

プロジェクト名：ガラス内彫刻による電子雲の可視化

プロジェクト代表者：太刀川達也（理工学研究科・講師）

共同研究者：時田 澄男（埼玉大学名誉教授）・時田 那珂子

1 プロジェクトの概要

原子軌道の理解を助けるための描画方法は、数々の手法があるが、その多くは、3次元の構造を2次元で表したものであり、見る者が2次元の画像や画面で得た情報を、3次元に変換して考える必要がある。我々は、ガラスの塊の中にレーザーを用いて彫刻を施す新しい方法で、電子雲の3次元表示を試み、原子軌道の電子雲の実体模型を製作した。この方法は我々によって初めてなされた先端的なものであり、量子化学を学ぶ学生や、それを学生に伝える教員のニーズに対応している

2 研究計画

電子の存在確率を求めるプログラムを用いてデータを作成し、レーザー彫刻機を用いてガラス内彫刻を作成する。ガラス塊の大きさや、電子雲を表す各点の大きさ、点の数、軌道の種類といったものを調節することにより、理解しやすい彫刻の作成を目指す。

3 研究成果

原子軌道の实体模型表示法に関する新しい試みとして、電子雲表示を従来のような断面表示または平面への投影法[1]ではなく、三次元の雲としてガラスブロック（いわゆる3Dクリスタル）内に彫刻する新技法を開発した[2]。これは、ボルンの確率表示を三次元的に彫刻する技法であり、大きな反響を得た。すなわち、「革新性」「独創性」「新規性」のいずれの観点からも、是非、実物を配布して、新しい表現を体験できる環境の設定を推進すべきであるとの評価を得たので、新たにガラス彫刻機を設置して、この研究成果を社会還元する方向性を探った。

新しい彫刻機の導入により、レーザー強度を電子雲作成に適した値に調節することが可能となり、従来よりも細かい点の集まり、すなわち、微細な、多量の点の集まりで表現することが可能となった。これは、従来よりも少ない体積でより高精細な表現が可能になったことを意味している。すなわち、1s, 2s, 3s, …などの原子軌道の広がりにおけるかたちや節面の表示が、ガラス内彫刻だけに可能な球形の殻状の節面の表示に生かされた教材が作成できた(図1)。同様に、2p, 3p, 4p, …または3d, 4d, 5d, …などの各軌道の比較による新しい表示を試みた(図2, 3)。これまでにない可視化技術であるので新しい着想を与える素材となることが期待される。

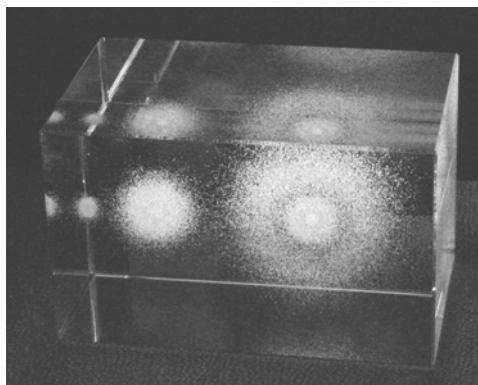


図1 水素原子の1s, 2s, 3s原子軌道



図2 水素原子の2p, 3p, 4p原子軌道

本研究の手法は、世界で初めての三次元可視化技術であるため、その長所を文章や画像で表現するこ

とは不可能である。そこで、水素原子のいろいろな原子軌道の彫刻物の実物を展示してその特徴を実際に御覧いただくこととした[3-5]。また、常時配布可能な方法として、国立科学博物館（上野）売店での配布やインターネットを通じての紹介[6, 7]も開始されている。写真やビデオは二次元画像になってしまうため、従来法となんら変わらない印象になってしまう。この研究の成果実物の模型を見るほかに方法はない。これらの3次元実体模型を御覧いただくことにより、その「独創的な立体表現」が斬新で新規性に富み、教材としても革新的であることを汲み取っていただけたと考えている。これは、分子模型の実物と写真の違いに相当する。

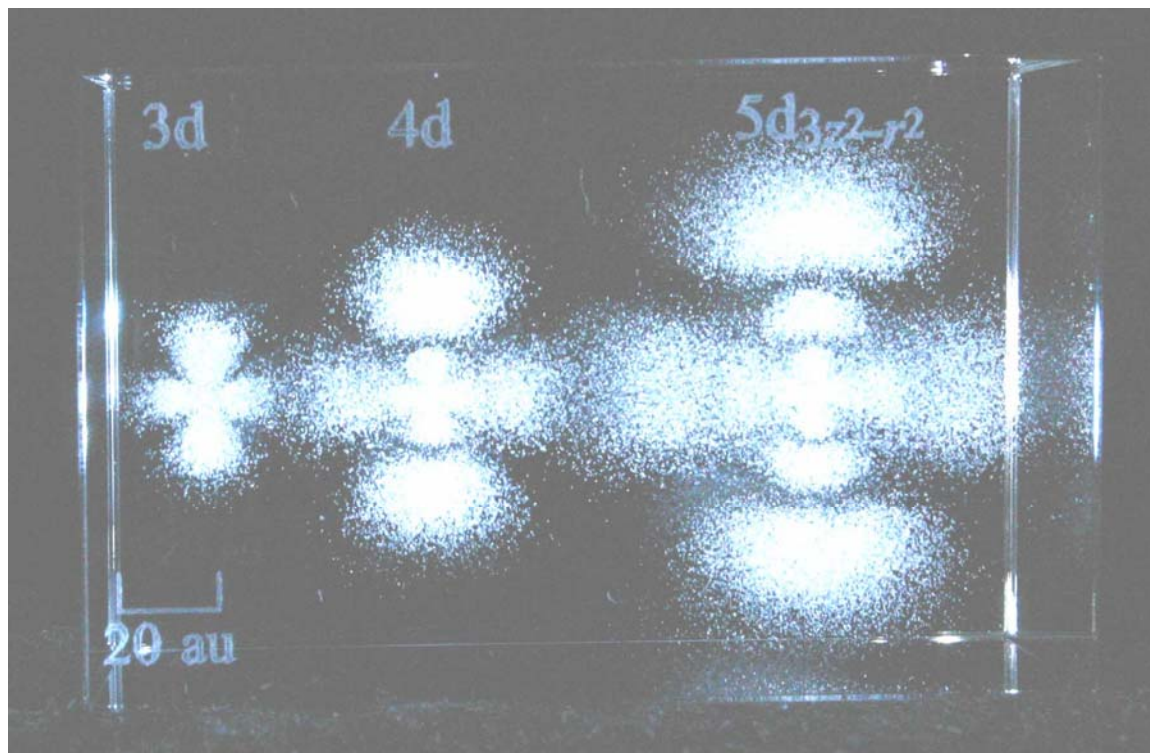


図1 水素原子の3d, 4d, 5d 原子軌道 ($3z^2 - r^2$)

原子・分子を扱うナノ領域において、電子状態を如何に可視化するかは研究・教育の両面から重要であるといわれている。ところで、電子の状態は三次元空間の各点で異なる値を持つデータとして表されるため、コンピュータ・ディスプレイ上ではその投影像しか得られず、これまでに偏光眼鏡による立体視や、特殊液晶ディスプレイによる裸眼立体視などが工夫されている。しかし、装置が一般的でないことと、バーチャルな像を頭の中で構成するという不自然さがあった。本研究は、レーザー彫刻法をこの分野に初めて適用し、これまでにない「手の中で実物が回転できる」ナノ領域の電子状態の可視化を実現したものである。

- [1] Sumio Tokita, Takao Sugiyama, Fumio Noguchi, Hidehiko Fujii and Hidehiko Kobayashi, "An Attempt to Construct an Isosurface Having Symmetry Elements", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **5**, No. 3, 159-164 2006. [2] Sumio Tokita, Nakako Tokita, Teruo Nagao, "A Three-Dimensional Representation of Born's Probability Densities of Hydrogen Atomic Orbitals in Glass Blocks", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **5**, No. 3, 153-158 2006. [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EX02 兵庫県立大学(姫路). [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EX02 東工大(大岡山). [5] 時田那珂子, 時田澄男, "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EX02 高知大学(高知). [6] <http://www.ecosci.jp/sa07/NEBULA01.pdf> [7] <http://www.ecosci.jp/sa07/NEBULA02.pdf>