CAVEとAVSを利用した原子軌道や分子軌道の表示

時田澄男○杉山孝雄 埼玉大学工学部応用化学科

利用環境: SGI Onyx3400, CAVE, AVS/Express MPE VR option

目的:水素原子の原子軌道や分子軌道は三次元の波動としての性質を持っている.等値曲面表示は、原子軌道や分子軌道の形状の表現に適している.軌道の可視化に CAVE を利用すると、どのような表現が可能になるか検討した.

方法:水素原子 2個を無限遠から近づけたときに、2つの原子核の間に電子の存在確率の高い部分ができて、その部分と原子核が静電力によって引き合う。水素分子の共有結合の安定性は、このように説明されている。この電子の存在確率を可視化すれば、共有結合の理解に役立つ 1)。本研究では、表題の方法で、これがどう改善できるか検討した。水素原子の 1s 原子軌道 2 個からできる結合性分子軌道を、600 pm × 300 pm の直方体内に置く。直方体を 101×51×51 点に分割し、各点における「分子軌道」、および、「分子軌道から求められる電子密度と 2 個の原子軌道から求められる電子密度の差(差電子密度)」を計算した。このデータを、パーソナルコンピューター上の AVS/Express で読み込み、等値曲面表示を行なった。原子間距離を変更して数種類表示したうちの 2 種類を図 1 上 (200 pm)、下 (74 pm) に示す。図 1 は、分子軌道(空色メッシュ表示)と、差電子密度 [正の場合(黒色メッシュ表示)は負電荷が大きいこと、負の場合(緑色メッシュ表示)は負電荷が小さいことを表わしている]を重ねて表示した。原子核は赤色の球で表示した。同じデータを Onyx3400 上の AVS/Express MPE VR option で読み込み、CAVE で表示した。原子軌道の表示は既報 2)を参照していただきたい。

結果: 平面ディスプレイによる表示と比較して、 CAVE では表示対象に入り込むことができる. すな わち、分子軌道や差電子密度を表わすメッシュの内 部に入りこんで周囲を観察できる. このため、共有 結合について従来とは異なった理解が可能になった.

結論: 平面ディスプレイでは不可能な,原子軌道や 分子軌道の新しい表現が実現できた.

文献: 1) 時田澄男, 現代化学, No. 192, 49-51 (1987). 2) 杉山孝雄, 時田澄男, 埼玉大学総合 情報センターニュース, 印刷中 (2002).

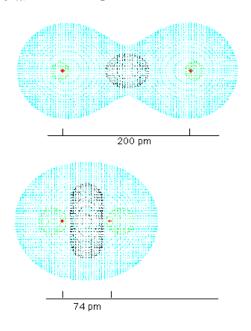


図1. 分子軌道と差電子密度の表示例