

## EX02

[研究展示]

### 原子軌道確率密度のガラス内部への高精細彫刻

○時田澄男<sup>1</sup>、時田那珂子

<sup>1</sup>埼玉大学名誉教授(〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255)

#### 【はじめに】

量子化学の学問分野を平易に解説するとき、学習者に知的興奮をもたらすような新しいカリキュラムを構築することを目的として、われわれは種々の試みを試行してきた [1]。この研究の一環として、原子内の電子状態に関する世界的にユニークな博物館展示（国立科学博物館 2003-2012 展示中）を行う一方、電子状態の可視化方法としてガラス内レーザー彫刻という世界初の試みも成功し、意匠登録を行った [2-9]。今回、後者について改良を加え、高精細化に成功したので報告したい。

#### 【方法および結果】

原子軌道の実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 [10] 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[11]。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購入して、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。同様にして、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。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。

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、今回、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。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れば幸いである。これは、分子模型の実物と写真の違いに相当する。

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が実現可能である。

#### 参考文献

- [1] たとえば, 時田澄男, 平成 15~18 年度 科学研究費補助金 基盤研究(B) 研究成果報告書 (15300267) 論理的思考力を育むための教育コンテンツの創成 (2007).
- [2] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第1280636(2006. 7. 28), 意願 2005-38068(2005. 12. 26)
- [3] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第129427(2007. 3. 17), 意願 2006-10175(2006. 3. 24)
- [4] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298894(2007.3.17),意願 2006-10176(2006.3.24)
- [5] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298428(2007.3.17),意願 2006-10177(2006.3.24)
- [6] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298429(2007.3.17),意願 2006-10178(2006.3.24)
- [7] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298430(2007.3.17),意願 2006-10179(2006.3.24)
- [8] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298431(2007.3.17),意願 2006-10180(2006.3.24)
- [9] 教育用模型, 時田澄男, 時田那珂子, 埼玉大学, 意匠登録 第 1298895(2007.3.17),意願 2006-10181 (2006.3.24)
- [10] 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).
- [11] 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).