岡山)要旨集, 研究展示 EX02 (2008.05).