

# 水素原子のオービタルの電子辞書化に関する研究

Development of Electronic Dictionary of Hydrogen Atomic Orbitals

埼玉大学工学部応用化学科<sup>\*1</sup>, 放送大学<sup>\*2</sup>

時 田 澄 男<sup>\*1</sup>, 木 戸 冬 子<sup>\*2</sup>

Department of Applied Chemistry, Saitama University<sup>\*1</sup>, The University of the Air<sup>\*2</sup>

Sumio TOKITA<sup>\*1</sup>, Fuyuko KIDO<sup>\*2</sup>

A novel representation of hydrogen atomic orbitals (1s-6h) with a combination of contour surfaces, contour maps, and their pseudo 3-dimensional displays were developed. Animated images (digital video) of their representations are stored on a compact disk (CD) together with moving pictures of simulations of standing waves on a circular membrane (SWCM). The CD on a multimedia personal computer provides an electronic dictionary to show animations in several windows for the comparison of wave character of orbitals with SWCM. Random access character of the CD also provides representation of desired combination of orbitals to understand mutual relation of selected orbitals.

## 1. はじめに

量子化学は、電子の状態を記述する第1原理である。化学は物質学であり、化合物の性質は電子状態で明らかにされる。有機化学を志す我々にとっても量子化学にもとづく分子設計や反応設計が不可欠な時代となった。量子化学の基礎を理解するために重要であるオービタルは、波動と粒子の二重性を持つ電子の状態を表しているため、その本質を理解するのが難しい。このことは多くの研究者が水素原子のオービタルの可視化を試みる理由の一つとなっている<sup>1)</sup>。たとえば、菊池らは、水素原子の  $2p$  軌道  $\chi_{2p}$  とその電子密度分布  $\{\chi_{2p}\}^2$  を極表示、等高線表示、擬3次元表示で示し、また  $4f$  軌道までの3次元等値曲面図を表示した<sup>2)</sup>。また、著者の一人時田は、 $X$  軸上での  $s$  軌道の関数値変化、 $XY$  平面上での  $2p_x$  軌道の関数値変化とその切断面の表示、 $2p_x$  軌道の等値曲面の連続回転表示、 $1s, 2s, 2p_x, 3s, 3p_x, 3d_{xy}$  の断面図のカラー表示、7個の  $4f$  軌道の等値曲面表示、原子軌道の電子雲表示など、種々のパソコン用可視化プログラムを開発した<sup>3)</sup>。

しかしながら、今までの報告のほとんどは静止画であり、動画(アニメーション)の例は少ない。Whitnellらは、原子軌道のVolume Rendering, Isosurface, Slicingをアニメーション化した<sup>4)</sup>。著者らは、CG (Computer Graphics) アニメーションのMPC (Multimedia Personal Computer)<sup>5)</sup>によるデジタルビデオ化を検討している。たとえば、追記型レーザーディスクを用いたオービタルの等値曲面の3次元CGアニメーション等<sup>6, 7)</sup>を発表してきた。また、これらのデジタルビデオを大容量かつランダムアクセスを特徴とするCD-ROMに記録し、類似性や対比性のある画像の同時表示機能、検索や索引機能を付加した電子辞書化についても検討している<sup>8~10)</sup>。

## 2. 量子化学におけるオービタル

N. Bohrは、電子が原子核のまわりを円運動していると考えた。この電子の運動する経路をBohrは軌道 (orbit) と呼んだ。量子化学では、電子はボーア模型のように一定の軌跡を描いて運動しているわけではなく、その状態はSchrödingerの波動方程式によって記述される<sup>3)</sup>。1つの電子の波動方程式の解である波動関数をオービタルまたは軌道 (orbital) と呼ぶ<sup>3, 11~15)</sup>。

電子のオービタルのエネルギーは、量子化されている。オービタルは、主量子数  $n$ 、方位量子数  $l$ 、磁気量子数  $m$  の3種類の量子数で表され、方位量子数  $l=0$  のとき  $s$  軌道、 $l=1$  を  $p$  軌道、 $l=2$  を  $d$  軌道、 $l=3$  を  $f$  軌道、以

下,  $l=4, 5, 6, \dots$  に対応してアルファベット順にg, h, i... 軌道と呼ぶ.

### 3. 円形膜の振動のシミュレーション

力学的な問題の一つに, 周囲を固定した円形膜の振動があり, ドラムの振動がこれに相当する<sup>8)</sup>. これは, 2次元の波動方程式で表され, このときに表れる定常波はベッセル関数を用いてシミュレーションできる<sup>8)</sup>. 図1に方位節線(直線状の節線)の数( $i$ )が1で, 動径節線(円形の節線)の数( $j$ )が1の表示例(アニメーションの一部の画像)を示す. 図2には, 他の振動モード( $i, j$ の値が異なる)も含めて, 変位を色の濃さで表現した図を示した.

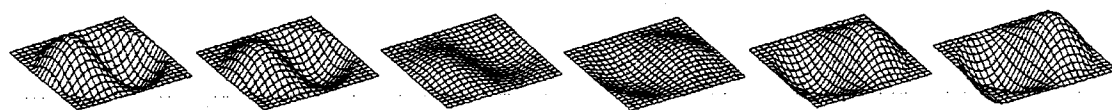


図1. 円形膜の振動のシミュレーション ( $i=1, j=1$ における振動)

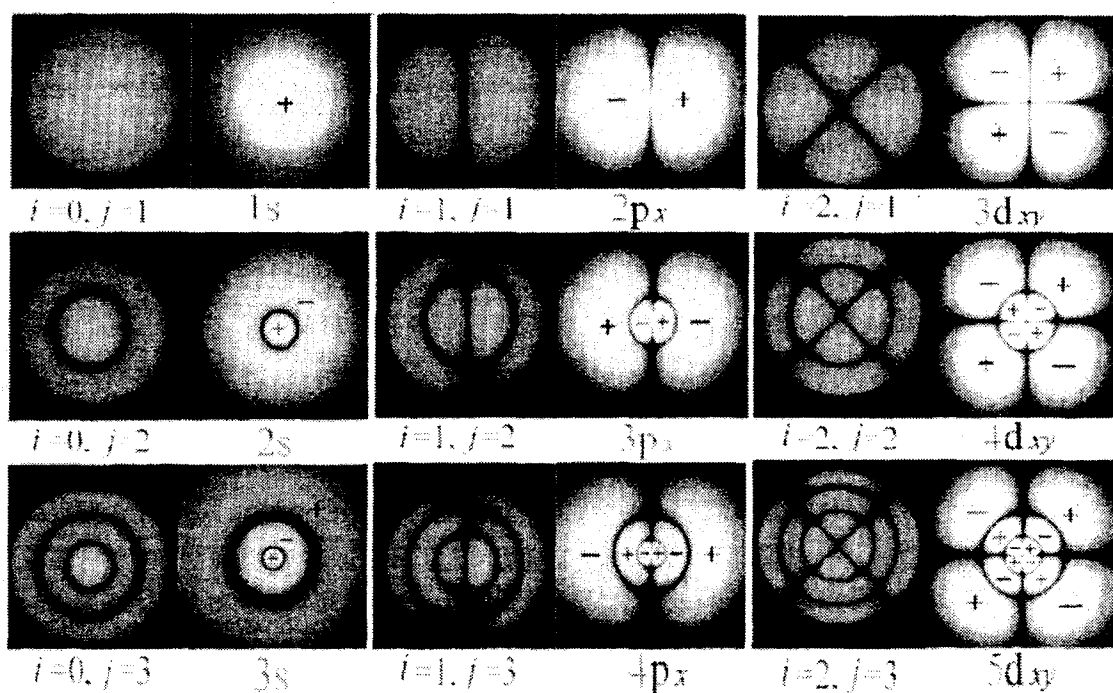


図2. 水素原子のオービタル (1s, 2p<sub>x</sub>...各々右側) と, 周囲を固定した円形膜の振動 (モードを $i, j$ で示す. 各々左側) との対比

### 4. オービタルの波動性

波動方程式を解くことにより求められるオービタルには, 波動性がある<sup>7)</sup>. このことは, 波動方程式の解を図示して対比することができる. たとえば, 図2は, 水素原子の1s, 2s, 3s, 2p<sub>x</sub>, 3p<sub>x</sub>, 4p<sub>x</sub>, 3d<sub>xy</sub>, 4d<sub>xy</sub>, 5d<sub>xy</sub> オービタルの断面における関数値の絶対値の大きさを白地の濃さ(明るさ)で表したものと, 円形膜の振動を対比させたものである<sup>9, 11~13, 16)</sup>. また, 図3は, 水素原子の2p<sub>x</sub>原子軌道のX軸を含む平面(たとえばXY平面)における関数値を高さ方向に図示したもので, 2次元平面における情報を図示しているのにもかかわらず, みかけ上は3次元の図に見えることから, 擬3次元表示と呼ばれている. 円形膜の振動における変位の量を示す図(図1)と比較すると, 縦軸の意味が異なるにもかかわらず, 明らかな対比性を認識することができる.

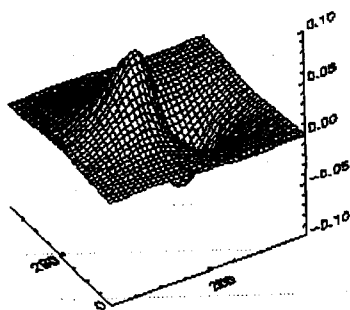


図3. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道のXY平面における関数値変化

## 5. 可視化技術とマルチメディア

### 5.1. コンピューターにおける可視化技術

昨今のコンピューターの発達著しく、高速な演算処理が容易になった。コンピューターによる図形処理 (Computer Graphics, CG) においては高速演算が必要であるが、低価格のハードウェアでもこの要求に対応できる範囲が拡大してきた。また、ビデオメモリなどの増強により、多くの色を使った3次元CGについても高速に描けるようになってきている。CGを利用した可視化技術 (ビジュアル・テクノロジー) は、実際には見ることができないオービタルなどの微視的な世界の解析に有用である。コンピューターを専門としない科学・技術分野の研究者にとっても、この方法による可視化の重要性が認識されつつある。これら研究者の可視化の要求はその専門により多種多様であるため、望む画像を得るためには研究者自身が専用の可視化プログラムを組む必要があった。しかし、CGによる可視化には高度で専門的な技術が必要であるため、これらプログラムの開発には多大な工程を費やす事がしばしばである。最近、このような工程を削減し、多様な用途に対応した可視化ソフトウェアとして、PV WAVE (主としてパソコン用)<sup>17)</sup> や AVS (主としてワークステーション用)<sup>18)</sup> などが市販されている。

### 5.2. コンピューターとマルチメディア<sup>19)</sup>

最近のコンピューターのハードウェア技術の発達については前述したが、特にパソコン (Personal Computer, PC) の分野での技術進歩は著しく、家庭にまで広く普及している。これは、ハードウェア技術の進歩で安価に購入が出来る様になったことと、ソフトウェア技術の進歩でコンピューターの専門家でなくても容易に操作できる様になったことによるものである。特に、本研究で使用したDOS/V機と呼ばれるいわゆる世界標準のパソコンにおいては、要素技術の発達等が著しい。DOS/V機の標準OS (Operation System) であるWindowsでは、キーボードの文字入力による操作 (Character User Interface, CUI) よりも、マウス等による視覚に訴える図形操作 (Graphical User Interface, GUI) を採用することにより、操作性が向上している。

Windowsでは、MME<sup>20)</sup>を標準で組み込むことで、パソコン上でのマルチメディア環境 (MPC) を実現して利用の可能性を大きく広げた。MPCのレベルを表1に示す。昨年発売されたWindows 95 は、ユーザインターフェイスがさらに向上し、マルチメディア関連の機能も充実している。MPCの標準的記録メディアであるCD-ROM (Compact Disk Read Only Memory) は、ランダムアクセスが可能で、約 600 Mbytes の大容量データを記録できる。

このように、コンピューターが普及し、マルチメディア技術が広く一般化したことにより、電子図鑑や電子辞書がいろいろな分野で開発されつつある。

表 1. MPC (Multimedia Personal Computer) のいろいろなレベル

比較項目	MPC Level 1 (1991年)	MPC Level 2 (1993年)	MPC Level 3 (1995年)
中央演算処理装置 (CPU)	80386SX, 16 MHz以上	80486SX, 25 MHz以上	Pentium, 75 MHz以上
ハードディスク (HD) 容量	30 Mbytes以上	160 Mbytes以上	540 Mbytes以上
CD-ROM (Compact Disk Random Access Memory) の転送速度	150 Kbytes/sec	300 Kbytes/sec以上 倍速	600 Kbytes/sec以上 4倍速
ビデオメモリ	2 Mbytes以上	4 Mbytes以上	8 Mbytes以上
ビデオメモリが取り扱う標準的な画素数と色数	640×480画素 各画素256色	640×480画素 各画素65536色	640×480画素 各画素65536色

## 6. オービタルに関連する画像のデジタルビデオ化

本研究では、まず、1s~6h 原子軌道の等値曲面・擬3次元・等高線の個別の3次元CGを作成し、次いでそれらを組み合わせてデジタルビデオ化した。また、オービタルの波動性と力学的な円形膜の振動を対比させる新しい表現方法についても検討した。

### 6.1. 等値曲面表示

等値曲面は、波動関数がある一定値をとる座標で構成される曲面である。図4に、AVSを利用して作成した水素原子の6h ( $65z^5 - 70z^3r^2 + 15zr^4$ ) 原子軌道の等値曲面を示す。波動関数が正の値をとるときを青で、負の値をとるときを赤で表し、さらに立体感を表現するために、CGのレンダリング技術を用いている。レンダリングとは、立体物のデータにシェーディング (絵に陰影を付ける処理) を行ないCGを仕上げることで、図4では3個の光源を配置して立体感を演出している。

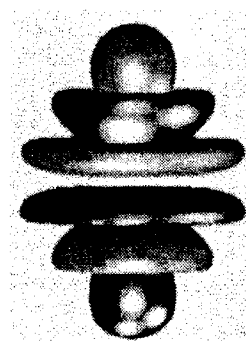


図4. 水素原子の6h ( $65z^5 - 70z^3r^2 + 15zr^4$ ) 原子軌道の等値曲面表示

### 6.2. 擬3次元表示

擬3次元表示の意味は、すでに4節で述べた。すなわち、波動関数の2次元平面における関数値変化を擬似的に3次元のグラフに表示したものである。図5に、水素原子の  $2p_x$  原子軌道の擬3次元表示を図1とは別の角度から見た図で示す。

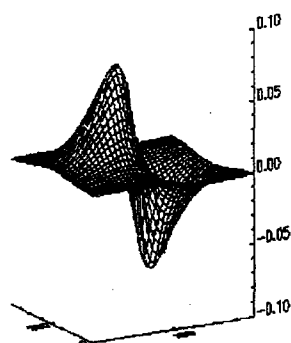


図5. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道の擬3次元表示

### 6.3. 等高線表示

等高線は、波動関数のある断面上で関数値の等しい点を結んだものである。線画による表示 (図6左) と、関数値の変化を色の变化により補間する表示 (図6右) がある。

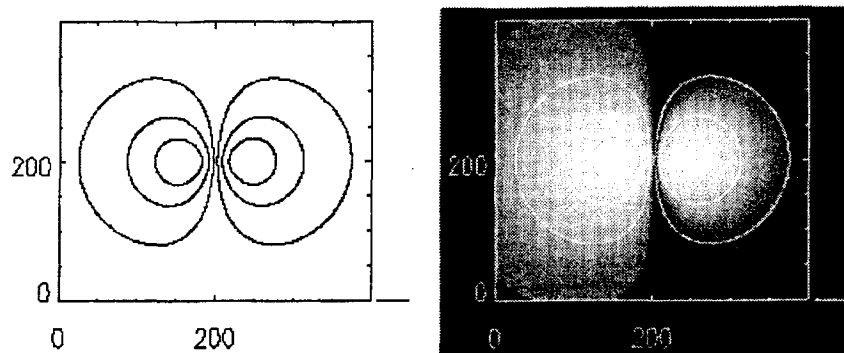


図6. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道断面の等高線表示 (内側の等高線ほど関数値の絶対値が大きい)

### 6.4. 画像の組み合わせ表示

等値曲面、擬3次元、等高線も、それぞれが波動関数の1つの側面しか表現できない。これらを組み合わせることにより、もっと表現力のある画像が作れないだろうかと考え、図7や図8のような画像を作成した。図7は、等高線と擬3次元を組み合わせた表示であり、図8は、等値曲面に等高線を組み合わせた表示である。

これらの図から、組み合わせ表示の方が、個々の表示より高い表現力を与えることが判る。

## 7. デジタルビデオ化の手続き

6節で示したとおり、静止画でも組み合わせ法などの工夫で、表現が高められることが明らかとなった。しかし、静止画ではどうしても表現に限界がある。そこで、さらに座標軸の移動や回転等の動きを加え (アニメーション化)、デジタルビデオ化した。このとき、LD (Laser Disk) を用いる方法とMPC上でソフトウェア的に作成する方法の2種を検討した。

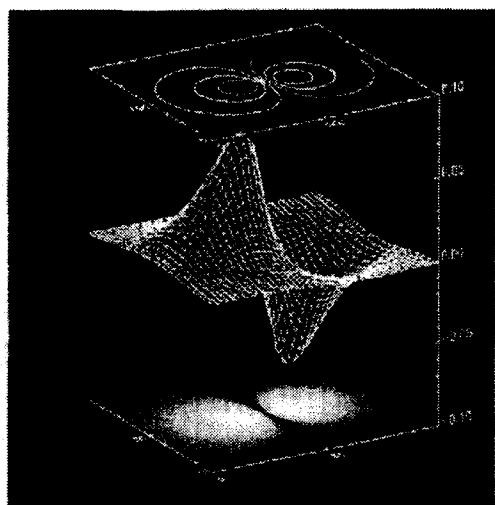


図7. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道の擬3次元表示と等高線の組み合わせ表示

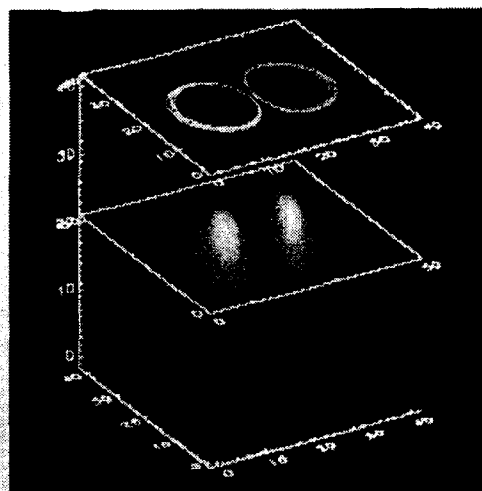


図8. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道の等値曲面と等高線の組み合わせ表示

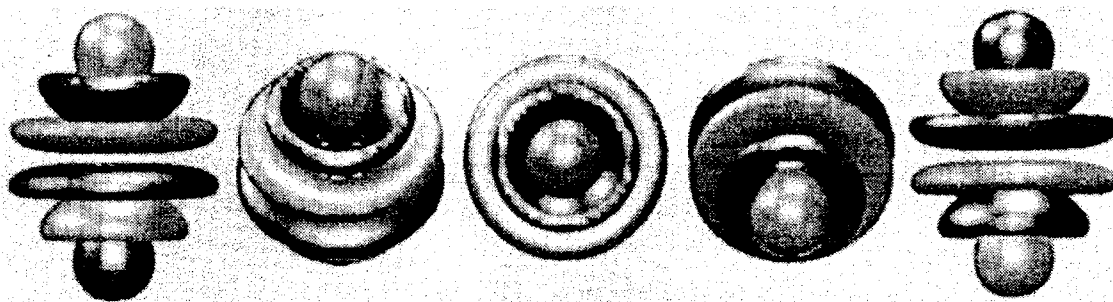


図9. 水素原子の  $6h$  ( $65z^5 - 70z^3r^2 + 15zr^4$ ) 原子軌道のデジタルビデオのスナップショット (X軸まわりに回転させたもの)

### 7.1. LD (Laser Disk) によるデジタルビデオ化

この方法による手続きは以下の通りである。

- (1) AVSを用い水素原子のオービタルの等値曲面表示プログラムを作成する<sup>1)</sup>。
- (2) 1フレーム<sup>21)</sup>毎に(1)の等値曲面の座標軸を1度ずつ変化させて、360度回転し、各フレーム毎に下記①～②を繰り返す。
  - ① 追記型ビデオディスクレコーダー<sup>22)</sup>でLDの録画箇所を設定する。
  - ② 録画する画像を画面に呼び出す。
  - ③ コンピュータ画像をフレームスキャンコンバーター<sup>23)</sup>でNTSC標準TV信号に変換し、追記型ビデオディスクに記録する。
- (3) 追記型ビデオディスクレコーダーの編集機能を利用してアニメーション化する。
- (4) MPCのVideo for Windows<sup>24)</sup>で再生可能なデジタルビデオにするため、PCのビデオキャプチャボード<sup>25)</sup>を用いてLDの画像をデジタルビデオ (AVIファイル<sup>26)</sup>) に変換して取り込む。

LDを使用する場合、追記型ビデオディスクレコーダーの高い編集機能が使用できるため、大容量のアニメーションを作る際に、有効な方法であった。ただし、コンピュータの鮮明なデジタル画像を、NTSC標準TV信号に変換するため、画質が劣化する弱点がある。

図9に、本方法で作成したデジタルビデオのスナップショットを示す。

### 7.2. MPC上でソフトウェアを使用してデジタルビデオ化する方法

この方法による手続きは以下の通りである。

- (1) PV WAVEで水素原子のオービタルの表示プログラムを作成する。
- (2) 表示したデータをBMPデータ<sup>27)</sup>として取り込む。

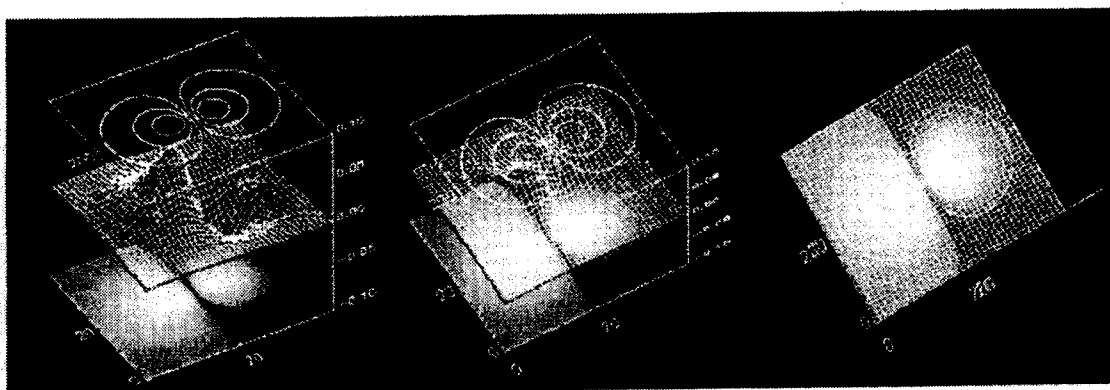


図10. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道のデジタルビデオのスナップショット (X軸まわりに回転させたもの)

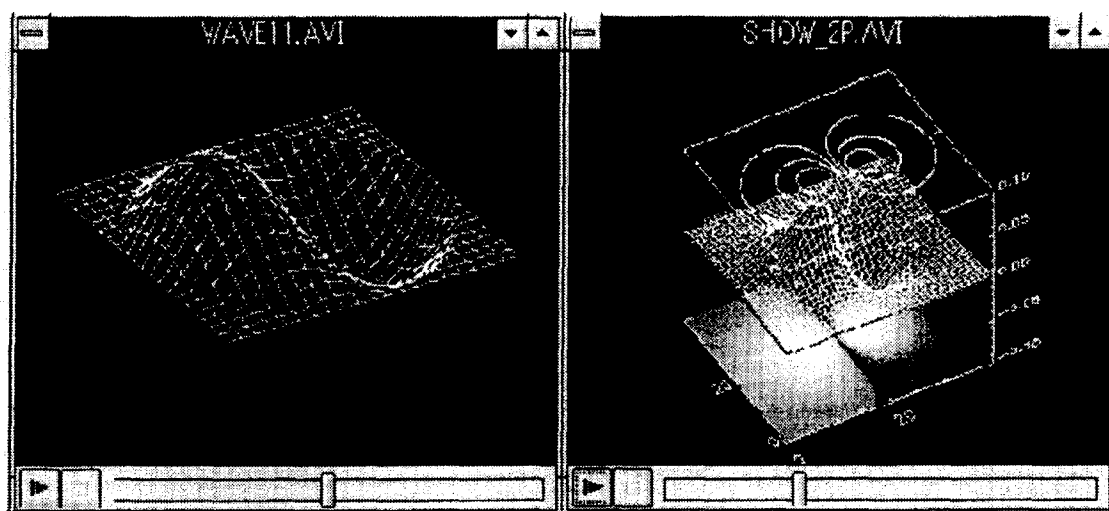


図11. 円形膜に起こる定常波 (左) と水素原子のオービタルにおける波動性 (右) の類似性の比較表示。左図は振動のアニメーション、右図は回転のアニメーションを、単独又は同時に行なえる。

(3) オーサリングツール<sup>28)</sup>を用いてアニメーションとして編集し、AVIファイルとして登録する。

この方法では、MPCで作成したデジタル画像をそのまま、アニメーション化するために、画質の劣化を回避することができる。ただし、編集機能に制限があるため大容量のデジタルビデオの作成には不向きである。

図10に、本方法で作成したデジタルビデオのスナップショットを示す。

## 8. 電子辞書化への取り組み

最近のMPCには、CD-ROMドライブが標準装備されている。本研究では、上述した動画や静止画をCD-Rに記録してCD-ROMとした<sup>29)</sup>。MPCにはデジタルビデオを複数同時に表示する機能がある。そこでこのCD-ROMの画像から種々の関連する画像を表示させるプログラムを作成した。たとえば、水素原子のオービタルにおける波動性と円形膜に起こる定常波の類似性を比較表示したり (図11)、 $1s \sim 6h$  オービタルの一部を任意に組み合わせ表示 (図12) して相互関係が見られるような機能を付加した。さらに、オービタルの一覧表示 (図13) に索引機能を付加して、そこから関連情報を見るような検索機能を付加して、オービタルの電子辞書を作成した。この方法は、CD-ROMのランダムアクセス機能により、検索時に表示したい画像をすぐ見ることができ、有効であった。

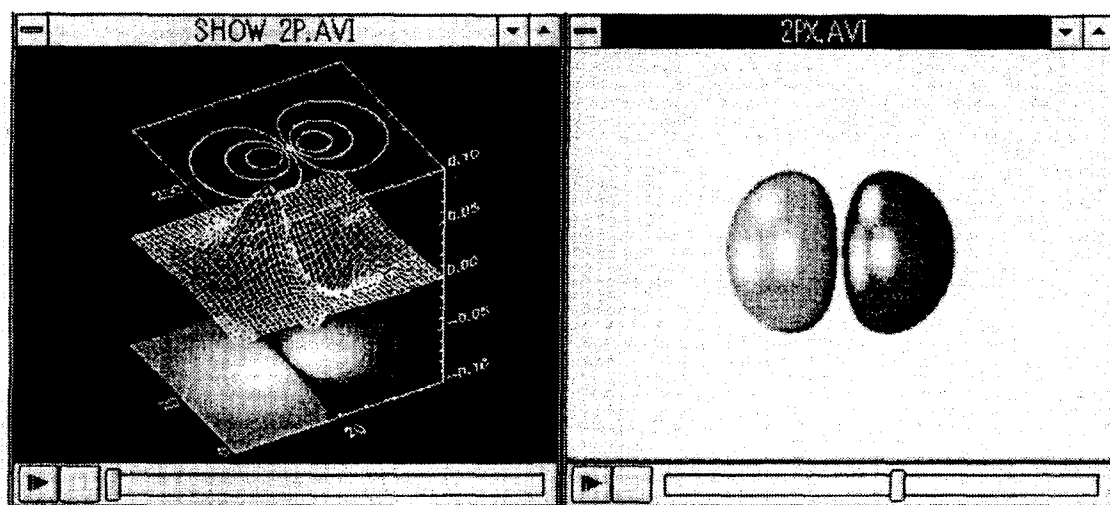


図12. 水素原子の  $2p_x$  原子軌道の擬3次元表示と等高線の組み合わせ表示 (左) を等値曲面表示 (右) と並べて出力した例 (それぞれを回転表示させる事ができる)

## 9. まとめ

本研究では、水素原子のオービタルについて様々な可視化方法を研究し、デジタルビデオ化した。類似のものとしては、米国のCaltechビデオ教材の化学アニメーションシリーズ第1巻「原子軌道」がある。これは、CG技術を使って視覚的に解説したビデオテープである。ビデオテープの場合、説明の順序を変更することは困難であるが、CD-ROMを使用した場合、自分の見たいものを自由に選択して、自由な順序で見ることができる。著者らはこの特性を充分生かすために、検索・索引などの辞書の機能についてさらに検討している。

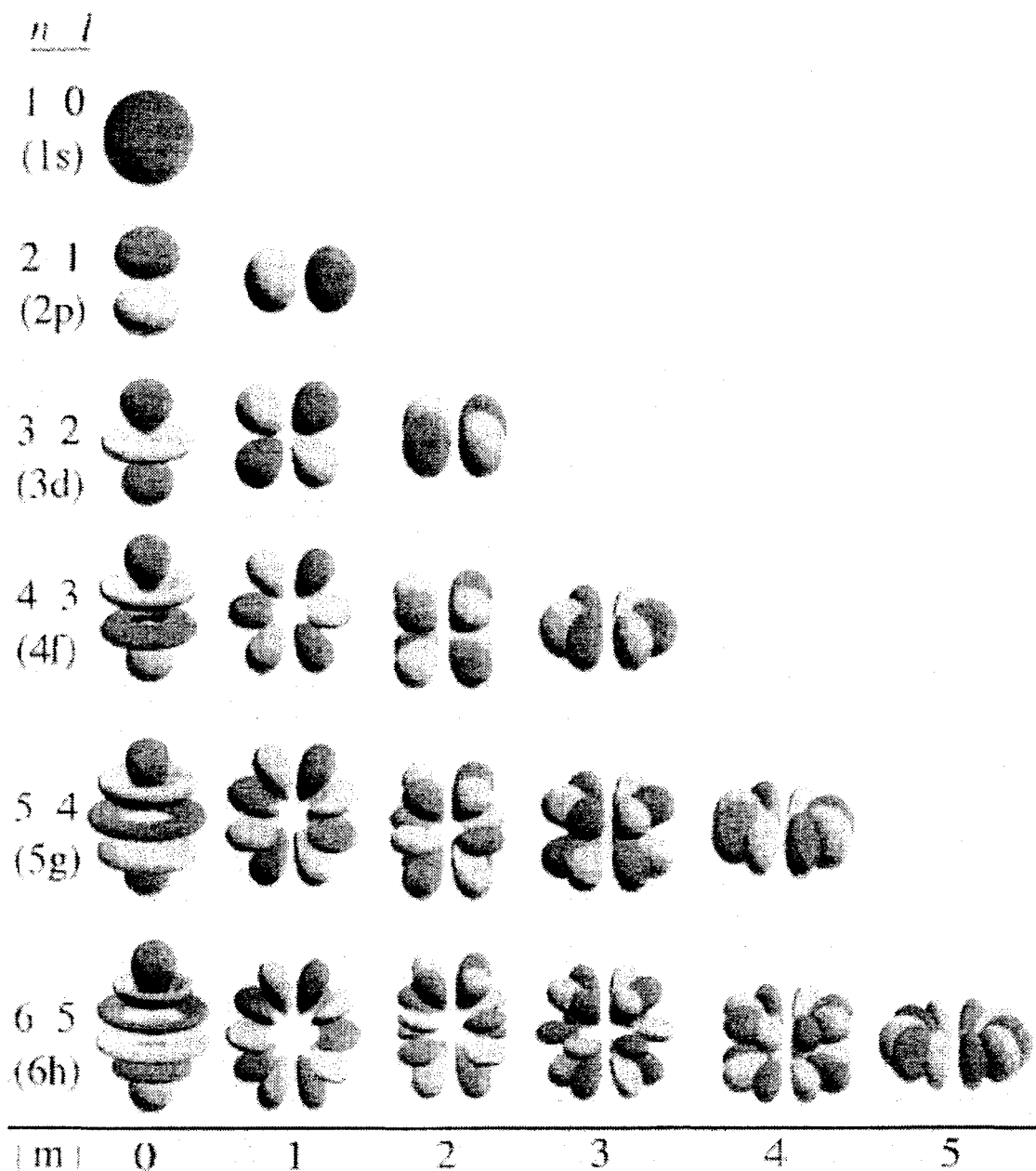


図13. 水素原子のオービタルの一部を一覧表示させた例 (主量子数 $n$ —方位量子数 $l=1$ の場合のみ表示)

また、画像の拡充についても計画している。現在は、水素原子のオービタルを対象としているが、今後は、2原子分子を手始めとして、さらに複雑な分子の可視化や電子辞書化を検討していきたい。また、インターネット上での公開も、準備中である。

本研究を行うにあたり、放送大学東京第一学習センターの東千秋助教授、文部省放送教育開発センターの



菊川健教授、川淵明美助教授、近藤智嗣助手に種々のご助言ご協力頂いたことを心より感謝いたします。また、多くのご助言と資料を提供して頂いた立教高校の渡部智博教諭、CD-ROM製作と本文の執筆にご協力頂いた放送大学東京第一学習センターの時田那珂子研究補助員、ワークステーションの環境整備等でご協力頂いた埼玉大学工学部の杉山孝雄技官に深く感謝いたします。

#### 参考文献および注

- 1) 時田澄男, 渡部智博, 木戸冬子, 前川仁, 下沢隆, 「水素原子の原子軌道の可視化」, *J. Chem. Software*, 3, 35 (1996). この *Journal* の内容は, WWW の化学ソフトウェア学会のホームページから見る事ができる. そのアドレスは, <http://cssjweb.chem.eng.himeji-tech.ac.jp/>
- 2) 菊池修, 鐸木啓三, 「電子の軌道」, 共立出版, 1984.
- 3) 時田澄男, 「目で見る量子化学」, 講談社, 1987.
- 4) R. M. Whitnell, E. A. Fernandes, F. Almasszadeh, J. J. C. Love, B. M. Dugan, B. A. Sawrey and K. R. Wilson, "Multimedia Chemistry Lectures", *J. Chem. Educ.*, 71, 721-725 (1994).
- 5) MPC とは, Multimedia Personal Computer のことで, 米国 SPA (Software Publishers Association) の下部組織であるマルチメディア PC マーケティング協議会 (Multimedia PC Marketing Council) が種々の規格 (表 1) を発表している.
- 6) 木戸冬子, 東千秋, 時田澄男, 化学ソフトウェア学会 94 研究討論会講演予稿集, 213 (1994), 苫小牧.
- 7) 木戸冬子, 東千秋, 時田澄男, 日本化学会第 69 春季年会講演予稿集, 3F326 (1995), 京都.
- 8) S. Tokita, F. Kido, T. Sugiyama, N. Tokita and C. Azuma, PACIFICHEM95 Book of Abstracts, 062 (1995), Hawaii.
- 9) 時田澄男, 木戸冬子, 東千秋, 時田那珂子, 大黒義裕, 杉山孝雄, 日本化学会第 70 秋季年会講演予稿集, 3P5 α 12 (1996), 福岡.
- 10) 時田澄男, 木戸冬子, 東千秋, 時田那珂子, 大黒義裕, 杉山孝雄, 化学ソフトウェア学会 '96 研究討論会講演予稿集 (1996), 東京.
- 11) 時田澄男, 化学, 51, 410-411 (1996).
- 12) 時田澄男, 現代化学, 211, p. 57-61 (1988).
- 13) 時田澄男, 放送大学補助教材, 「オービタルとは何か」 (1993).
- 14) 時田澄男, 現代化学, 279, p. 28-32 (1994).
- 15) 時田澄男, 「カラーケミストリー」, 丸善, 1982.
- 16) 川橋正昭, 豊岡了, 加藤寛, 時田澄男, 「目で見る力学」, 講談社, 1990.
- 17) PV WAVE とは, 米国の Visual Numerics 社が開発した可視化ソフトウェアであり, 医療・建築などの分野の研究に多く用いられている.
- 18) AVS (Application Visualization System) は, 米国の AVS 社 (アドバンスト・ビジュアル・システム社) が開発した可視化ソフトウェアである. 幾何データ, イメージデータ, ボリュームデータ, グラフの表示, およびこれらの統一的な表示機能を持っている.
- 19) マルチメディアとは, ここではコンピューターで映像・音声・文字などの情報を複合して一元的に扱うことをさす.
- 20) MME (Microsoft Multimedia Extension) とは, Windows 用に開発されたマルチメディア機能を拡張するドライバソフトウェアである. 主な機能として, サウンド機能の強化, アニメーションの再生, 外部 A/V 機器の制御があり, デジタルビデオを制御する API (Application Programming Interface) である MCI (Media Control Interface) を持っているのが特徴である.
- 21) フレームとは, ビデオを構成する一つ一つの画面のことである.
- 22) 今回用いた追記型ビデオディスクレコーダは, SONY 社製 LVR-3000AN で, 保存・耐久性に優れた LD (Laser Disk) を用い, 高品位な映像・音声記録できる. 1 枚のディスクに, 片面に静止画 43,500 枚, 動画で

24分の記録ができ、静止画と動画の混在も出来る。また、個々のフレームにナンバーが割り付けられているために、任意の場所にフレーム単位の記録再生が出来る。

23) フレームスキャンコンバータとは、コンピューターが出力するRGB信号をNTSC標準TV信号に変換するものである。今回使用したのは、フォトロン社製FSC-64000VZで、パーソナルコンピューターからワークステーションまで、リアルタイム (実時間) , フルカラー (約1,677万色) で、また、水平周波数24~80 kHzで対応している。

24) Video for Windowsとは、MPC上で、デジタルビデオを扱うために Microsoft社が提供している標準ソフトウェアである。

25) ビデオキャプチャボードとは、NTSC標準TV信号のビデオデータをRGB信号としてパソコンに取り込むために使用されるパソコン内蔵型の装置である。

26) AVIファイルとは、Video for Windowsが扱うデジタルビデオファイルの形式である。

27) BMP (bitmap) データとは、Windowsが標準で取り扱う静止画ファイルの記録方式である。

28) オーサリングツールとは、マルチメディアを用いた作品を便利に作成をするためのソフトウェアであり、文字・音声・画像などの素材の編集、データ形式の変換などが行える。本研究においては、Adobe社のAdobe Premiere for Windows Ver. 2.0を使用した。

29) CD-R (Recordable Compact Disk) は、近赤外吸収色素を用いて半導体レーザー光による情報の記録が可能としたCDで、書き換えが不可能なため、追記型ディスクとも呼ばれている。今回、書き込みに使用した機種は、Philips社のCDD521である。