

[資 料]

量子化学の学びにおける混成軌道の描画 ～大学初年次における化学・数学・プログラミングの融合に関する一考察～

田中 雄二^{1), 2), 3)}

Visualization of Hybrid Orbital using Gnuplot - Simple Script Drawing Spherical Harmonics Accelerates to Understand the Relationship between Chemistry, Mathematics and Programing -

Yuji TANAKA^{1), 2), 3)}

要 旨

理工系大学初年次の化学では量子化学の基礎を学ぶ。学習内容の一つに混成軌道がある。混成軌道を学ぶとき、合成波動関数の式とイラストを併記して説明がなされるが、その合成波動関数が図示された形になるということ暗記するだけになるケースが少なくない。また軌道の形を定める球面調和関数などの数学的な土台ができていないことも理解を深めにくい一因になっている。本研究では、球面調和関数を用いたコンピュータグラフィックスによる直感的な理解を目的として、Gnuplotを用いた混成軌道の形を示すサンプルスクリプトおよびその描画結果の紹介をする。

キーワード：量子化学, 混成軌道, Gnuplot, 球面調和関数

Abstract

Quantum chemistry involves various formulas of advanced mathematics. It is important to understand the characteristic graph shapes drawn by these formulas. The shapes of atomic orbitals are visualized based on spherical harmonic functions. There are many examples of graph display using spherical harmonic functions. However, there are few examples that show the procedure for drawing the shapes of hybrid orbitals. Hybrid orbitals are displayed as the sum of atomic orbital functions. This paper shows the drawing the shapes of hybrid orbitals from composed wave functions using Gnuplot. (Article Written in Japanese)

KEY WORDS : Quantum Chemistry, Hybrid Orbital, Gnuplot, Spherical Harmonics

1) 九州共立大学スポーツ学部
2) 九州共立大学共通教育センター
3) 学校法人福原学園 保健センター

1) Faculty of Sports Science, Kyushu Kyoritsu University
2) Career and General Education Center, Kyushu Kyoritsu University
3) Health Centers for School Corporation of Fukuhara Academy

1. はじめに

大学理工系学部では、教養の化学において量子化学の領域を基礎として取り扱う。教科書として指定されている（であろう）各種書籍¹⁻⁶⁾ではその内容を簡潔な記述で示しており、概略を掴みやすい構成となっている。けれども少し掘り下げようとするときシュレディンガーの波動方程式を詳しく取り扱っていくこととなり、「直交座標－極座標変換」の理解に始まり、常微分方程式・偏微分方程式・変数分離・規格化条件・確率論など大学で学ぶ数学（高等数学）に関する知識と応用が求められる^{7, 8)}。波動関数は距離（動径）の項と角度の項に変数分離を行い、それぞれの関数を取り扱っていくが、動径の項ではラゲールの陪多項式が登場し、角度の項においてはルジャンドルの陪多項式が出てくる。

これら陪多項式は大学入学間もない学生にとって未習の内容であり、ここの解説を化学の時間に確保するゆとりはないので、意味不明な状態で進められていくことになる。それでも変数分離がなされ、動径に関するラゲールの陪多項式を解いた結果の式が一覧で与えられるから、動径波動関数や動径分布関数が「距離に関する1変数関数である」と分かるので、高等学校までで学んできた数学の知識でその意味を理解することができる。角度の項ではルジャンドルの陪多項式、球面調和関数が登場し、そこに複素関数の実部を表現するための数学的手法も必要とする。加えて動径の項は2次元で表現できるのに対して角度の項は3次元での表現のため、ルジャンドルの陪多項式を解いた結果の式は直交座標系であれ極座標系であれ、得られた式から直感的に理解することが難しい。そのため「どのような形になるか？」というところで、書籍中にイラストとして描かれているものをそのまま受け入れることになる。

パーソナルコンピュータ（パソコン）を使った二次元・三次元のグラフ描画は色々な場面で活用されており、Microsoft社のExcel、MathWorks社のMATLABでは多くの書籍が出されている^{9, 10)}。また、無料のグラフィックスソフトウェアも多々あり、Octave¹¹⁾、Gnuplot¹²⁾、Scilab¹³⁾、Maxima¹⁴⁾、R¹⁵⁾、Pov-ray¹⁶⁾など、刊行されている書籍を参照しながら、あまり費用を掛けることなく描画スキルを習得していくことが可能なものがある。コンピュータグラフィックスとしての原子軌道や分子軌道の描画についての研究報告¹⁷⁻³⁸⁾もなされており、パソコンを使った学習方法の活用は、実感を

伴う学びに繋がるので教材研究や教育手法の拡張という観点で重要な役割を果たすことになる。数学における関数グラフの描画はGeoGebra^{®39)}を用いると簡便に行うことができる。

2024年現在、大学生のノートパソコン必携化（BYOD：Bring Your Own Device）が進んでいる。自らのデバイスにグラフ描画アプリをインストールすることで、学生個々で表計算やグラフィックス描画、プログラミングを『いつでも、どこでも』行える環境が整ってきている。筆者はExcelやGnuplotを用いて二次元・三次元のグラフ描画による理科教材用あるいはスポーツ統計学用の資料作成を行っている⁴⁰⁻⁴²⁾。特に三次元描画による関数の可視化は理解度を深める上で有用な手段の一つになっている。上述の球面調和関数も各種グラフ作成ソフトウェアによるサンプルプログラム（スクリプト）がいくつもあり、見本通りに入力することでソフトウェア利活用の導入にもつながっている。一例を示すと、『gnuplotの精義【第二版】』⁴³⁾では球面調和関数のサンプルスクリプトが掲載されている。ほかにもWebサイト上に多くの人たちが球面調和関数に関するスクリプトを例示し、その演算結果（描画）を示してくれている⁴⁴⁻⁴⁶⁾。Web情報の支援も含めて、波動関数の「形」をパソコンによって三次元描画するという環境は整っている。これらを活用することで、波動関数の式がどのようにスクリプトとして記述されているのかを知り、描画結果としてのグラフと見比べることで理解を深めていくことができるようになっている。

原子軌道としてのs軌道・p軌道・d軌道・f軌道は、動径の項は距離 r の関数なので平面座標系のグラフ描画を試すことができ、角度の項は球面調和関数の二乗を用いることで二次元・三次元の描画を手元でできる。自らの手でスクリプトを取り扱いながら描画を行うことで、複雑な数式が持つ意味を部分ごとに分けながらイメージできるようになる。しかし次の単元で登場する混成軌道の話になると、波動関数の合成結果が書籍に図示されるようなものになる、ということを掴む段階で苦慮するケースが少なくない。また、波動関数の合成としての混成軌道がいくつも示される(sp^3 , sp^2 , sp , dsp^2 , d^2sp^3)が、それぞれの波動関数の係数がなぜそのように導かれていくのかについては誘導がなされていない場合が多いので、関数およびその形を暗記してしまうという流れに陥ることも多々あるようである。混成軌道における各波動関数の係数については幾何学的な導き^{7, 8)}によって演算がなされることを

示せば高等学校数学までの内容で理解できると思われるが、得られた合成関数が図示された形になる、という部分については原子軌道の関数と描画の関係と同じく、直感的に理解することは難しい。加えて原子軌道の形を示す場合とは異なり、混成軌道を描いた報告はいくつか見つけている^{37, 38)}が、それらを描くスクリプトを見つけ出すことができていない。

検索力の低さ、と言われればそれまでであるが、合成関数が記されているのであれば、合成関数を用いて原子軌道描画と同様のスクリプトを作れば解決するのではないか、という観点に立ち、原子軌道を描画するスクリプトの「真似」を試みた。今回はGnuplotを用いた球面調和関数の二乗を描画する⁴³⁾、というサンプルスクリプトを土台として、原子軌道関数を合成関数に変えるだけで、「混成軌道の形を描く」ということを手元のパソコンでいくつか行ってみたので、混成軌道の形を描画するために用いたスクリプトとその描画結果を以下に示していく。

2. 方法

2-1. 描画環境について

この資料を執筆している環境を以下に示す。

CPU : Intel Core i9-12900 2.40 GHz
Memory : DDR4, 80 GB
Mainboard : MouseComputer Z690-S01
Graphics : NVIDIA GeForce RTX 3050
OS : Windows11 Home 24H2
Software : Gnuplot Version 6.0.1

グラフ描画については、Windows10 Home, Intel Core i3-2310M, DDR3 16 GB, Gnuplot Version 5.4.8においても同様に表示できている。表示後の図形回転操作の応答が遅い場合は、set isosamples の数値を小さくすることで操作性の向上を図った。

2-2. 使用したスクリプトと描画結果

今回の混成軌道描画のベースとなるサンプルスクリプトは『gnuplotの精義 【第二版】』⁴³⁾のP. 114ページに掲載されてあるものを用いた。これをもとにs軌道・p軌道・d軌道を描くスクリプトを作成した(表1)。表1中の球面調和関数(波動関数における角度の項)は、文献6～8を用いた。これらのスクリプトを使い、Gnuplotで描画した結果を図1-1から図1

-9に示す。

このように20行程度のスクリプトで原子軌道の形を手元で描画できるので、このスクリプトを応用することで混成軌道の描画が可能になる。ここでは sp^3 , sp^2 , sp , dsp^2 , d^2sp^3 の5つの混成軌道の形を描くための合成関数を記述したスクリプトを作り、Gnuplotで描画させた。用いたスクリプトを表2に示す。また描画結果を図2-1から図2-5に示す。

3. 数式理解とスクリプト

表1に示したスクリプトは、参考文献43に示されている球面調和関数の二乗のプロットを作成するコマンドファイル(スクリプト)をもとに、 $Y_0^0, Y_1^{-1}, Y_1^0, Y_1^1, Y_2^{-2}, Y_2^{-1}, Y_2^0, Y_2^1, Y_2^2$ の二乗となるように球面調和関数の部分について適宜書き換えただけのものである(表1のスクリプト、①～⑨)。球面調和関数を得るためのルジャンドルの陪多項式が解けない(意味が分からない)状態であっても、演算結果としての式として表1のようなものが書籍から得られるのであれば、極座標表現としてのスクリプトの意味が分かれば良いだけである。また、スクリプトそのものが理解できていなくても、「この式をこの形に変更してみる」という指示さえ行えば、描画の体験そのものは可能であり、描かれた原子軌道の形が書籍に掲載されてある形と類似しているので、納得しやすくなると思われる。そのスクリプトの記述から、極座標表現の意味の理解を促すきっかけにもなると考えられる。こうした手続きが、暗記に頼るという部分からの脱却に繋がっていく。

4. 与えられた関数(混成軌道の関数)の応用

球面調和関数の描画は各種Webサイトでも多々揭示されている⁴⁴⁻⁴⁶⁾。球面調和関数を用いて描画手続きを行うことは、原子軌道の形をイメージさせるのに便利である。波動関数の角度の項(形)に関する数式が入手できるのであれば、波動関数の合成であっても描画可能であるということはすぐに分かる。混成軌道は波動関数の合成によって表示されており、示されている関数を用いて球面調和関数の組み合わせを作り、スクリプトにすることで混成軌道の形を描画することが可能になる。書籍に掲載されてある球面調和関数をもとに、原子軌道の形を描画する手続きと同様に球面調和関数の合成を行ったスクリプトに書き換えてみたものが表2のリストであり、その描画結果が図2になる。

それぞれの混成軌道の形が書籍に掲載されてある形と類似しているので、混成軌道としての「合成された波動関数」の形が実感できるようになる。

5. おわりに

原子軌道や混成軌道の形を手軽に描画できるということは、化学・数学・プログラミングを融合させる手続きであるとともに、数式理解を促すための一助にもなる。今回、参考とした書籍に掲載されてあるスクリプトを模倣するだけの手続きを示したが、このような単純な操作であっても化学の内容理解・数式の把握・プログラミングの基礎を習得する土台づくりになる。真似をすることの大切さ、実感することの重要性など、多くの先生方が学習方法の工夫を示されている。混成軌道の形を描画するということは、波動関数の合成(数学の理解)、描画手法の習得(プログラミングスキルの向上)を伴うので、量子化学を理解するための手続きが数学・プログラミングの理解向上にも繋がっていくことになる。

6. 参考文献

- 1) 梶原篤, 金折賢二; 新・物質科学ライブラリ 基礎化学 [新訂版], サイエンス社 (2021).
- 2) 中林安雄, 荒地良典, 幸塚広光, 田村裕, 春名匠, 矢島辰雄; 理工系のための現代基礎化学 物質の構成と反応, 三共出版 (2015).
- 3) 野本健雄, 田中文夫; 新版 現代の基礎化学, 三共出版 (2005).
- 4) P. Atkins, J. Paula 著, 千原秀昭, 稲葉章, 鈴木晴 訳; アトキンス 物理化学要論第7版, 東京化学同人 (2020).
- 5) P. Atkins, J. Paula 著, 中野元裕, 上田貴洋, 奥村光隆, 北河康隆 訳; アトキンス 物理化学 (上) 第10版, 東京化学同人 (2017).
- 6) 山内淳; 基礎物理化学 I [新訂版] - 原子・分子の量子論 -, サイエンス社 (2017).
- 7) 類家正稔; 詳解 量子化学の基礎 第2版, 東京電機大学出版局 (2021).
- 8) 大岩正芳; 群論と分子, 化学同人 (1969).
- 9) Excelに関する書籍の一例として, 時田澄男, 染川賢一 著; パソコンで考える量子化学の基礎, 裳華房 (2005).
- 10) MATLABに関する書籍の一例として, G. J. Borse 著, 臼田昭司, 東野勝治, 井上祥史, 伊藤敏, 深田三夫, 川田博美, 梅本敏孝, 土井智晴, 藤沢正一郎 訳; MATLAB®数値解析, オーム社 (1998).
- 11) Octave 公式 サイト; <https://ocrave.org> (2024.07.23閲覧)
- 12) gnuplot 公式 サイト; <http://www.gnuplot.info/> (2024.07.12 閲覧)
- 13) Scilab 公式 サイト; <https://www.scilab.org> (2024.07.23閲覧)
- 14) Maxima 公式 サイト; <https://maxima.sourceforge.io> (2024.07.23閲覧)
- 15) R プロジェクト公式 サイト; <https://www.r-project.org> (2024.07.23閲覧)
- 16) Pov-Ray 公式 サイト; <http://www.povray.org> (2024.07.23閲覧)
- 17) 電子計算機を利用した学生実習 - 原子軌道および混成軌道の形と方向性, 化学教育, 20(1), 70-74 (1972).
- 18) 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(1), 37-48 (1996).
- 19) 時田澄男, 杉山孝雄, 近藤智嗣, 菊川健; Q T V R (QuickTime Virtual Reality)を用いた水素原子の原子軌道の動画表示, *J. Chem. Software*, 5(3), 129-136 (1999).
- 20) 時田澄男, 木戸冬子, 杉山孝雄, 細矢治夫; 原子軌道の角部分に関する新しい可視化方法の研究, *J. Chem. Software*, 7(1), 29-46 (2001).
- 21) 時田澄男, 杉山孝雄; 原子軌道の動画表示とその数式の理解に関する研究, *J. Chem. Software*, 7(2), 87-98 (2001).
- 22) 時田澄男, 木戸冬子, 杉山孝雄, 渡部智博, 時田那珂子, 東千秋; 原子軌道の様々な可視化方法の組合せとその波動性の表現, *J. Chem. Software*, 8(1), 7-16 (2002).
- 23) 長岡伸一, 寺前裕之, 長嶋雲兵; Microsoft Excelを用いた分子軌道の描画の実習, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 9(4), 177-182 (2010).
- 24) 長岡伸一, 寺前裕之, 長嶋雲兵; Microsoft Excelを用いた分子軌道の描画の実習(2)-イオン性, 分極関数, 貫入 -, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 9(5), 241-248 (2010).
- 25) 矢野潤, 大村泰, 小田健二, 松田陽一, 本田智弘, 吉良真, 則包小百合, 渡邊定和, 松田雄二; 描画ソフトウェアとアルミニウム製模型を用いた 2 p 軌道電子

- 密度の三次元表示, 工学教育(J. of JSEE), 61(4), 80-87 (2013).
- 26) 時田澄男; 電子を描く(1)－水素原子のなかの電子, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 13(5), A25-A28 (2014).
- 27) 時田澄男; 電子を描く(2)－確率の雲の正体, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 14(1), A6-A10 (2015).
- 28) 時田澄男; 電子を描く(3)－いろいろな s 軌道, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 14(2), A17-A20 (2015).
- 29) 時田澄男; 電子を描く(4)－p z 軌道, $d^3z^2-r^2$ 軌道, $f^5z^3-3zr^2$ 軌道, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 14(5), A38-A41 (2015).
- 30) 時田澄男; 電子を描く(5)－3 d x 軌道, 3 d y z 軌道, 3 d x²-y² 軌道, 3 d x y 軌道, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 15(1), A7-A12 (2016).
- 31) 時田澄男; 電子を描く(6)－Z 軸まわりに円筒対称な節面による整理, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 15(2), A35-A38 (2016).
- 32) 時田澄男; 電子を描く(7)－Z 軸を含む平面節面による整理, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 15(4), A47-A50 (2016).
- 33) 時田澄男; 電子を描く(8)－球形彫刻とその特徴, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 16(3), A23-A26 (2017).
- 34) 時田澄男; 電子を描く(9)－原子軌道における波動性, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 17(2), A11-A14 (2018).
- 35) 時田澄男, 時田那珂子; 電子を描く(10)－元素の周期表を原子軌道で描く, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 18(4), A14-A20 (2019).
- 36) 時田澄男; 電子を描く(11)－電子の波が分子をつくる, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 20(2), A20-A25 (2021).
- 37) 時田澄男; 電子を描く(12)－炭素原子の s p³, s p², s p 混成軌道, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 22(1), A2-A7 (2023).
- 38) 時田澄男; 電子を描く(13)－混成軌道による分子の組立, σ 結合と π 結合, *J. Comput. Chem. Jpn.*, 22(1), A8-A15 (2023).
- 39) GeoGebra 公式 サイト; <https://www.geogebra.org/> (2024.07.12 閲覧)
- 40) 田中雄二; Gnuplotを用いた数式理解の手引き, 研究紀要／九州共立大学学術情報センター 編 5, 1-6 (2022).
- 41) 田中雄二; 大学初年次の化学における量子化学の学びと数学の関係に関する一考察, 九州共立大学研究紀要, 13(1), 29-37 (2022).
- 42) 田中雄二; 野球における打撃成績個人記録の新たな評価法の提案－打者個人に関する項目による評価－, 九州共立大学研究紀要, 14(2), 85-92 (2024).
- 43) 山本昌志 著; gnuplotの精義－フリーの高機能グラフ作成ツールを使いこなす【第2版】, カットシステム (2013).
- 44) 米澤進吾ホームページ; <https://sk.kuee.kyoto-u.ac.jp/person/yonezawa/index.html> (2024.07.24閲覧) (同ページから『プログラミング』→『gnuplot』→『ギャラリー』と進むと原子軌道のリストが見られる)
- 45) 数ナビの部屋; <https://yunavi.lsv.jp/index.html> (2024.07.24閲覧) (同ページから『gnuplotの利用法』→『3次元グラフの描画』→『球面調和関数のグラフ』と進むと球面調和関数のリストが見られる)
- 46) Nikos Karampatziakisのサイト; <https://lowrank.net/gnuplot/index.html> (2024.07.24閲覧) (同ページから『球面調和関数』→『球面調和関数』と進むと球面調和関数のリストが見られる)

表 1. 原子軌道の形を表現する球面調和関数の二乗のスクリーン (文献 9 を参照して書き換えたもの)

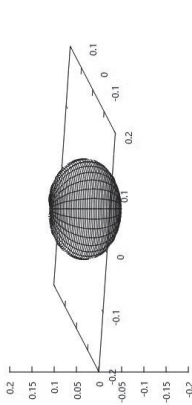
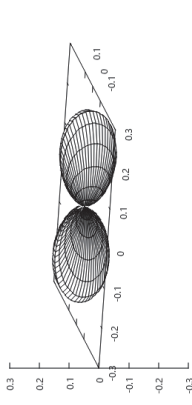
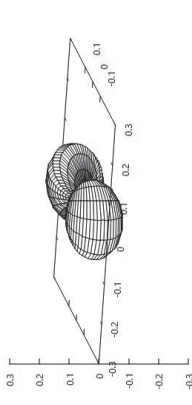
| | | |
|---|---|---|
| <pre> #① s 軌道 reset scale=0.2 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric S(u, v)=sqrt(1/(4.0*pi)) xs(u, v)=S(u, v)**2*sin(u)*cos(v) ys(u, v)=S(u, v)**2*sin(u)*sin(v) zs(u, v)=S(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] xs(u, v), ys(u, v), zs(u, v) </pre> | <pre> #② p x 軌道 reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric X(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*sin(u)*cos(v) xx(u, v)=X(u, v)**2*sin(u)*cos(v) yx(u, v)=X(u, v)**2*sin(u)*sin(v) zx(u, v)=X(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] xx(u, v), yx(u, v), zx(u, v) </pre> | <pre> #③ p y 軌道 reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Y(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*sin(u)*sin(v) xy(u, v)=Y(u, v)**2*sin(u)*cos(v) yy(u, v)=Y(u, v)**2*sin(u)*sin(v) zy(u, v)=Y(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] xy(u, v), yy(u, v), zy(u, v) </pre> |
|  |  |  |
| 図 1 - 1. s 軌道 | 図 1 - 2. p x 軌道 | 図 1 - 3. p y 軌道 |

表 1 つづき

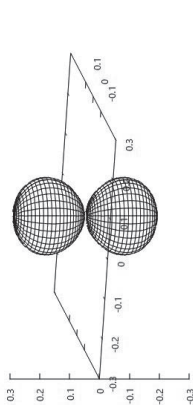
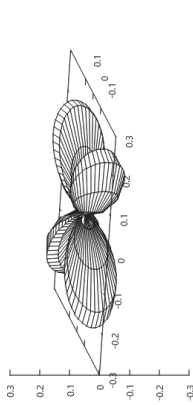
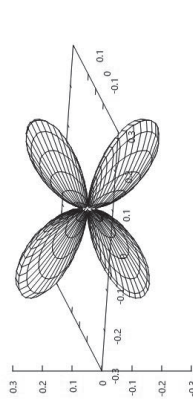
| #④ p z 軌道 | #⑤ d x y 軌道 | #⑥ d z x 軌道 |
|--|--|---|
| <pre> reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Z(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*cos(u) xz(u, v)=Z(u, v)**2*sin(u)*cos(v) yz(u, v)=Z(u, v)**2*sin(u)*sin(v) zz(u, v)=Z(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] xz(u, v), yz(u, v), zz(u, v) </pre> | <pre> reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Dxy(u, v)=sqrt(15.0/(16.0*pi))*sin(u)**2*sin(2.0*v) dxyx(u, v)=Dxy(u, v)**2*sin(u)*cos(v) dxyy(u, v)=Dxy(u, v)**2*sin(u)*sin(v) dxyz(u, v)=Dxy(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] dxyx(u, v), dxyy(u, v), dxyz(u, v) </pre> | <pre> reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Dzx(u, v)=sqrt(15.0/(16.0*pi))*sin(2.0*u)*cos(v) dxxx(u, v)=Dzx(u, v)**2*sin(u)*cos(v) dxyx(u, v)=Dzx(u, v)**2*sin(u)*sin(v) dxxz(u, v)=Dzx(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] dxxx(u, v), dxyx(u, v), dxxz(u, v) </pre> |
|  |  |  |

図 1 - 4 . p z 軌道

図 1 - 5 . d x y 軌道

図 1 - 6 . d z x 軌道

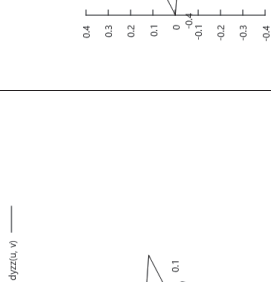
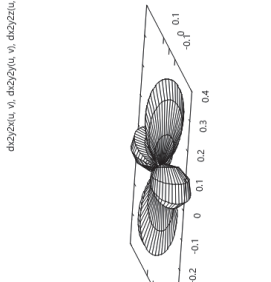
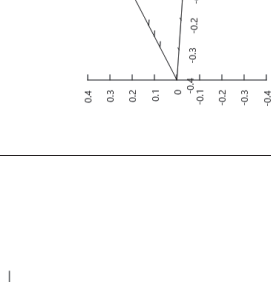
| 表 1 つづき | | |
|---|--|--|
| <pre>#⑦ d y z 軌道 reset scale=0.3 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Dyz(u, v)=sqrt(15.0/(16.0*pi))*sin(2.0*u)*sin(v) dyzx(u, v)=Dyz(u, v)**2*sin(u)*cos(v) dyzy(u, v)=Dyz(u, v)**2*sin(u)*sin(v) dyzz(u, v)=Dyz(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] dyzx(u, v), dyzy(u, v), dyzz(u, v)</pre> | <pre>#⑧ d x²-y² 軌道 reset scale=0.4 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Dx2y2(u, v)=sqrt(15.0/(16.0*pi))*sin(u)**2*cos(2.0*v) dx2y2x(u, v)=Dx2y2(u, v)**2*sin(u)*cos(v) dx2y2y(u, v)=Dx2y2(u, v)**2*sin(u)*sin(v) dx2y2z(u, v)=Dx2y2(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] dx2y2x(u, v), dx2y2y(u, v), dx2y2z(u, v)</pre> | <pre>#⑨ d z² 軌道 reset scale=0.4 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric Dz2(u, v)=sqrt(5.0/(16.0*pi))*(3.0*cos(u)**2.0-1.0) dz2x(u, v)=Dz2(u, v)**2*sin(u)*cos(v) dz2y(u, v)=Dz2(u, v)**2*sin(u)*sin(v) dz2z(u, v)=Dz2(u, v)**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] dz2x(u, v), dz2y(u, v), dz2z(u, v)</pre> |
|  <p style="text-align: center;">$dyzx(u, v), dyzy(u, v), dyzz(u, v)$ —</p> |  <p style="text-align: center;">$dx2y2x(u, v), dx2y2y(u, v), dx2y2z(u, v)$ —</p> |  <p style="text-align: center;">$dz2x(u, v), dz2y(u, v), dz2z(u, v)$ —</p> |
| 図 1-7. d y z 軌道 | 図 1-8. d x ² -y ² 軌道 | 図 1-9. d z ² 軌道 |

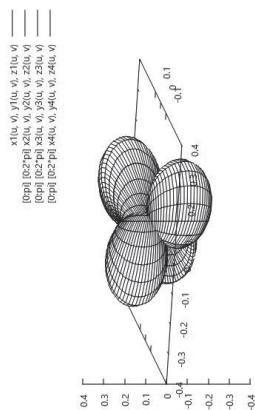
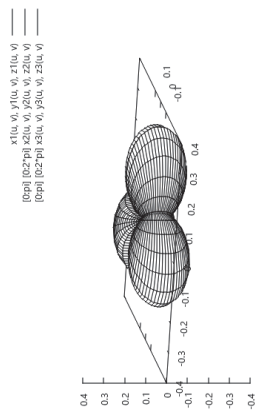
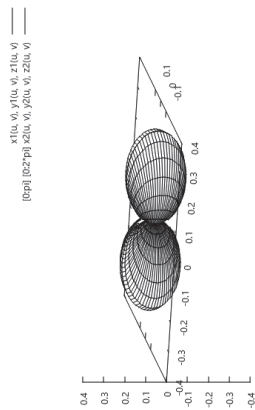
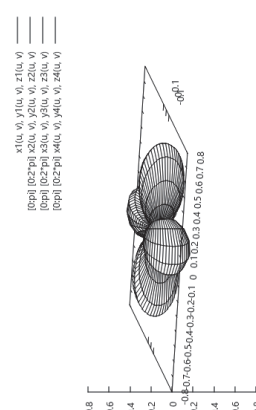
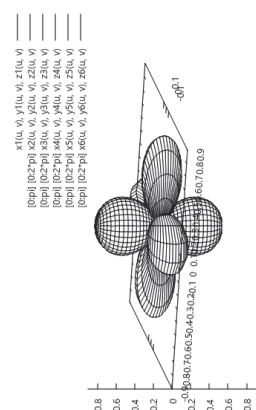
表 2. 混成軌道の形を表現する球面調和関数の二乗のスクリーン (文献 9 を参照して書き換えたもの)

| #⑩ s p ³ 混成軌道 | #⑪ s p ² 混成軌道 |
|--|---|
| <pre> reset scale=0.4 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric S(u, v) = sqrt(1/(4.0*pi)) X(u, v) = sqrt(3.0/(4.0*pi)) * sin(u) * cos(v) Y(u, v) = sqrt(3.0/(4.0*pi)) * sin(u) * sin(v) Z(u, v) = sqrt(3.0/(4.0*pi)) * cos(u) sp3=1.0/sqrt(4.0) x1(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)+Y(u, v)+X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y1(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)+Y(u, v)+X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z1(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)+Y(u, v)+X(u, v)))**2*cos(u) x2(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)-Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y2(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)-Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z2(u, v) = (sp3*(S(u, v)+Z(u, v)-Y(u, v)-X(u, v)))**2*cos(u) x3(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)+Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y3(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)+Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z3(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)+Y(u, v)-X(u, v)))**2*cos(u) x4(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)-Y(u, v)+X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y4(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)-Y(u, v)+X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z4(u, v) = (sp3*(S(u, v)-Z(u, v)-Y(u, v)+X(u, v)))**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] x1(u, v), y1(u, v), z1(u, v) replot [0:pi] [0:2*pi] x2(u, v), y2(u, v), z2(u, v) replot [0:pi] [0:2*pi] x3(u, v), y3(u, v), z3(u, v) replot [0:pi] [0:2*pi] x4(u, v), y4(u, v), z4(u, v) </pre> | <pre> reset scale=0.4 set size 1.0, 1.0 set xrange [-scale:scale] set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 set yrange [-scale:scale] set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 set zrange [-scale:scale] set xyplane at 0 set isosamples 64, 32 set view 75, 20 set hidden3d set parametric S(u, v) = sqrt(1/(4.0*pi)) X(u, v) = sqrt(3.0/(4.0*pi)) * sin(u) * cos(v) Y(u, v) = sqrt(3.0/(4.0*pi)) * sin(u) * sin(v) sp2=1.0/sqrt(6.0) x1(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+2.0*X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y1(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+2.0*X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z1(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+2.0*X(u, v)))**2*cos(u) x2(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y2(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z2(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*cos(u) x3(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)-sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*cos(v) y3(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)-sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*sin(u)*sin(v) z3(u, v) = (sp2*(sqrt(2.0)*S(u, v)-sqrt(3.0)*Y(u, v)-X(u, v)))**2*cos(u) splot [0:pi] [0:2*pi] x1(u, v), y1(u, v), z1(u, v) replot [0:pi] [0:2*pi] x2(u, v), y2(u, v), z2(u, v) replot [0:pi] [0:2*pi] x3(u, v), y3(u, v), z3(u, v) </pre> |

表 2 つづき

| | |
|--|--|
| #(d ² s p ³ 混成軌道 | |
| reset | |
| scale=0.9 | |
| set size 1.0, 1.0 | |
| set xrange [-scale:scale] | |
| set xtics -1.1, 0.1, 1.1 offset -0.8, -0.8 | |
| set yrange [-scale:scale] | |
| set ytics -0.1, 0.1, 0.1 offset 0.8, -0.8 | |
| set zrange [-scale:scale] | |
| set xyplane at 0 | |
| set isosamples 64, 32 | |
| set view 75, 20 | |
| set hidden3d | |
| set parametric | |
| S(u, v)=sqrt(1/(4.0*pi)) | |
| X(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*sin(u)*cos(v) | |
| Y(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*sin(u)*sin(v) | |
| Z(u, v)=sqrt(3.0/(4.0*pi))*cos(u) | |
| Dx2y2(u, v)=sqrt(5.0/(16.0*pi))*(3.0*cos(u)**2.0-1.0) | |
| Dz2y2(u, v)=sqrt(15.0/(16.0*pi))*sin(u)**2*cos(2.0*v) | |
| d2sp3=1.0/sqrt(12.0) | |
| x1(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)+sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y1(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)+sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z1(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)+sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*cos(u) | |
| x2(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)-sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y2(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)-sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z2(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)+sqrt(4.0)*Dz2(u, v)-sqrt(6.0)*Z(u, v))**2*cos(u) | |
| x3(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*X(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y3(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*X(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z3(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*X(u, v))**2*cos(u) | |
| x4(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*X(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y4(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*X(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z4(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)+sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*X(u, v))**2*cos(u) | |
| x5(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y5(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z5(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)+sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*cos(u) | |
| x6(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*sin(u)*cos(v) | |
| y6(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*sin(u)*sin(v) | |
| z6(u, v)=(d2sp3*(sqrt(2.0)*S(u, v)-Dz2(u, v)-sqrt(3.0)*Dx2y2(u, v)-sqrt(6.0)*Y(u, v))**2*cos(u) | |
| splot [0:pi] [0:2*pi] x1(u, v), y1(u, v), z1(u, v) | |
| replot [0:pi] [0:2*pi] x2(u, v), y2(u, v), z2(u, v) | |
| replot [0:pi] [0:2*pi] x3(u, v), y3(u, v), z3(u, v) | |
| replot [0:pi] [0:2*pi] x4(u, v), y4(u, v), z4(u, v) | |
| replot [0:pi] [0:2*pi] x5(u, v), y5(u, v), z5(u, v) | |
| replot [0:pi] [0:2*pi] x6(u, v), y6(u, v), z6(u, v) | |

表 2 つづき

図 2-1. $s p^3$ 混成軌道図 2-2. $s p^2$ 混成軌道図 2-3. $s p$ 混成軌道図 2-4. $d s p^2$ 混成軌道図 2-5. $d^2 s p^3$ 混成軌道