

原子軌道の球形ガラス内彫刻

時田那珂子¹、星 成司²、館野行義²、功力芳郎³、中村恵子¹、○時田澄男¹

¹埼玉大学研究機構棟316室（〒338-8570さいたま市桜区下大久保255）

²横浜マテリアル株式会社（〒241-0817横浜市旭区下今宿2-25-1）

³野老実験クラブ（〒350-1174川越市かすみ野1-14-4）

【概要】原子軌道における電子の存在確率を、球形のガラス素材の内部に実3次元で彫刻した。原子軌道を Z 軸回りに回転することにより、実関数の原子軌道と複素関数の原子軌道の関係を視覚的に認識することができた。

【方法】水素原子の原子軌道における電子の存在確率を、乱数をもとにした棄却法で計算した。この確率密度分布を、ドイツ コンテント社製 YML3 (YAG)レーザー彫刻機を用い、球形ガラス素材内に彫刻した。立方体ガラスへの彫刻は従来法[1-7]で行った。回転台は、振動を伝えないようにベルトドライブの減速機構を組み込んだものを自作した。

【結果】これまでに、種々の原子軌道、分子軌道、分子構造模型などのガラス内彫刻を試みてきた。これらは、ほとんどすべて、立方体または直方体のガラス素材を用いた彫刻であった。これらの素材は、直交する稜を持つため、XYZ 座標軸との対応を容易に見出せるという利点がある。しかし、不都合な点もある。図 1 に、1s 軌道から 6h 軌道までの、球形節面を含まないすべての軌道を Z 軸の正の方向から眺めた図を示す。これらのうち、上記の不都合が認められるものは、たとえば、3d 軌道の右端に位置する $3d(x^2-y^2)$ 軌道である。この軌道は、同じ行の左端の $3dxy$ 軌道と同じ形をしている。Z 軸回りに 45° 回転すると両者は重なるという関係にある。 $3dxy$ 軌道を 90° 手前に回転させて XZ 平面から眺めると、 $|m|=1$ の右側の列に見られる p 軌道のパターンが観察できる。ところが、同じことが期待される $3d(x^2-y^2)$ 軌道では、これが上手くいかない。 90° 手前に回した後に 45° 回転させると、真中に

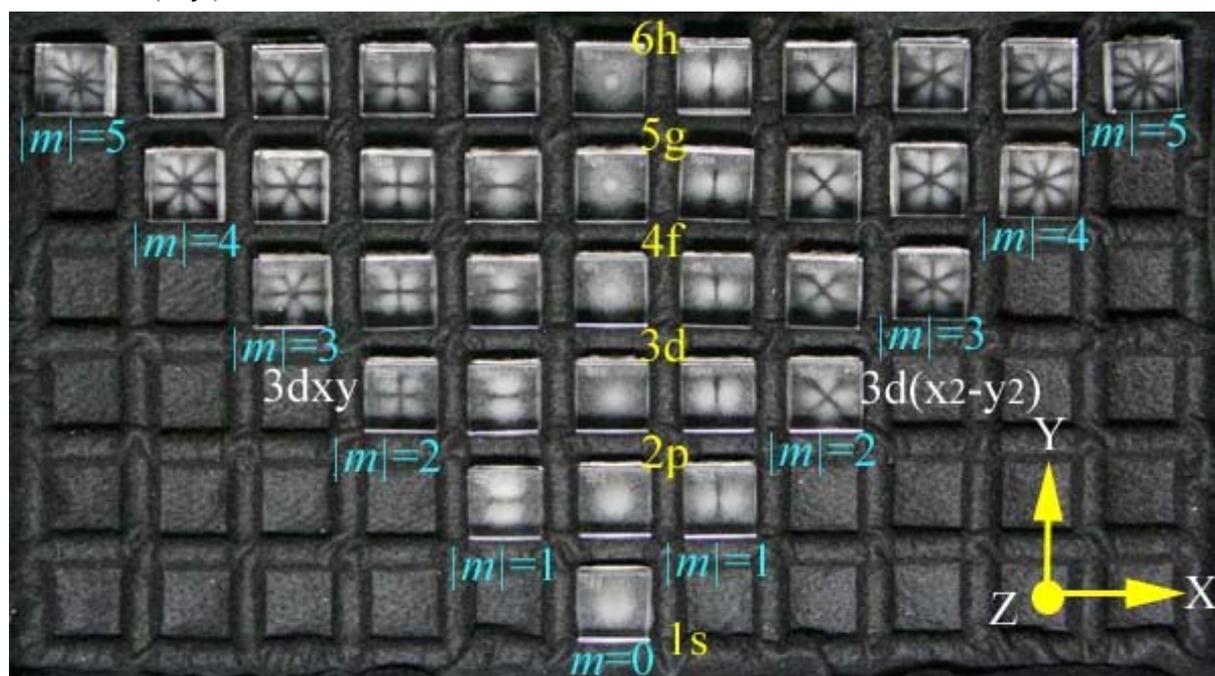


図 1 水素原子の主量子数 $n=1\sim 6$ 、方位量子数 $l=n-1$ 、磁気量子数の絶対値 $|m|=0\sim 5$ のすべての軌道（球形節面を持たないもの）。 $|m|$ の値により s, p, d, f, g, h に対応するパターンが縦並びに観察できる。

立方体の稜が重なるために不都合が生じるのである。3d(x²-y²) 軌道の上方の3個の軌道、すなわち、4f(z(x²-y²)), 5g((7z²-r²)(x²-y²)), 6h((3z²-r²)z(x²-y²)) の各軌道でも、同様の不都合が生じる。図2は、4f(z(x²-y²)) 軌道を球形のガラス素材に彫刻した写真である。球形ガラスの一部を平面カットしたブロック素材を用い、平面部からレーザー加工して作成した。球体のレンズ効果により、拡大像が観察できた。Z軸と平行な稜が無いので、上記の不都合は解消する。また、45°回転することにより、容易に4fxyz軌道との相互変換が可能となる。両者は区別できないので、この彫刻は、4f(|m|=2) の実関数2種、4f(z(x²-y²)) と4fxyz軌道を表すことになる。



図2 回転台と4f(|m|=2)軌道(実関数)



図3 回転画像 左: Z軸に垂直 右: Z軸方向

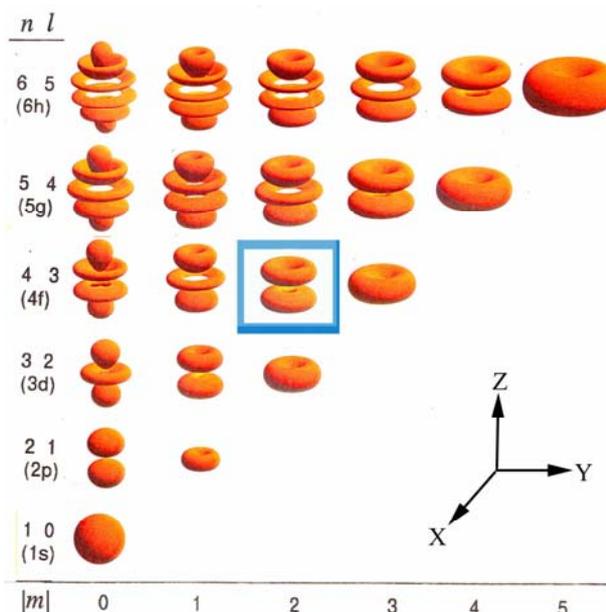


図4 複素関数の原子軌道 χ_{nlm} または χ_{nl-m} の平方

図2の回転台を用いてこの彫刻を回転させると、図3の形が得られた。二段重ねのドーナツの形状で、これは、複素関数の原子軌道の平方の図4における四角で囲ったかたちそのものである。複素関数の原子軌道のかたちは、実関数のそれに比べて、形状が単純である。主量子数 n が1つ増えると軌道胞が1つ増え、磁気量子数 m の絶対値が1つ増えると軌道胞が1つ減る。この規則に基づき、どんなに高次の軌道でも、その概形を計算せずに描き出すことが可能である。複素関数の原子軌道の数式の和(次式(1))または差(次式(2))をとり、規格化定数をかけると、実関数の原子軌道の数式を求めることがで

$$\chi_{nl|m|}^A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{nlm} + \chi_{nl-m}) \quad (1) \quad \chi_{nl|m|}^B = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\chi_{nlm} - \chi_{nl-m}) \quad (2)$$

きる。式(1)の変換によって求められる2px, 3dzx, 3d(x²-y²)軌道などは図1の右側に、式(2)の変換によって求められる2py, 3dzy, 3dxy軌道などは図1の左側に並べてある。図4と図1を較べると、式(1)や式(2)の変換の幾何学的意味は、 $|m|$ という数で表されるZ軸を含む節面(関数値が0になる面)を追加することであると理解できる。左右に位置する一対の軌道は、90°/ $|m|$ で表される角度だけ回転すると重ね合わせることが出来る。このように、複素関数の原子軌道のかたちが単純であることを利用すると、複雑そうに見える実関数の原子軌道のかたちにおける対称性などの特徴を統一的に理解することが可能となる。

【参考文献】[1] 時田澄男, 時田那珂子, "分子とその軌道のガラス内彫刻", 日本コンピュータ化学会 2009 春季年会(大岡山) 要旨集, 研究展示RX01(2009.5). [2] 時田澄男, 時田那珂子, "分子軌道のガラス内彫刻 —その2— 共役二重結合の表示", 日本コンピュータ化学会 2010 春季年会(大岡山) 要旨集, 研究展示RX03(2010.5). [3] 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). [4] 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). [5] 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). [6] 時田澄男, 化学, **65**, (No. 2), p. 26-28 (2010). [7] 時田那珂子, 時田澄男, "分子軌道のガラス内彫刻—その3—水などの基本的分子の表示", 日本コンピュータ化学会 2012 秋季年会(山形) 要旨集, 研究展示1D02(2012.10).