

原子軌道のガラス内彫刻 軌道の組み合わせ表示その2

時田澄男¹、時田那珂子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】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や、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をすでに報告した[1]。今回は、軌道の節面の規則的な変化に注目した組み合わせ表示を試みたので報告したい。

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

【結果】水素原子の原子軌道における節面の数（合計 $n - 1$ 個）は次のように整理できる。

- (i) 球殻状の節面の数 $n - l - 1$: ただし、 n は主量子数、 l は方位量子数
- (ii) z 軸を含む平面状の節面の数 $|m|$: ただし、 m は磁気量子数
- (iii) その他の円錐状の節面の数 $l - |m|$: ただし、 $\theta = 90^\circ$ (xy 平面)を含む

上記のうち、(i) 球殻状の節面の規則的な変化については、前報[1]でその一部を紹介したように、 x 軸方向から yz 平面、または、 y 軸方向から zx 平面などを見る向きにおいてその特徴が把握しやすい(図1)。 (iii) 円錐状の節面についても同様である(図2)。一方、(ii) 平面状の節面の規則的な変化については z 軸方向から xy 平面を見る向きにおいてその特徴が把握しやすい(図3)。

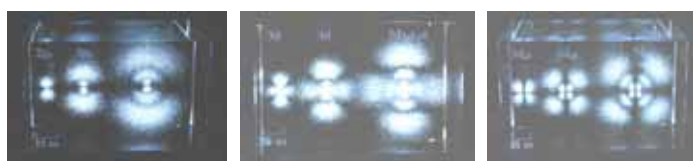


図1 (a) 2pz, 3pz, 4pz (b) 3d, 4d, 5d ($3z^2-r^2$) (c) 3d, 4d, 5d (zx)

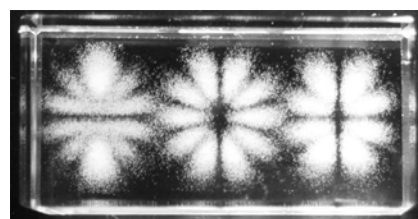


図2(a) 6h ($m=0, m=\pm 1, m=\pm 2$)

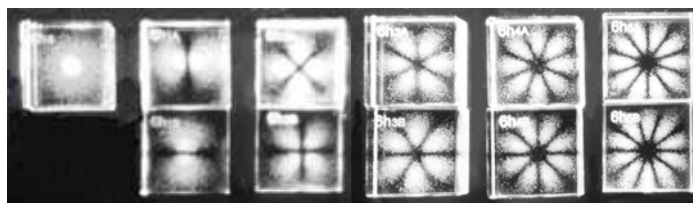


図3 6h ($m=0, m=\pm 1, m=\pm 2, m=\pm 3, m=\pm 4, m=\pm 5$)

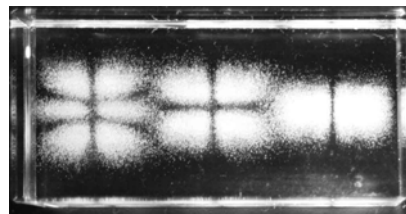


図2(b) 6h ($m=\pm 3, m=\pm 4, m=\pm 5$)

【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(東工大)要旨集, 研究展示 EX02 (2008.5).