CAVE　を利用した水素分子軌道の可視化

杉山　孝雄，木戸　冬子，時田　澄男
埼玉大学　工学部　応用化学科

目的： 水素分子の共有結合を理解することは，あらゆる共有結合の理解のために重要である．今回筆者らは，理解の手助けとなるパーソナルコンピュータ（PC）および CAVE 上の動画を作成したので報告する．

方法と結果： 遠くに離れた2個の水素原子から，水素分子が生成する様子を示す動画表示を行った．表示には，PC 上の AVS (Appreciation Visualization System) Express 6.0 を使用した．分子軌道と差分電子密度の等値曲面の色付けは見やすいように工夫した．分子軌道関数は青色で表現して内部が見えるように半透明で表現した．水素原子核は赤色の点で表現した．水素分子電子密度と2個の水素原子の電子密度の差（差分電子密度）も表示した．差分電子密度が正の部分を黄色，負の部分を橙色として表現した．図１にそのスクリーンショットを示す．

動画は，2個の水素原子が近づいていき，分子軌道が生成，差分電子密度が徐々に増えていき，原子間距離 74 pm のとき，最大になることが表現できた．2個の水素原子核の間に，差分電子密度の正の部分すなわち電子密度が大きく負の電荷を持っている部分が存在し，正の電荷を持つ原子核を結びつける接着剤の役割を果たしていることが，視覚的に表現できた． PC 上では，分子軌道（図１下側）のみではなく，エネルギー曲線（左上），および原子記号による構造式（右上）も同時に表示した．エネルギーが極小のときに，電子が 2個の原子核の間の狭い部分に集まっていることがわかる．

しかし，平面では，実際の分子軌道の形状を立体的に把握するうえで限界があった．そこで，CAVE の利用を試みた．CAVE は，スクリーンが４面張ってある小部屋に入って立体の画像を観察する装置である．部屋の中を歩くと実際に立体があるかのように感じられる（仮想現実感が得られる）．CAVE 上では，PC上と同様のAVSが利用できる．PC上で各種の試行錯誤をおこなった後に，CAVE 上で確認するという手法を用いた．表示中のスナップショットを図２に示す（PC 上の表示の図１と対応する）．

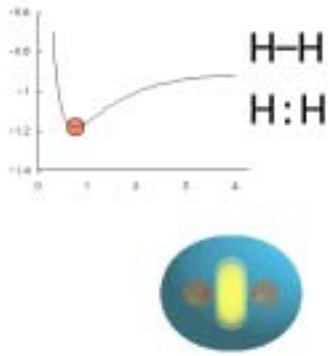

図.1 PC **上のスクリーンショット**

図.2 CAVE **上のスナップショット**

結論： CAVE による表示は以下の利点がある．外側から全体を観察（図2）した後，画像に近づいていって画像の中に入り込み，外側からでは見えにくい部分を細かく観察する．さらに，画像の中心部分から外側をみることができる．さらに一方の水素原子核の付近から観察して差分電子密度が増大する様子をみることもできる．複数の視点からの観察が，立体の把握に役立った．今回作成した動画は，複数の視点からの観察というCAVE の利点を生かすことにより，共有結合の概念の理解に役立つと考えている．