電子を描く (6) – Z 軸まわりに円筒対称な節面による整理

時田 澄男

埼玉大学名誉教授, 〒338-8570 さいたま市桜区下大久保255

email: tokita@apc.saitama-u.ac.jp

(Received: June 30, 2016; Accepted for publication: July 26, 2016; Online publication: August 10, 2016)

水素原子の波動方程式を解いて得られる極座標で表される原子軌道のうち、球殻状の節面を持たない軌道の平方を、ガラスブロック内に実3次元で彫刻した。Z軸に関して円筒対称な節面の規則的な変化が観察できた。

キーワード: 電子, 可視化, 水素原子, 原子軌道, 複素軌道関数, 実軌道関数, 平面節面, 球殻状節面, 円錐面節面, 等値曲面, 電子雲の実3次元表示

1 はじめに

これまで、磁気量子数 m が0の s, p, d, および f 軌道における円錐面節面の現れ方 [1] や、複素関数を含む 3d 軌道の平方の可視化 [2] を取扱った。今回は、これらを、h 軌道まで拡張し、軌道の形状や節面の現れ方を調べる。

2 可視化結果

極座標(動径波動関数と球面調和関数の積)で表される 3d 軌道(主量子数 $n = 3$, 方位量子数 $l = 2$)は5種あるが、それらの平方 $|\chi_{32m}|^2$ は3種の図で表される [2]。

この例のように、方位量子数 l の値が、主量子数 n の値より 1 だけ少ない軌道は、球殻状節面を持たない。今回は、s 軌道($n = 1$)から h 軌道($n = 6$)までの球殻状節面を持たないすべての軌道の平方(電子を見出す確率)について、実3次元ガラス内彫刻 [3] による可視化を試みた。

可視化の結果を Figure 1 と 2 に示す。

Figure 1 は、軌道を Z 軸方向から眺めたものである。これらの図では、すべての軌道が Z 軸に関して円筒対称であることが示されている。

Figure 2 は、軌道を Y 軸方向から眺めたものである。 χ_{nl+m} と χ_{nl-m} を組み合わせる(1 次結合をとる)と、実関数のペアが生じる。その過程を表す数式の実例は、前回の

補足資料(電子付録)に示した [4]。これらの実関数のペアには、Z 軸まわりに円筒対称な、円錐面および平面の節面が存在するが、それらは、各々のペアについて、同じ形状となる。

Figure 2 においても、上記の Z 軸まわりに円筒対称な節面が、電子の存在確率の少ないところ、つまり、暗部として観察できる。

Figure 3 に、これらの節面のかたちを、模式的に示した。節面は、すべて、原点(原子核の位置)を通る。図では、それらの数が分かり易いように、上下にずらして描いた。

節面の数の増減のしかたは極めて規則的である。すなわち、図の下側(主量子数 n の値が増す方向)に行くにしたがって、節面が1つずつ増加する。また、図の右側(磁気量子数 m の絶対値が増す方向)に行くにしたがって、節面が1つずつ減少する。これらの節面が Z 軸となす角を計算する方法は、補足資料(電子付録)に記した。

Figure 4 は、Figure 1 と 2 で表される軌道の等値曲面を描いたものである。これらの図では、軌道胞の数が、図の下側(主量子数 n の値が増す方向)に行くにしたがって、1つずつ増加し、図の右側(磁気量子数 m の絶対値が増す方向)に行くにしたがって、1つずつ減少している。この変化の様子は、Figure 3 における節面の数の変化の様子と同じである。Figure 4 では、Z 軸まわりに円

Figure 1. Probability density distribution in the 3-dimensional representation of the squares of hydrogen χ_{nlm} observing through z axis. Glass size: 4 x 4 x 4 cm.

Figure 2. Probability density distribution in the 3-dimensional representation of the squares of hydrogen χ_{nlm} observing through y axis. Glass size: 4 x 4 x 4 cm.

Figure 3. Schematic representation of the planar (orange) and conical (blue) nodes symmetrical about the z axis.

Figure 4. Isosurfaces of the squares of hydrogen χ_{nlm} .

筒対称な節面を読み取ることは難しい。しかし、電子の存在確率をより正しく表現した Figure 2 と見比べると、実数化の過程で、2つの軌道胞の間に Z 軸まわりに円筒対称な節面が生じることが理解される。

実数関数化された原子軌道の図が複雑であるのに比べて、極座標表示(複素関数を含む数式)を可視化した Figure 4 は、極めて単純である。前者はカオスに満ちているが、後者は、規則的であるという指摘がある [5]。

3 おわりに

極座標表示で表される水素原子の原子軌道における電子の存在確率を、ガラスブロック内に彫刻した。この彫刻の暗部は、実関数化された軌道における Z 軸まわりに円筒対称な節面と同じ位置に観察できた。軌道のかたちは単純で、規則性が高いという特徴がある。次回は、実関数化で生じる一見複雑な(カオスに満ちた)原子軌道の

かたちが、Z 軸を含む平面節面で整理することによって統一的に理解できることを示す。

参考文献

- [1] S. Tokita, Visualization of Orbitals (4) Probability Density Distribution in the Three Dimensional Representation of Hydrogen p_z , $d_{3z^2-r^2}$, or $f_{5z^3-3zr^2}$ Orbitals in a Glass Block, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **14**, A38–A41 (2015); in Japanese; [CrossRef]
- [2] S. Tokita, Visualization of Orbitals (5) Probability Density Distribution in the Three Dimensional Representation of Hydrogen 3d Orbitals in a Glass Block, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **15**, A7–A12 (2016), in Japanese. [CrossRef]
- [3] Three-Dimensional Laser Sculpture of Orbitals, http://winmostar.just-size.jp/nebula/index_cover.html
- [4] https://www.jstage.jst.go.jp/article/jccj/15/1/15_2016-0002/_article/supplement/-char/ja/
- [5] G. L. Breneman, *J. Chem. Educ.*, **65**, 31 (1988). [CrossRef]

Visualization of Orbitals (6) Probability Density Distribution in the Three Dimensional Representation of Hydrogen 1s – 6h Orbitals in a Glass Block Part 1

Sumio TOKITA

Saitama University (Emeritus), 255 Shimo-Ohkubo, Sakura-ku, Saitama, Saitama, 338-8570, Japan
e-mail: tokita@apc.saitama-u.ac.jp

The solutions (χ_{nlm}) of the Schrödinger equation for the hydrogen atom contain the term $\exp(im\varphi)$. When $m = 0$, functions χ_{nlm} are real, however, in the cases of $m \neq 0$, functions χ_{nlm} are complex. Probability density distribution of $\chi_{n,n-1,m}$ ($n = 1, 2, 3, \dots, 6$) was sculptured in a glass block (Figures 1, 2). Each picture is symmetrical about the z axis. It was compared with a 3-D isosurface model such as Figure 4. Isosurface models can hardly show the entire region where an electron can be found. On the other hand, in the diagram of probability density distribution models, an electron is found everywhere around the nucleus. The number and shape of the planar and conical nodes symmetrical about the z axis are summarized in Figure 3.

Keywords: electron, visualization, hydrogen atom, atomic orbital, imaginary wave function, real wave function, 1s orbital, 2p orbital, 3d orbital, 4f orbital, 5g orbital, 6h orbital, planar and conical node symmetrical about z axis, isosurface, real 3-dimensional representation of an electron