

RX01

原子軌道のガラス内彫刻－混成軌道の表示：その2－

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）になってしまう。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新しい表示を工夫し、その有用性について発表した[1]。また、複数の混成軌道を1つのガラス内に組み合わせて彫刻すると、透視による球形のイメージの確認が可能であることを見出した[2]。今回、より高次の混成軌道について、Ni, Pd, Pt 元素の違いによる軌道胞の変化を比較検討したので、実物を展示することにより発表したい。

【方法】LeLeeLaser 製 MiniType YF-YAG-200 レーザー彫刻機を用い[3]、棄却法で計算した軌道の確率密度をガラスブロック内に彫刻した。

【結果】レーザーによりガラスブロック内に原子軌道を彫刻する新しい方法の利点はいろいろある[4]が、その一つに、内部の構造を認識しやすいという特徴がある。たとえば、従来から最も多用されている原子軌道の描画法である等値曲面表示で 2s 原子軌道を描くと単なる球形にしか見えず、1s と全く同じ形状を与えるだけであるが（図 1）、レーザー彫刻では図 2 に示す様に、内部の節面が明瞭に認識できる。このような特徴が、高次の混成軌道

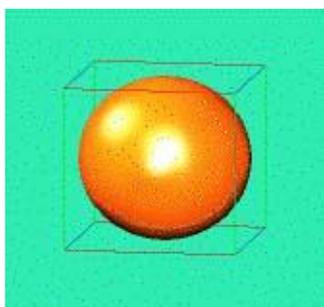


図1 水素原子の 2s 原子軌道

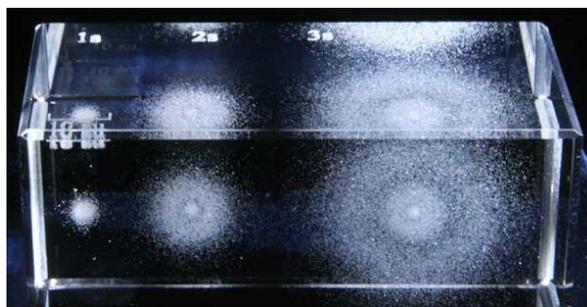


図2 水素原子の 1s, 2s, および 3s 原子軌道

にどのように現れるかを調べるため、Ni, Pd, Pt 元素の dsp₂ 混成軌道について比較検討した。4 個の等価な dsp₂ 混成軌道は、s 軌道、p (x), p (y) 軌道、および、d (x²-y²)の混成により生ずる。これらは、XY 平面上でたがい 90° をなす方向を向いている。図 3 は、これら 4 個の等価な混成軌道のうちのの一つを図示したものである。その数式は、たとえば、Ni の場合、下式 (1) で表される。

$$\frac{1}{2}(4s + 3d_{x^2-y^2} + \sqrt{2} * 4p_x) \quad (1)$$

図3 上段では、 sp^2 混成軌道の特徴が観察でき、中段では、 $d(x^2-y^2)$ 軌道のクローバ型が混成によって変形している。Ni, Pd, Pt における混成で使われる d 軌道は、それぞれ、 $3d$, $4d$, $5d$ であることに対応して、これらのクローバ型が、一重、二重、三重に変化することが明瞭に示されている。下段では、これらがすべて円筒対称であることがわかる。

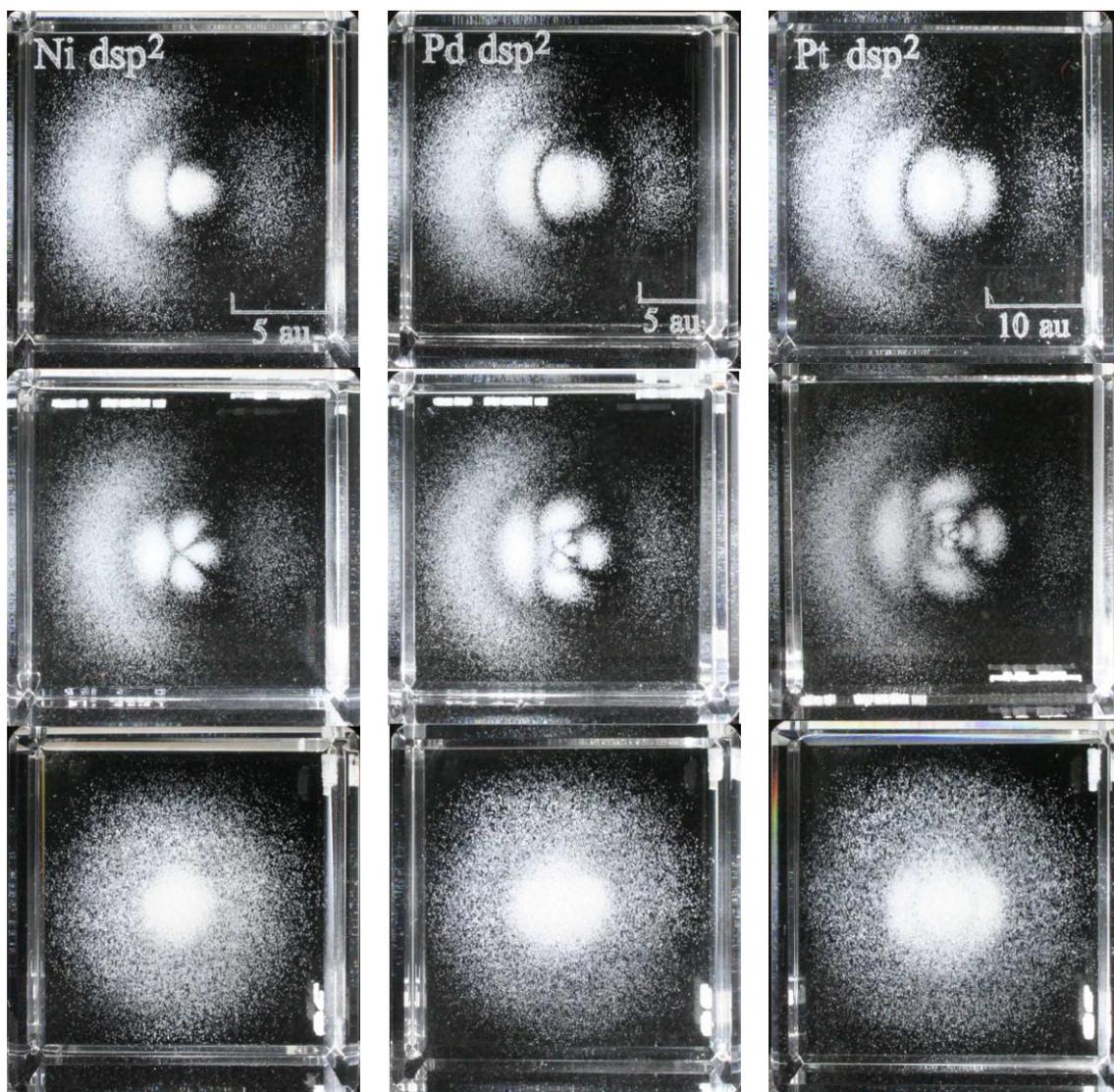


図3 Ni, Pd, および Pt の dsp^2 混成軌道. 上段 : y 軸方向から観察; 中段 : z 軸方向から観察; 下段 : x 軸方向から観察

【参考文献】 [1] 時田澄男, 時田那珂子, ”原子軌道のガラス内彫刻 —混成軌道の表示—”, 日本コンピュータ化学会 2008 秋季年会(高知)要旨集, 研究展示 EX02 (2008.9). [2] 時田澄男, 時田那珂子, ”原子軌道、分子軌道のガラス内彫刻—透視の効果の検証:その2—”, 日本コンピュータ化学会 2010 秋季年会(長岡)要旨集, 研究展示 RX001 (2010.10). [3] 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). [4] 時田澄男, 化学, **65**, (No. 2), p. 26-28 (2010).