(19)日本国特許庁(JP)　(12)特　許　公　報(B2)　(11)特許番号
特許第6344713号
(P6344713)
(45)発行日　平成30年6月20日(2018.6.20)　(24)登録日　平成30年6月1日(2018.6.1)

(51)Int.Cl.		F I		
G09B 19/00	(2006.01)	G09B	19/00	Z
G09B 23/20	(2006.01)	G09B	23/20	
G06Q 50/20	(2012.01)	G06Q	50/20	

請求項の数 3　(全 8 頁)

(21)出願番号　特願2014-99993(P2014-99993)
(22)出願日　平成26年4月22日(2014.4.22)
(65)公開番号　特開2015-207264(P2015-207264A)
(43)公開日　平成27年11月19日(2015.11.19)
審査請求日　平成28年9月23日(2016.9.23)

(73)特許権者　508256949
松島　治男
奈良県大和郡山市宮堂町１０９番地の１５
(72)発明者　松島　治男
奈良県大和郡山市宮堂町１０９番地の１５

審査官　上田　泰

最終頁に続く

(54)【発明の名称】水素原子の電子の存在確率表示方法

(57)【特許請求の範囲】

【請求項１】

ｎ個の半径値を小さい順にr_1からr_n、半径r_nの球表面積に比例した面積をS_n、水素原子の中心からの距離r_nにおける電子の存在確率に比例した数値をP_nとし、面積S_nの図形上にP_n個の小図形を等間隔配置し、あるいはS_nをP_n個に等分割する分割線を、描き、S_1からS_nまでの図形を同心で描いた水素原子の電子の存在確率表示方法。

【請求項２】

ｎ個の等差半径r_1からr_nの同心球表面で定義される電子の存在確率を、比例拡大した数値をP_1からP_nとし、r_1からr_nを比例拡大した数値R_1（＝Ｒ）からR_n（＝ｎＲ）を半径、S_1からS_nを面積とするｎ重同心円の、１≦ｍ≦ｎとするｍ番目の円の外周から内側Ｒの可視範囲内に、外形寸法がＲ未満である小図形を、可視範囲の面積に対する小図形の個数の比とS_mに対するP_mの比とを同一にし、等間隔配置した水素原子の電子の存在確率表示方法。

【請求項３】

ｎ個の半径値を小さい順にr_1からr_n、半径r_nの球表面積に比例した表面積S_nを持つ球、水素原子の中心からの距離r_nにおける電子の存在確率に比例した数値をP_nとし、球S_nの表面積をP_n個に等分割する分割線を描き、S_1からS_nまでのｎ個の球を同心で描いた水素原子の電子の存在確率表示方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】
【０００１】
本発明は理科教材としての水素原子の電子の存在確率表示方法を改良するものである。
【背景技術】
【０００２】
水素原子の電子の存在確率表示方法としては、図４に示す半径方向のグラフが多数の教科書に掲載され、量子力学の基礎中の基礎として良く知られている。また、図５に示す定性的平面（二次元）分布図、図６に示す定性的立体（三次元）分布図などもある。
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【０００３】
しかし量子力学の確率的解釈には、産みの親シュレディンガーを始めアインシュタインなどの創設期の多くの学者が反対したと伝えられる中、理論の構築過程やそれらの根拠等、種々の情報が得られる教材が望ましい。そもそも波動関数が三次元座標で表されているのであるから、立体的な存在確率の定量分布が表現可能であるにも関わらず、立体表現としては図６の様な単なる球があるだけである。
【０００４】
本発明は上記従来の課題を解決するものであり、理科教材としての水素原子の電子の三次元存在確率を定量表示する方法を提供するものである。
【課題を解決するための手段】
【０００５】
本発明は上記目的を達成する為に、ｎ個の半径値を小さい順にr_1からr_n、半径r_nの球表面積に比例した面積をS_n、水素原子の中心からの距離r_nにおける電子の存在確率に比例した数値をP_nとし、面積S_nの図形上にP_n個の小図形を等間隔配置、あるいはS_nをP_n個に等分割し、１からｎまでのｎ個を並べて表示した水素原子の電子の存在確率表示方法である。
【発明の効果】
【０００６】
本発明の教材としての水素原子の電子の存在確率表示方法は、ｎ個の半径値を小さい順にr_1からr_n、半径r_nの球表面積に比例した面積をS_n、水素原子の中心からの距離r_nにおける電子の存在確率に比例した数値をP_nとし、面積S_nの図形上にP_n個の小図形を等間隔配置、あるいはS_nをP_n個に等分割し、１からｎまでのｎ個を並べて表示したものであり、量子力学の基礎中の基礎である存在確率の理解に有用であると共に、理科を学ぶ興味を引き起こすことができる。
【図面の簡単な説明】
【０００７】
【図１】本発明の実施の形態１の水素原子１ｓ軌道の電子の存在確率を示す平面図。
【図２】図１の中央部の分解拡大図。
【図３】本発明の実施の形態２の水素原子１ｓ軌道の電子の存在確率を示す斜視図
【図４】従来の水素原子１ｓおよび２ｓ軌道の半径方向の存在確率グラフ。
【図５】従来の水素原子１ｓ軌道および２ｓ軌道の存在確率を示す平面図。
【図６】従来の水素原子１ｓ軌道の存在確率を示す立体図。
【発明を実施するための形態】
【０００８】
以下、本発明の実施の形態について説明する。ｎ個の半径値を小さい順にr_1からr_n、半径r_nの球表面積に比例した面積をS_n、水素原子の中心からの距離r_nにおける電子の存在確率に比例した数値をP_nとし、面積S_nの図形上にP_n個の小図形を等間隔配置し、１からｎまでのｎ個を並べた表示を実施形態１とし、S_nをP_n個に等分割したｎ種類の半径値の同心球表示を実施形態２とする。
【実施例１】

【０００９】
図１は本発明実施形態１に係る教材としての水素原子１ｓ軌道の存在確率を、ボーア半径ａｏ＝１とし、０．１刻みで半径０．１から３．０までの各々の球表面積に比例した面積を持つ同心円上に、各々の半径における電子の存在確率値に比例した個数の小図形を配置したものであり、作成手順を以下の表１を用いて説明する。
【表１】

半径　r	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
球表面積 $=4\pi r^2$	0.125	0.502	1.131	2.01	3.141	4.524	6.158
存在確率 $=r^2\ \exp(-2r)$	0.0081	0.0268	0.0493	0.0718	0.0919	0.1084	0.1208
累積	0.0081	0.035	0.0843	0.1562	0.2482	0.3566	0.4775
二千分率	6.5	21.5	39.5	57.5	73.6	86.7	96.7
同上(可視部)	7	16	22	25	26	26	26

0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.5	3.0	6.0	6.1
8.043	10.17	12.56	15.2	18.09	28.27	113.1	452.4	467.4
0.1292	0.1338	0.1353	0.1340	0.1306	0.1126	0.0223	0.0002	0.0001
0.6067	0.7406	0.8759	1.0100	1.1406	1.4973	2.3559	2.4987	2.4989
103.4	107.1	108.3	107.3	104.5	89.6	17.8	0.0	0.0
24	22	21	19	17	12	1	0	0

【００１０】
表１はパソコンの表計算ソフトを用いて作成したものの一部であり、当業者には常識と思える範囲の作成方法は省略する。第一行には半径ｒを０．１刻みで０．１から７．０程度まで配置、第二行には球表面積$４\pi r^2$を、第三行には存在確率として正規化係数を省略した$r^2 exp(-2r)$を、第四行には半径０．１からの存在確率の累積値を、第５行には第三行の値を収束累積値２．５で割り、それに２０００を掛けた二千分率であり、小数点第二位を四捨五入した値である。第六行にはその半径における存在確率値に、左隣の球表面積をその半径の球表面積で割った値を掛けた可視部二千分率であり、小数点第一位を四捨五入した値である。　半径値を７．０程度までとしたのは６程度から存在確率がほぼゼロとなり、第四行の累積値が収束するからであり、存在確率値から正規化係数を省略したのは二千分率の計算には不必要だからである。
【００１１】
第六行の可視部の説明の必要上、図２を先に説明する。左の（ａ）はｒ＝０．１の球を表す半径約４ｍｍの円の内部に、４ｍｍより若干小さい直径の小さな丸１を７個、半径２ｍｍの円周上に等角度、３６０／７、約５１．４度間隔に描いたものである。７は二千分率６．５を四捨五入した値である。存在確率の定義に則ればこの７個は、球表面上に配置すべきであるが、描画自体が困難な事に加え、ｒ＝０．１の球単独ならいざ知らず、他の半径の球を同時に同心描画すると外側の球に邪魔され、内側の球の様子が分らなくなる。これらの解決策として球の表面積に比例した面積を持つ円を用いて半径順に同心に並べ、全ての半径値の円の外周部を同時に見る事を可能にしたものである。外周部のみで二千分率を表現する方法は次の（ｂ）の項で説明する。
【００１２】
図２中央の（ｂ）はｒ＝０．２の球に対応した半径約８ｍｍの円の内部に、左の（ａ）に描いたと同一の小さな丸１を１６個、半径６ｍｍの円周上に３６０／１６、約２２．５度の等間隔で描き、その内側、半径２ｍｍの円周上に同一の小さな丸１を６個を６０度等間隔で描いたものである。外側の小さな丸１の個数１６は表１の第六行（可視部）の第三列（０．２）に記載の数字であり、内側の小さな丸１の個数６は第五行（二千分率）第三列に記載の２１．５の四捨五入した値２２から同列第六行（可視部）の１６を引いた残り

である。

【００１３】

この数値１６は、五行（二千分率）第三列の数値２１．５から、２１．５に左隣の第二列の球表面積０．１２５と当該の第三列の球表面積０．５０２との比を掛けた数値を引き、小数点第一位を四捨五入した値、つまり１６＝２１．５×（１－０．１２５／０．５０２）である。同心に重ねると、第三列ｒ＝０．２の円の中心部は左隣の第ニ列ｒ＝０．１の円に隠れるので、隠れずに残る可視可能な外周部分の面積と、その中に描く小さな丸１の個数との比を、円全体の面積０．５０２に対する二千分率２１．５の比と同一にしたものである。外周部の若干内側に描かれた半径約４ｍｍ円の内部は、図１では左の（ａ）に占有され、この円の外側のみが（ｂ）の可視可能な範囲となる。

【００１４】

同様に図２の右、（ｃ）は半径ｒ＝０．３の球表面積に比例した面積である半径約１２ｍｍの円内部に、可視部たる最外周に２２個の小さな丸１を半径１０ｍｍの円周上等間隔に描き、その内側、半径６ｍｍの円周上に１３個、さらに内側の半径２ｍｍの円周上に５個を同じく等間隔に描いた。この１３個と５個の和、１８は、第四列の第五行の３９．５、四捨五入して４０、から第六行の２２を引いた数値である。

【００１５】

図２では（ａ），（ｂ），（ｃ）の三つだけ取り上げたが、これをさらに（ｄ）、（ｅ）と０．１刻みで大きくし、ｒ＝３．０まで対応した図を描き、小さい半径を前面、大きい半径を後面とし、同心状に重ね、約１／３に縮小した状態が図１である。三つの同心円は内側から半径ｒ＝１、ｒ＝２、ｒ＝３を示す。図中、隣接する半径値の小さな丸１の位置は適当にずらした。例えばｒ＝２．６、ｒ＝２．７およびｒ＝２．８の可視部二千分率は共に２であり、可視部の同一半径上に１８０度間隔で描かれるが、隣接の２個とで形成する角度は乱数により決定した。

【実施例２】

【００１６】

図３は本発明実施形態２に係る教材としての水素原子１ｓ軌道の三次元存在確率を平面上に定量表示したもので、飛び飛びの半径値、ｒ＝０．１、０．５、１．０および１．５の各々の球表面を、経線２と緯線３とで前記表１の第五行、二千分率を四捨五入した数値に等面積分割したものである。ｒ＝１．５の例を説明すると、表１の二千分率は８９．６、四捨五入すると９０であり、９０＝３０×３より経線２で３０等分し、緯線３で３等分する。３６０／３０＝１２より経線２は１２度間隔で描き、緯線３は面積計算より逆算してθ＝７０．５２度および、１８０－７０．５２度に描く。これらの経線２と緯線３とで９０分割された一区画の面積は２８．２７／９０＝０．３１４となる。他の半径との比較を容易にする目的で、縦方向の細線によるハッチングを適当な（他の半径の経線２や緯線３との重なりが少なく、形状が分り易い）一区画４に施す。

【００１７】

ｒ＝１．０では１０８＝３６×３、３６本の経線２と３本の緯線３とで分割した。適当な一区画５に、同じく縦方向の細線によるハッチングを施す。この一区画の面積は１２．５６／１０８＝０．１１６である。ｒ＝０．５では７４＝２４．６７×３、つまり３６０／２４．６７＝１４．５９度間隔で２４本の経線を描き、上述のθ＝７０．５２度および、１８０－７０．５２度で三分割し、２４本目と１本目との間隔は他の２４の間隔の２／３になるのでこの間は緯線はθ＝９０度の一本のみのニ分割とし、他と同一面積とした。三分割された範囲の適当な一区画６に、同様な縦方向の細線によるハッチングを施す。この区画の面積は３．１４１／７４＝０．０４２４である。ｒ＝０．１では７＝７×１、緯線は描かず、７本の経線のみとした。適当な一区画７に縦方向の細線によるハッチングを施す。この区画の面積は０．１２５／７＝０．０１７８である。これら四つを同心で描き、内部が見易い角度に傾けたのが図３の斜視図である。

【００１８】

以上のように構成した教材の動作、作用を説明する。表１は半径ｒ＝０．１からｒ＝７

程度まで０．１刻みで網羅されているので、第四行の累積計算は存在確率ｒ^{2}ｅｘｐ（－２ｒ）の（近似）積分を実施している事になる。累積値はｒ＝７付近で２．５程度に収束する。第五行の二千分率は、その収束値２．５で各々の半径における存在確率値を割り、２０００倍したものであり、その数値をｎとすれば、全空間に１個だけ存在する電子が、単位時間あるいは平均周回時間の２０００倍の間にその半径の近傍にｎ回の確率で出現する事を意味する。

【００１９】

図２の左、（ａ）にはその二千分率を表す小さい丸１が７個描かれているから、半径ｒ＝０．１の球表面近傍には上記時間に７回の確率で出現し、同図中央の（ｂ）には２２個描かれているからｒ＝０．２の球表面近傍には同じく２２回、（ｃ）には４０回の確率で出現する。表１の中では半径ｒ＝１．０における１０８が最多であり、この数値のみを比較する限りにおいて図４の従来例のグラフがｒ＝１．０で最大値を示す事と一致する。

【００２０】

図２中央の（ｂ）の２２個の小さい丸１の中の、１６個は外側、６個は内側の円周上に配置されているが、この１６対６の分割は、可視部である外側の面積と、隠れる内側の面積との比例配分であるから、両者の単位面積当りの個数は等しい。従って可視部だけでも半径ｒ＝０．２全域の単位面積当りの出現回数、つまり存在確率を表現している。この（ｂ）の前面に（ａ）を同心に重ねると、中央に（ａ）の７個が見え、その外側に（ｂ）の１６個が見える事になる。その両者共に各々の領域での単位面積当りの出現回数を表現している。この（ａ）、（ｂ）を同様に（ｃ）に重ね、さらに半径ｒ＝０．４からｒ＝３．０まで重ねて縮小したのが図１であるから、図１は１ｓ軌道の存在確率の三次元の広がりを平面上に表現したものと言える。

【００２１】

図３は斜視図として半径値の異なる複数の同心球を描き、各々の球表面を、その球表面における存在確率の二千分率の値で等分割したので、半径の大小と、等分割された面積の大きさとの関係が立体的に把握できる。四つの半径における各々の一区画、４、５、６および７の面積は異なるが、同一時間内に電子が存在する確率は等しい。前述の表現を用いれば、単位時間あるいは（電子の）平均周回時間の二千倍の間に、一区画４の内部に１回の確率で電子が出現し、より面積の狭い一区画５、６および７の内部にも各々１回の確率で電子が出現する。

【００２２】

次に効果を述べる。図１から明かな様に、１ｓ軌道の存在確率は半径の小さい程大きくなる事が判明する。図４の従来例では半径がゼロに近づくと存在確率ｒ^{2}ｅｘｐ（－２ｒ）もゼロに近づいていたので、水素原子１ｓ軌道の中心付近、陽子の極く近くには電子が存在しないと考えられていたが、逆に近い程電子の存在確率が大きい事が本実施例から理解できる。

【００２３】

図３では半径が小さくなる程一区画の面積が小さくなり、その逆数である存在確率が大きくなる事が理解できる。図１はあくまでも平面化された表現であるのに対し、図３は立体構成の斜視図であるから立体的な把握ができる。図１および図３の両者共に、従来例では隠れていた事実、中央部ほど電子の存在確率が大きい事、を明かにする効果を有する。

【００２４】

図４の従来例では存在確率の定義域である球の表面積と存在確率とが掛け合わされ、両者が分離されてない為に、半径がゼロに近づくに伴って球の表面積がニ乗の速度でにゼロに近づく、その急激な変化のみが前面に現れ、存在確率が隠されてしまったと言える。本発明は球表面積自体の変化を見える状態にし、その球表面上で定義される存在確率を球表面積と結びつけて表現した結果、存在確率そのものを見る事ができたのである。

【００２５】

なお、２ｓ軌道および、より高次のｓ軌道に対しても同様の方法で三次元存在確率が表現可能であり、本願では省略する。他のｐ軌道などは本発明に必要とは思えないので取り

上げない。小さい丸１は例えば小さい三角形や＋記号などの小図形で代用可能である。二千分率も他の数値、例えば千や万でも良い。また、球表面を等しい面積に分割する手段も経線２や緯線３に限定されるものではなく、例えばサッカーボールの様に複数個の多角形で球面を構成する事も可能である。

【００２６】

図１および図３の実施例は共に平面描画であるが、教材としては立体構成の方がよりイメージを把握し易いとも言える。例えば薄い透明樹脂で多層構造の同心球を構成し、それらの球表面に存在確率に比例する数の小図形１を、半径ごとに異なった色で描く方法などが考えられる。色は、半径の小さい程暖色、半径の増大に伴い寒色とするなど、半径の大小と関連させる工夫が必要であろう。

【００２７】

以上述べた様に本発明の効果は、従来の、図４に示す様な１次元表示では隠されていた立体的な電子の存在確率分布があぶり出され、量子力学の変化、発展に寄与する事が期待される。

【産業上の利用可能性】

【００２８】

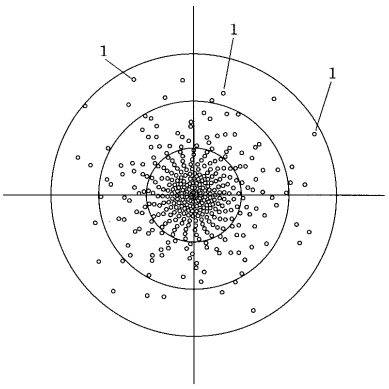
本発明にかかる教材としての水素原子の電子の存在確率表示方法は、三次元立体空間での確率定量分布を示す事ができ、教育や研究にも有用である。

【符号の説明】

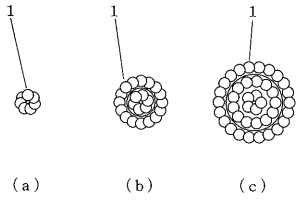
【００２９】

１　小図形（小さい丸）
２　経線
３　緯線
４　（半径１．５の球表面の）一区画
５　（半径１．０の球表面の）一区画
６　（半径０．５の球表面の）一区画
７　（半径０．１の球表面の）一区画

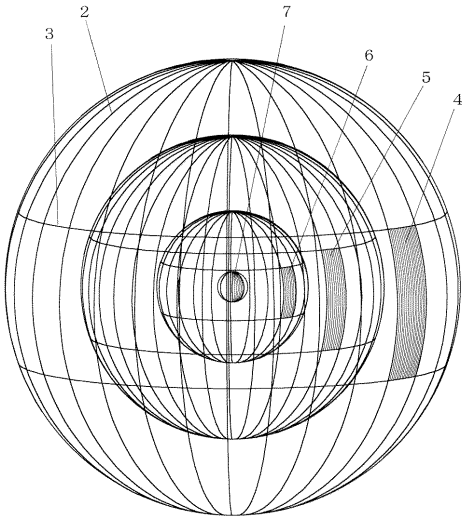
【図１】



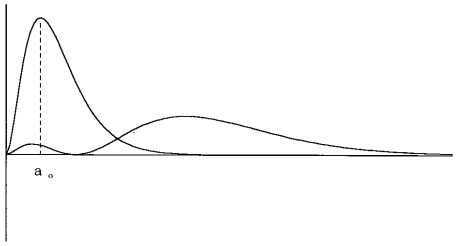
【図２】



【図３】



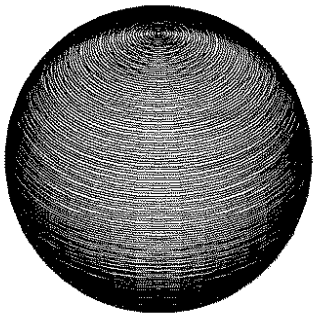
【図４】



【図５】



【図６】



フロントページの続き

(56)参考文献 特開２０１０－１１３３１６（ＪＰ，Ａ）
特表２００８－５２９０５５（ＪＰ，Ａ）
特開２０１４－０２１４８１（ＪＰ，Ａ）
保江 ▲邦▼夫 KUNIO YASUE, Ｅｘｃｅｌで学ぶ量子力学 初版, 日本, 株式会社講談社 野間 佐和子, ２００１年１０月２０日, 第1版, PP.230-239

(58)調査した分野(Int.Cl., ＤＢ名)
Ｇ０９Ｂ １／００－９／５６，１７／００－１９／２６，２３／００－２９／１４