

Maple を用いた量子化学入門教材の作成

Development of Web-based Teaching Materials for Junior Students Using Maple and MOPAC System

栗原 照夫*・栗岡 誠*
KURIHARA, Teruo; KURIOKA, Makoto

大学1年次の化学と高等学校化学教育との間で最も大きい違いの一つは量子化学に立脚する、原子・分子の理解であると考えられる。基礎化学・基礎有機化学・基礎無機化学等の1年次の講義において水素原子の波動関数が模式的に示される。3年次の物理化学で、この波動関数を定量的に取り扱うが、1年次においては定性的にならざるをえない。本教材は、波動関数・電子密度等を視覚的に理解しやすくすることを目的とした。

1. 水素原子の波動関数

水素原子は陽子1個と電子1個からなるもっとも単純な原子である。水素原子の電子の運動に対するシュレーディンガー方程式については、解析的に解くことができ、厳密解が知られており、水素原子を初め原子の電子構造を考える基礎となっている。

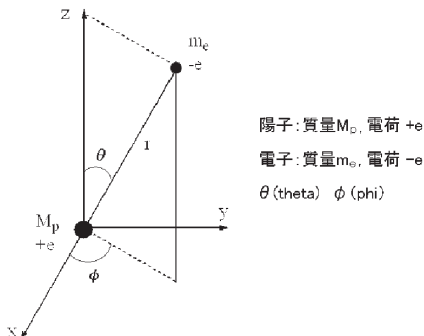
1.1 水素原子に対するシュレーディンガー方程式

原子核は電子に比べ非常に重いので静止していると考えことにするとシュレーディンガー方程式は(1)と書ける。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \phi = 0 \quad \dots\dots\dots (1)$$

ここで、 m は電子の質量、 h はプランク定数、 E は系の全エネルギー、 V はポテンシャルエネルギーを表わし、 x, y, z は系の直交座標系（デカルト座標系とも言う）、 ϕ (psi) は波動関数を表わしている。

* 城西大学理学部化学科



水素原子のように、電子が原子核のまわりに存在する系のときは、直交座標系よりも原子核を原点とした極座標で表わした方が都合がよいし、理解しやすい。極座標 (r, θ, ϕ) と直交座標系 (x, y, z) の関係を図示した。

$$\left. \begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(2)$$

また、電子と原子核の間には静電的な引力が作用しているので、電子に対する核のポテンシャルエネルギー V は(3)である。

$$V = -e^2/r \dots\dots\dots(3)$$

式(1)を極座標系で表示すると(4)式となる。

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \phi = 0 \dots(4)$$

ここで $\hbar = h/2\pi$ と置き換えている。

(4)式の解法については多くの成書がある。例えば、大岩正芳著“初等量子化学 第2版”化学同人(2003)が初心者には理解しやすい。

(4)の波動関数 ϕ を原子核からの距離 r だけの関数 $R(r)$ (動径部分と言う) と角度 θ, ϕ のみの関数 $Y(\theta, \phi)$ (角度部分と言う) の積で(5)式のように表わされるとする。

$$\phi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \dots\dots\dots(5)$$

(5)式を(4)式に代入して、変数分離という手順を経ると式(6)と(7)になる。

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left[\frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \lambda \right] R = 0 \dots\dots\dots(6)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0 \dots\dots\dots(7)$$

ここで μ は換算質量と呼ばれ(8)式で定義される。

$$\mu = \frac{M_p m_e}{M_p + m_e} \dots\dots\dots(8)$$

又, $\lambda = l(l+1)$ と置き換え, 初心者には少し難しい解法を経て(9)と(12)になる。

$$R_{n,l(r)} = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \left(\frac{2\rho}{n}\right)^l e^{-\rho/n} L_{n+1}^{2l+1}(2\rho/n) \dots\dots\dots(9)$$

$$\rho = \frac{r}{a_0} \dots\dots\dots(10)$$

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e^2} \dots\dots\dots(11)$$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \dots\dots\dots(12)$$

ここで L_{n+1}^{2l+1} はラゲールの倍多項式, $P_l^{|m|}$ はルジャンドルの倍多項式といわれるものであり, a_0 はボーア半径といわれるもので, 大きさは 0.5292 \AA である。

n は主量子数といわれるもので, $n = 1, 2, 3 \dots$ の整数値をとる。 l は方位量子数といわれるもので $l = 0, 1, \dots, n-1$ の整数値をとる。又, m は磁気量子数といわれるもので $m = -l, -l+1, \dots, l-1, 1$ の整数値をとる。例えば, $n=1$ とすると l は $l=0$ しかとりえない。又, m も $m=0$ である。 $n=2$ とすると, l は $l=0, 1$ であり, $n=2, l=0$, のとき $m=0$, $n=2, l=1$ のとき m は $m = -1, 0, 1$ である。 $l=0, 1, 2, 3 \dots$, で指定される状態に対して $s, p, d, f \dots$ の文字をあて, n の値との組み合わせで $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ という表現が使われる。

例えば, $n=1, m=0$ であるので $1s$, $n=2, l=0$ のとき $2s$, $n=2, l=1$, のとき $2p$ という表現をする。

(5)式に具体的な値を入れ計算すると以下ようになる。

$n=1, l=0, m=0$ のとき

$$\phi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$$

$n=2, l=0, m=0$ のとき

$$\phi_{2s} = \frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi}} (2-r) e^{r/2}$$

$n=2, l=1, m=0$ のとき

$$\phi_{2pz} = \frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta$$

$n=2, l=1, m=1$ のとき

$$\phi_{2px} = \frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta \cos \phi$$

$n = 2, l = 1, m = -1$ のとき

$$\phi_{2py} = \frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta \sin \phi$$

となる。又、これらを原子軌道という。

2. 水素原子の原子軌道の可視化

水素原子の原子軌道を可視化する試みは多数報告されている。例えば、埼玉大学工学部時田澄男研究室では Engineering Graphic Workstation と Application Visualization System を用いた可視化を報告している。また、数式処理ソフト Mathematica を利用した報告もある。本学では数式処理ソフト Maple 9.5 が導入されており、Maple を用いた可視化の試みを行った。尚、Maple を用いた可視化は Takao Takeuchi 教授が報告しており、このソフトを組み込むことで、作成した。本教材は Maple 9.5 以上がインストールされているパソコンで使用可能である。

2.1 教材の構成内容

教材は全部で4つから構成され、1つの教材は実行のための Maple ファイルとプログラムを記述した text ファイルから成る。プログラムを実行画面上からかくすことで操作環境をわかりやすくした。

- 1) 原子軌道や電子密度等を二次元や三次元で表示する教材
the teaching quantum chemistry.mw
program.txt
- 2) 波動関数の解法過程とその結果を示し、電子密度を三次元で表示する教材
wavefunction.mw
wavefunction.txt
- 3) 動径部分・角度部分で用いるラゲールの倍多項式とルジャンドルの倍多項式の計算結果を示す教材
polynomial.mw
polynomial.txt
- 4) 結合軌道を三次元で表示する教材
bonding orbital.mw
bonding orbital.txt

2.2 教材の入手方法及び起動方法

教材の入手方法を学内のパソコン室を想定して説明する。まず、教材を Web サイト <http://www.josai.ac.jp/~m-design/buturi.top/buturiyuukitop.htm> から I ドライブの中に保存し、これを解凍する。

次に Maple を起動するために Z!Stream を起動する。デスクトップ上のアイコンから Z!Stream を起動し、「User ID」と「Password」を入力する (Fig. 1)。



Fig. 1. Z!Stream 起動画面

この2つはパソコンを起動するときの学籍番号とパスワードである。

そして「Start」→「プログラム」→「maple 9」をクリックし Maple を起動する (Fig. 2)。

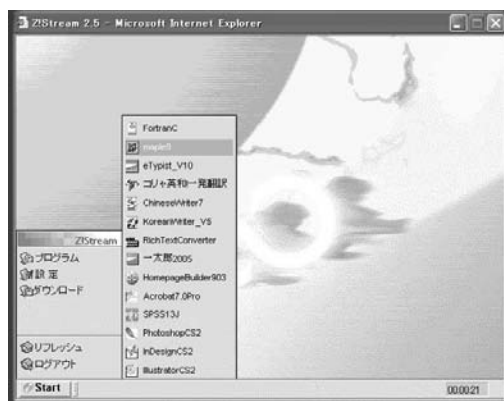


Fig. 2. Z!Stream から Maple の起動

次に Maple 起動画面から「ファイル」→「開く」として解凍した教材を保存した場所から、実行したい教材を選択する。なお、同 Web サイト上でも説明している。

2.3 教材の実行方法

教材は指定された行でエンターキーを押し実行すると対話形式で動作するようにし、Mapleの入力形式に従い入力していくことで、その結果を表示するようにした。各教材の実行方法を説明する。なお各教材中でも説明してある。

1) 原子軌道や電子密度等を二次元や三次元で表示する教材

教材を起動させると

```
[> read"program.txt":
> start(); #この行でEnterを押してください（入力する場合は最後に;を付けてください 例[ 1; ]]
```

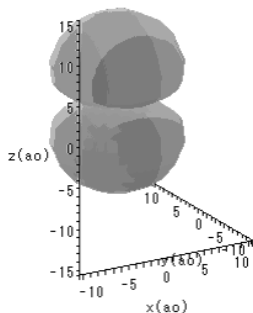
のように、表示されるので指定された行でエンターキーを押し実行する。すると

```
[MENUをお選びください 1:電子密度(3D) 2:原子軌道 3:電子密度 4:動径分布関数 Enter Number:
```

のように表示されるので、電子密度の三次元表示を行うとして「1;」と入力する。このとき、「;」を一緒に入力しなければならない。これは Maple の入力のときの基本である。

```
[MENUをお選びください 1:電子密度(3D) 2:原子軌道 3:電子密度 4:動径分布関数 Enter Number: 1;
[主量子数(n) : 2;
[方位量子数(l) : 1;
[磁気量子数(m) : 0;
```

入力すると主量子数、方位量子数、磁気量子数を順に聞いてくるので、「2;」「1;」「0;」と入力すると、



2 p_z 軌道を三次元表示する。この三次元表示は画面上で自由に回転させることができる。

2) 波動関数の解法過程とその結果を示し、電子密度を三次元で表示する教材

```
[> read"wavefunction.txt"; #この行にカーソルを合わせてEnterを押してください
```

1)と同じようにエンターキーを押し

```
[主量子数(n) : 2;
[方位量子数(l) : 1;
[磁気量子数(m) : 0;
```

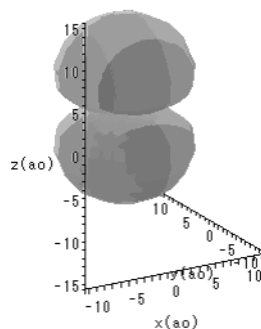
「2;」「1;」「0;」と入力すると、

$$R = \frac{1}{12} \sqrt{6} e^{\left(-\frac{1}{2} r\right)} r$$

$$Y = \frac{\cos(\theta)}{2 \sqrt{\pi}}$$

$$\psi = \frac{\sqrt{6} e^{\left(-\frac{1}{2} r\right)} r \cos(\theta)}{24 \sqrt{\pi}}$$

$$\psi = \frac{\sqrt{2} e^{\left(-\frac{1}{2} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right)} z}{8 \sqrt{\pi}}$$



動径部分、角度部分及び波動関数の計算結果を出力し、電子密度の三次元表示をする。

```
[1:継続 0:終了 :0;
```

この教材では再実行するかを聞いてくるので対応する番号を入力する。

3) 動径部分・角度部分で用いるラゲールの倍多項式とルジャンドルの倍多項式の計算結果を示す教材

```
[> read"polynomial.txt"; #この行にカーソルを合わせてEnterを押してください
```

同じようにまずエンターキーで教材を実行し、主量子数、方位量子数、磁気量子数を入力すると

```
[主量子数(n) : 2;
[方位量子数(l) : 1;
[磁気量子数(m) : 0;
L = 1
P = x
[1:継続 0:終了 :0;
```

ラゲールの倍多項式・ルジャンドルの倍多項式の計算結果を出力する。なおこの教材でも再実行するかの確認がある。

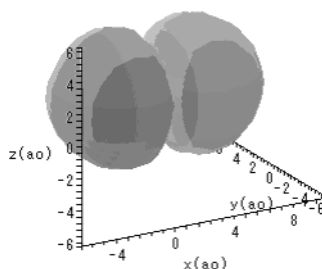
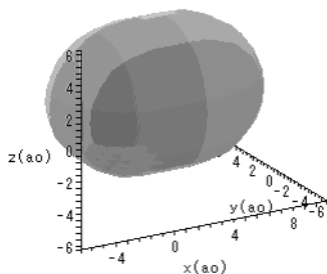
4) 結合軌道を三次元で表示する教材

```
[> read"bonding orbital.txt";
```

同じようにまずエンターキーで教材を実行し、

```
[MENUをお選びください 1:結合軌道(1s) 2:σ分子軌道 3:π分子軌道 Enter Number: 1;
```

結合軌道を表示させるとして「1;」を入力すると



結合性、反結合性の結合軌道を表示する。

```
[1:継続 0:終了 :0;
```

この教材でも再実行の確認をする。

2.4 各教材のプログラム

4つの教材のプログラムを示す。

• program.txt

```
with(orthopoly):
with(plots):
start:=proc()
local xx, cnt, n, l, m, i, c, ncontours, mag, Pl, Plm, Ylm, Rnl, WaveFunction, ContourValues::
list,
xrange::range, yrange::range, zrange::range, Dnl, Rr, r::range, rrange::range:
restart:
cnt:=0:
xx:=readstat("MENUをお選びください 1:電子密度(3D) 2:原子軌道 3:電子密度 4:動径分
布関数 Enter Number:"):
if xx=0 then
cnt:=1:
elif xx>=5 then
cnt:=1:
```



```

end if:
while cnt=1 do
  xx:=readstat("MENU にありません 1:電子軌道(3D) 2:原子軌道 3:電子密度 4:動径分布関
数:"):
  cnt:=0:
  if xx<=0 then
    cnt:=1:
  elif xx>=5 then
    cnt:=1:
  end if:
end do:
n:=readstat("主量子数(n) :"):
if n<=0 then
  cnt:=1:
elif n>=4 then
  cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
  n:=readstat("主量子数は 1~3 の範囲で入力してください:"):
  cnt:=0:
  if n=0 then
    cnt:=1:
  elif n>3 then
    cnt:=1:
  end if:
end do:
l:=readstat("方位量子数(l):"):
if l<=-1 then
  cnt:=1:
elif l>=n then
  cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
  l:=readstat("方位量子数は 0~n-1 の範囲で入力してください:"):
  cnt:=0:
  if l<=-1 then
    cnt:=1:
  elif l>=n then
    cnt:=1:
  end if:
end do:

```

```

if n=1 then
rrange:=0..10:
elif n=2 then
rrange:=0..15:
else
rrange:=0..25:
end if:
Rnl:=r^l*L(n-1-1, 2*1+1, 2*r/n)*exp(-r/n)*sqrt((2/n)^3*(n-1-1)!/(2*n*((n+1)!)))*(2/n)^1:
if xx < 1 then
printf("n=%d, l=%d", n, l);
end if:
if xx=1 then
m:=readstat("磁気量子数(m):"):
if abs(m)>1 then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
m:=readstat("磁気量子数は-1~1の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if abs(m)>1 then
cnt:=1:
end if:
end do:
printf("電子軌道 n=%d, l=%d, m=%d", n, l, m);
ContourValues:=[0.01, 0.005, -0.005, -0.01]:
if n=1 then
xrange:=-6..6:yrange:=-6..6:zrange:=-10..10:
elif n=2 then
xrange:=-11..11:yrange:=-11..11:zrange:=-15..15:
else
xrange:=-21..21:yrange:=-21..21:zrange:=-25..25:
end if:
Pl:=P(l, x):
mag:=abs(m):
if m < 0 then
Plm:=diff(Pl, x$mag)*sqrt((1-x^2)^mag):
end if:
if m=0 then
Ylm:=Pl*sqrt((2*1+1)/(4*Pi)):
elif m>0 then
Ylm:=Plm*cos(m*phi)*sqrt((2*1+1)*(1-m)!/(2*Pi*(1+m)!)):

```

```

else
Ylm:=Plm*sin(abs(m)*phi)*sqrt((2*1+1)*(1-abs(m))/(2*Pi*(1+abs(m))))):
end if:
Ylm:=subs(x=cos(th), Ylm):
Rnl:=r^1*L(n-1-1, 2*1+1, 2*r/n)*exp(-r/n):
Rnl:=Rnl*sqrt((2/n)^3*(n-1-1)/(2*n*((n+1)!)))*(2/n)^1:
WaveFunction:=Rnl*Ylm:
WaveFunction:=expand(simplify(WaveFunction, symbolic)):
WaveFunction:=subs(cos(th)=z/r, sin(th)=sqrt(x^2+y^2)/r, cos(phi)=x/sqrt(x^2+y^2),
sin(phi)=y/sqrt(x^2+y^2), r=sqrt(x^2+y^2+z^2), WaveFunction):
ncontours:=nops(ContourValues):
for i to ncontours do
c[i]:=WaveFunction=ContourValues[i]:
end do:
implicitplot 3 d({seq(c[k], k=1..ncontours)}, x=xrange, y=yrange, z=zrange, grid=[13,
13, 13],
orientation=[-120, 70], scaling=constrained, axes=frame, style=patchngrid, labels=
["x(ao)", "y(ao)", "z(ao)"]);
elif xx=2 then
plot(Rnl, r=rrange, labels=["r/a.u.", "原子軌道"]);
elif xx=3 then
Dnl:=Rnl*Rnl:
plot(Dnl, r=rrange, labels=["r/a.u.", "電子密度"]);
elif xx=4 then
Rr:=Rnl*Rnl*r*r:
plot(Rr, r=rrange, labels=["r/a.u.", "動径分布関数"]);
else
break:
end if:
end proc:

```

• **wavefunction.txt**

```

with(orthopoly):
with(plots):
start:=1:
while start=1 do
restart:
if start=1 then
nn:=readstat("主量子数(n)  :"):
cnt:=0:
if nn<=0 then

```

18

```
cnt:=1:
elif nn>=4 then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
nn:=readstat("主量子数は 1~3 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if nn=0 then
cnt:=1:
elif nn>3 then
cnt:=1:
end if:
end do:
ll:=readstat("方位量子数(l):"):
if ll<=-1 then
cnt:=1:
elif ll>=nn then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
ll:=readstat("方位量子数は 0~n-1 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if ll<=-1 then
cnt:=1:
elif ll>=nn then
cnt:=1:
end if:
end do:
mm:=readstat("磁気量子数(m):"):
if abs(mm)>ll then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
mm:=readstat("磁気量子数は-1~1 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if abs(mm)>ll then
cnt:=1:
end if:
end do:
end if:
R=sqrt((2/nn)^3*(nn-ll-1)!/(2*nn*((nn+ll)!)))*(2/nn)^ll*exp(-r/nn)*r^ll*L(nn-ll-1,
```

```

2*ll+1, 2*r/nn);
if start=1 then
RR:=sqrt((2/nn)^3*(nn-ll-1)!/(2*nn*((nn+ll)!)))*(2/nn)^ll*exp(-r/nn)*r^ll*
L(nn-ll-1, 2*ll+1, 2*r/nn):
Pl:=P(ll, x):
mag:=abs(mm):
if mm < 0 then
Plm:=diff(Pl, x$mag)*sqrt((1-x^2)^mag);
end if:
if mm=0 then
YY:=Pl*sqrt((2*ll+1)/(4*Pi));
elif mm>0 then
YY:=Plm*cos(mm*phi)*sqrt((2*ll+1)*(ll-mm)!/(2*Pi*(ll+mm)!));
else
YY:=Plm*sin(abs(mm)*phi)*sqrt((2*ll+1)*(ll-abs(mm))!/(2*Pi*(ll+abs(mm))!));
end if:
YY:=subs(x=cos(th), YY):
end if:
Y=YY;
printf("波動関数 n=%d, l=%d, m=%d", nn, ll, mm);
phi=RR*YY;
if start=1 then
WF:=RR*YY:
WF:=expand(simplify(WF, symbolic)):
WF:=subs(cos(th)=z/r, sin(th)=sqrt(x^2+y^2)/r, cos(phi)=x/sqrt(x^2+y^2),
sin(phi)=y/sqrt(x^2+y^2), r=sqrt(x^2+y^2+z^2), WF):
end if:
phi=WF;
if start=1 then
ContourValues:=[0.01, 0.005, -0.005, -0.01]:
if nn=1 then
xrange:=-6..6:yrange:=-6..6:zrange:=-10..10:
elif nn=2 then
xrange:=-11..11:yrange:=-11..11:zrange:=-15..15:
else
xrange:=-21..21:yrange:=-21..21:zrange:=-25..25:
end if:
ncontours:=nops(ContourValues):
for i to ncontours do
c[i]:=WF=ContourValues[i]:
end do:

```

```

end if:
implicitplot 3 d({seq(c[k], k=1..ncontours)}, x=xrange, y=yrange, z=zrange, grid=[13,
13, 13],
orientation=[-120, 70], scaling=constrained, axes=frame, style=patchnograd, labels=
["x(ao)", "y(ao)", "z(ao)"]);
start:=readstat("1:継続 0:終了 :"):
if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
start:=readstat("番号が違います 1:継続 0:終了 :"):
cnt:=0:
if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:
end do:
end do;

```

• **polynomial.txt**

```

with(orthopoly):
with(plots):
start:=1:
while start=1 do
restart:
if start=1 then
nn:=readstat("主量子数(n) :"):
cnt:=0:
if nn<=0 then
cnt:=1:
elif nn>=4 then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
nn:=readstat("主量子数は 1~3 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if nn=0 then
cnt:=1:

```

```

elif nn>3 then
cnt:=1:
end if:
end do:
ll:=readstat("方位量子数(l):"):
if ll<=-1 then
cnt:=1:
elif ll>=nn then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
ll:=readstat("方位量子数は 0~n-1 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if ll<=-1 then
cnt:=1:
elif ll>=nn then
cnt:=1:
end if:
end do:
mm:=readstat("磁気量子数(m):"):
if abs(mm)>ll then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
mm:=readstat("磁気量子数は-1~1 の範囲で入力してください:"):
cnt:=0:
if abs(mm)>ll then
cnt:=1:
end if:
end do:
end if:
if start=1 then
RR:=L(nn-ll-1, 2*ll+1, 2*r/nn):
Pl:=P(ll, x):
mag:=abs(mm):
if mm<>0 then
Plm:=diff(Pl, x$mag)*sqrt((1-x^2)^mag):
end if:
if mm=0 then
YY:=Pl:
elif mm>0 then

```

```

YY:=Plm;
else
YY:=Plm;
end if:
end if:
L=RR;
P=YY;
start:=readstat("1:継続 0:終了 :"):
if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:
while cnt=1 do
start:=readstat("番号が違います 1:継続 0:終了 :"):
cnt:=0:
if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:
end do:
end do:

```

• **bonding orbital.txt**

```

with(plots):

start:=1:

while start=1 do
restart:

xx:=readstat("MENU をお選びください 1:結合軌道(1s) 2:σ分子軌道 3:π分子軌道
Enter Number:"):

if xx=0 then
cnt:=1:
elif xx>=4 then
cnt:=1:
end if:

```



```

while cnt=1 do
xx:=readstat("MENU にありません 1:結合軌道(1 s) 2:σ分子軌道 3:π分子軌道:");
cnt:=0:
if xx<=0 then
cnt:=1:
elif xx>=4 then
cnt:=1:
end if:
end do:

if xx=1 then

ContourValues:=[0.01,0.005,-0.005,-0.01]:
xrange:=-6..10:yrange:=-6..6:zrange:=-6..6:
ncontours:=nops(ContourValues):

BO:=(exp(-ra)/sqrt(Pi)+exp(-rb)/sqrt(Pi));
BO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-4.4)^2+y^2+z^2),BO);

ABO:=(exp(-ra)/sqrt(Pi)-exp(-rb)/sqrt(Pi)):
ABO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-4.4)^2+y^2+z^2),ABO):

elif xx=2 then

ContourValues:=[0.01,0.005,-0.005,-0.01]:
xrange:=-12..25:yrange:=-12..11:zrange:=-15..15:
ncontours:=nops(ContourValues):

BO:=sqrt(2)*x*exp(-0.5*ra)/(8*sqrt(Pi))-sqrt(2)*(x-12.9)*exp(-0.5*rb)/(8*sqrt(Pi));
BO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-12.9)^2+y^2+z^2),BO);

ABO:=sqrt(2)*x*exp(-0.5*ra)/(8*sqrt(Pi))+sqrt(2)*(x-12.9)*exp(-0.5*rb)/(8*sqrt(Pi));
ABO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-12.9)^2+y^2+z^2),ABO);

elif xx=3 then

ContourValues:=[0.01,0.005,-0.005,-0.01]:
xrange:=-12..18:yrange:=-12..11:zrange:=-15..15:
ncontours:=nops(ContourValues):

BO:=sqrt(2)*z*exp(-0.5*ra)/(8*sqrt(Pi))+sqrt(2)*z*exp(-0.5*rb)/(8*sqrt(Pi));

```

```

BO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-7.4)^2+y^2+z^2),BO);

ABO:=sqrt(2)*z*exp(-0.5*ra)/(8*sqrt(Pi))-sqrt(2)*z*exp(-0.5*rb)/(8*sqrt(Pi));
ABO:=subs(ra=sqrt(x^2+y^2+z^2),rb=sqrt((x-7.4)^2+y^2+z^2),ABO);

else
break:

end if:

for i to ncontours do
c[i]:=BO=ContourValues[i]:
end do:

printf("bonding");

implicitplot 3 d({seq(c[k],k=1..ncontours)},x=xrange,y=yrange,z=zrange,grid=[13,
13,13],orientation=[-120,70],scaling=constrained,axes=frame,style=patchnograd,
labels=["x(ao)","y(ao)","z(ao)"]);

for i to ncontours do
c[i]:=ABO=ContourValues[i]:
end do:

printf("anti bonding");

implicitplot 3 d({seq(c[k],k=1..ncontours)},x=xrange,y=yrange,z=zrange,grid=[13,
13,13],orientation=[-120,70],scaling=constrained,axes=frame,style=patchnograd,
labels=["x(ao)","y(ao)","z(ao)"]);

start:=readstat("1:継続 0:終了 :");

if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:

while cnt=1 do
start:=readstat("番号が違います 1:継続 0:終了 :");
cnt:=0:

```

```

if start>1 then
cnt:=1:
elif start<0 then
cnt:=1:
end if:
end do:

end do;

```

3. 発展性

将来, 混成軌道の表示や単純 Huckel 分子軌道法の教材を作成し, 教材内容の充実を図りたい。又プログラムの改良を行いたい。

参考図書及び文献

多数の成書があるが, 本化学科で教科書としている本を中心に記した。

- (1) maple 7 プログラミングガイド Waterloo Maple Inc. 編 根上他訳, シュプリンガ・フェアラーク東京
- (2) LaTeX 2e 美文書作成入門 奥村晴彦著, 技術評論社
- (3) ブラディー 一般化学 (上・下) J. E. Brady et al, 若山等訳, 東京化学同人
- (4) マクマリー 有機化学 (上・中・下) 伊東他訳, 東京化学同人
- (5) バーロー 物理化学 第6版, 東京化学同人
- (6) 大岩正芳著, 初等量子化学 第二版, 化学同人
- (7) 福井謙一著, 量子化学 (近代工業化学2), 朝倉書店 (1968)
- (8) 米澤貞次郎, 永田親義他, 改定量子化学入門, 化学同人
- (9) H. Eyring, J. Walter, G. E. Kimball, Quantum Chemistry, Wiley & Toppan (1944)
- (10) S. Tokita, T. Watanabe, F. Kido, Hi. Maekawa and John T. Shimozawa, Visualization of Atomic Orbitals of the Hydrogen Atom, *J. Chem. Software*, 3, 35 (1996) 及びそこに引用されている文献
- (11) T. Takeuchi, "Hydrogen 3D Contours", Maple Application Center (2002)
この Hydrogen 3D Contours の使用に対して Takeuchi 教授の許可を取っている。

(Received Feb. 2, 2006)