

## EX02 [研究展示]

### 原子軌道のガラス内彫刻 軌道の組み合わせ表示

時田那珂子、 時田澄男<sup>1</sup>

<sup>1</sup>埼玉大学名誉教授(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

【概要】複数の原子軌道を1つのガラス内に組み合わせて彫刻すると、主量子数の違いによるひろがりの変化が良く解るだけでなく、2種のp軌道の透視による円筒対称性の認識など、特別な効果が得られることがわかった。これらの新しい効果の有用性を、実物を展示することにより発表したい。

【方法】レーザー彫刻機をRofin-Baasel 製 RSM OSC 10 ではなく、LeLeeLaser 製 MiniType YF-YAG-200 に変え[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】上記の変更により、彫刻点の高精細化がはかれた。この利点を生かし、一つのガラスブロック内に、複数の軌道を彫刻する効果を検証した。3個の2p軌道を彫刻する組み合わせ(図1a)では、その長軸方向からの観察により、円形(図1b)が認められ、3個の軌道を重ねれば、s軌道と同じ球形のひろがりを持つことが認識できる。また、主量子数の異なる同種の軌道の比較では、ひろがりの変化だけでなく、球形の節面が規則的に増加することも認識できる(図2)。図2aとbでは、上方からの観察で円形(s軌道形)、cではp軌道形が認識できる。

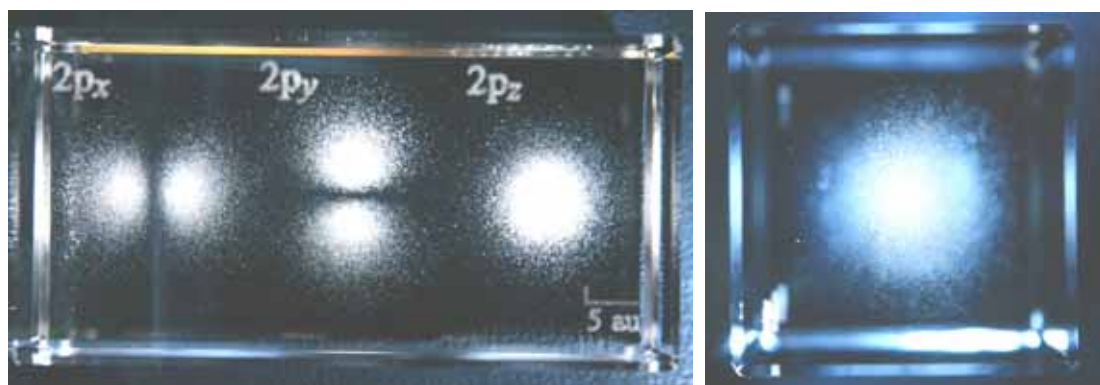


図1 (a) 2px, 2py, 2pz (z軸方向から個々の軌道を観察)

(b) x軸方向から3軌道を透視

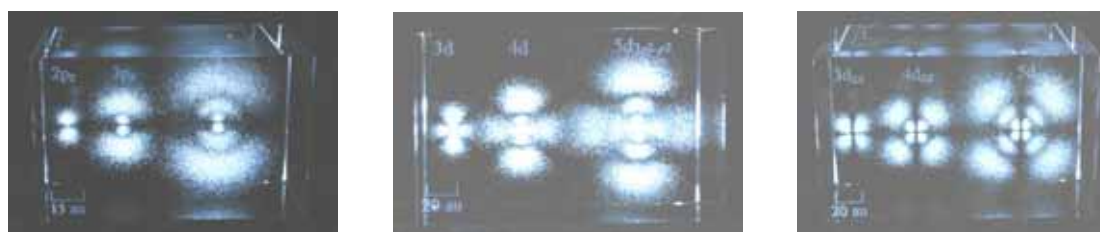


図2 (a) 2pz, 3pz, 4pz

(b) 3d, 4d, 5d ( $3z^2 - r^2$ )

(c) 3d, 4d, 5d (zx)

【参考文献】 [1] 時田澄男, 時田那珂子, "原子軌道確率密度のガラス内部への高精細彫刻", 日本コンピュータ化学会 2007 秋季年会(姫路)要旨集, 研究展示 EX02 (2007.11).