

Atomic Orbital Visualizer

(原子軌道可視化ソフト)

概要:

水素様原子の実数化された原子軌道(波動関数)を可視化するソフト

1s~4f 軌道の外形の 3D 画像や断面の 2D 画像を、符号や関数値に応じて表示

表示する波動関数値の範囲や断面の位置などを指定可能

計算方法:

可視化には以下のような実数化した波動関数を使用 (一部 省略)

1s 軌道	: $\psi_{1s} \propto \exp(-r)$
2s 軌道	: $\psi_{2s} \propto (2 - r) \exp(-r/2)$
2p _x 軌道	: $\psi_{2p_x} \propto x \exp(-r/2)$
3s 軌道	: $\psi_{3s} \propto (27 - 18r + 2r^2) \exp(-r/3)$
3p _x 軌道	: $\psi_{3p_x} \propto (6 - r) x \exp(-r/3)$
3d _{xy} 軌道	: $\psi_{3d_{xy}} \propto xy \exp(-r/3)$
3d _{x²-y²} 軌道	: $\psi_{3d_{x^2-y^2}} \propto (x^2 - y^2) \exp(-r/3)$
3d _{z²} 軌道	: $\psi_{3d_{z^2}} \propto (3z^2 - r^2) \exp(-r/3)$
4s 軌道	: $\psi_{4s} \propto (192 - 144r + 24r^2 - r^3) \exp(-r/4)$
4p _x 軌道	: $\psi_{4p_x} \propto (80 - 20r + r^2) x \exp(-r/4)$
4d _{xy} 軌道	: $\psi_{4d_{xy}} \propto (12 - r) xy \exp(-r/4)$
4d _{x²-y²} 軌道	: $\psi_{4d_{x^2-y^2}} \propto (12 - r) (x^2 - y^2) \exp(-r/4)$
4d _{z²} 軌道	: $\psi_{4d_{z^2}} \propto (12 - r) (3z^2 - r^2) \exp(-r/4)$
4f _{z³} 軌道	: $\psi_{4f_{z^3}} \propto (5z^2 - 3r^2) z \exp(-r/4)$
4f _{xz²} 軌道	: $\psi_{4f_{xz^2}} \propto (5z^2 - r^2) x \exp(-r/4)$
4f _{z(x²-y²)} 軌道	: $\psi_{4f_{z(x^2-y^2)}} \propto (x^2 - y^2) z \exp(-r/4)$
4f _{xyz} 軌道	: $\psi_{4f_{xyz}} \propto xyz \exp(-r/4)$
4f _{x(x²-3y²)} 軌道	: $\psi_{4f_{x(x^2-3y^2)}} \propto (x^2 - 3y^2) x \exp(-r/4)$

ここで、 r は Bohr 半径を単位とする半径値

指定した空間の範囲内で x 軸、 y 軸、 z 軸を等間隔に分割したメッシュを作り、各交点の座標における ψ 値を計算する

Ψ 値をそのまま出力に反映させると、主量子数が大きい軌道ほど値が小さくなって、図として見にくくなるため、各軌道での最大値を100とした相対値に変換
外形の表現に主眼を置いた3D図と、波動関数値の分布を反映させた断面2D図を描画

使用方法:

- 1 初めに原子軌道の選択画面が表示されるので、ラジオボタンで 30 種類の中から選択
- 2 **Data Range** 欄に、計算する範囲を入力(中心からの距離で指定、単位は Bohr 半径)
主量子数が小さい軌道(1s, 2p 軌道など)では 20~30、
主量子数が多い軌道(4f 軌道など)では 40~50 程度が適する
- 3 **Resolution** 欄に、半径方向の解像度を入力
- 4 “**Calculation**” ボタンをクリックすると計算が始まり、3D 画像が表示される
- 5 上部のボタンをクリックすることで、波動関数の表示方法を変更できる

“3D (dot)” ボタン :

ドットによる 3D 表示(デフォルト)

波動関数の絶対値が所定の値以上になる全ての点が表示される

波動関数値による色の濃淡変化には対応しておらず、符号が正の場合は全て

同じマゼンタ色、負の場合は全て同じシアン色で表示

マウスによるドラッグで図の回転が可能

“3D (surface)” ボタン :

曲面による 3D 表示

波動関数の絶対値が所定の値と等しい点をつないだ等値曲面が表示される

波動関数値の符号が正の場合はマゼンタ色、負の場合はシアン色で表示

マウスによるドラッグで図の回転が可能

3D (dot) 表示と比べて処理量が多いため、動作がかなり遅い

(特に解像度が大きくなると極端に応答が遅くなるため、図を回転させて見る場合は

3D (dot) 表示を推奨する)

“xy-plane” “yz-plane” “xz-plane” ボタン :

xy 平面、yz 平面、xz 平面に平行な断面の 2D 表示

波動関数の絶対値が所定の値以上になる部分がカラー表示される

波動関数値の大小を色の濃淡で表現(正值はマゼンタ色、負値はシアン色)

原点を含む面から外れた位置での断面表示も可能

(ただし、対応しているのは xy 平面、yz 平面、xz 平面に平行な断面のみ)

- 6 上部の入力欄に値を入力してボタンをクリックすることで、画像の表示状態を変更できる
(変更は、表示方法を選択するボタンをクリックした時点で反映される)

Data Range(表示範囲) : 前画面で設定した計算範囲内で指定
図の表示範囲が変更される

min.Isovalue(波動関数の最小値) : 各軌道の最大値に対する%で指定

3D (surface) 表示

波動関数の絶対値が、ここで指定した値と等しい面のみが表示される

その他の表示

波動関数値の絶対値が、ここで指定した値以上の部分が全て表示される

Grid Line(グリッドライン) : グリッドライン表示 On/Off の切り替え

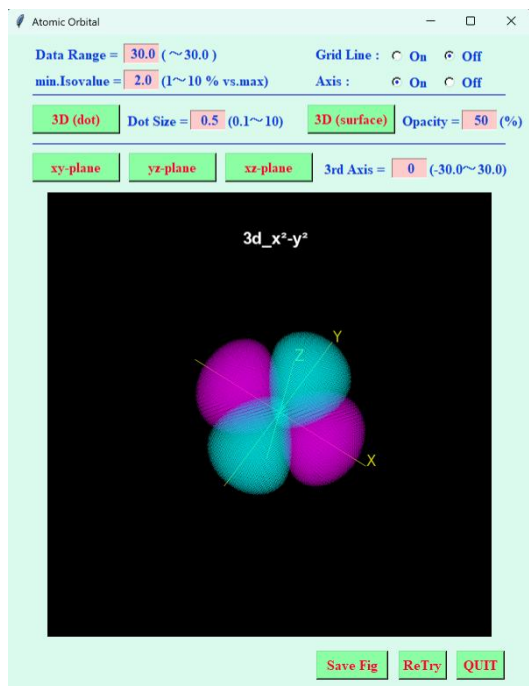
Axis(座標軸) : X,Y,Z 座標軸表示 On/Off の切り替え

Dot Size(ドットサイズ) : 3D (dot) 表示におけるドットサイズを面積の相対値で指定
値を大きくするほど軌道の表面が鮮明になり、内部は見えにくくなる
(見え方は前画面で指定した解像度とも関係する)

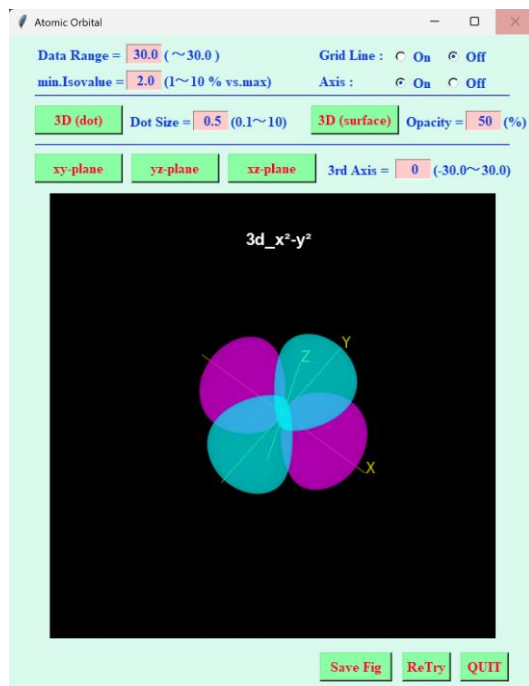
Opacity(不透明度) : 3D (surface) 表示における軌道面の不透明度を%で指定
値を小さくすると、奥側の軌道も見えるようになる

3rd Axis(第3軸) : 断面表示における、第3軸の値を指定
この値を 0 にすると、原点を含む xy 平面、 yz 平面、 xz 平面の断面図となる
任意の値を指定することで、原点から離れた断面の表示が可能

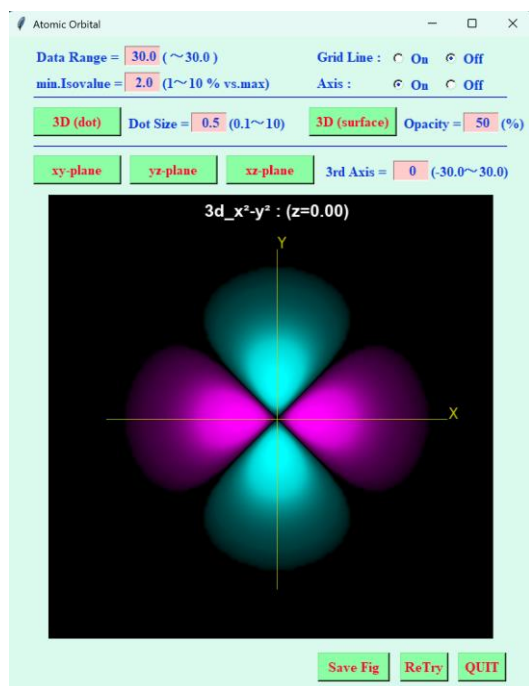
7 結果表示の例



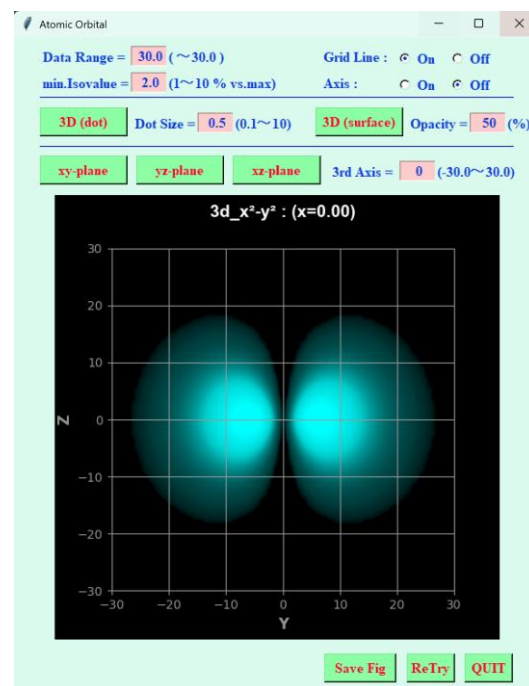
3D (dot)



3D (surface)



xy-plane



xz-plane(Grid:On, Axis:Off)

“Save”ボタン : 図を png 形式等で保存

“ReTry”ボタン: プログラム再実行

“QUIT”ボタン: プログラム終了