

基礎化学1 第9回(基礎無機分野1)
原子の構造と原子軌道

本日のポイント

原子の構造

電子, 原子核(陽子 + 中性子)

原子の誕生

ビッグバンでHとHe, 恒星での核融合と超新星爆発・中性子星の融合で他の元素が誕生

原子軌道

原子中の電子は特定の「軌道」でのみ安定

電子の「軌道」は3つの量子数で表せる

主量子数(核からの遠さ)

方位量子数(形)

磁気量子数(向き)

身近な全ての物質は原子から出来ている

(宇宙には原子以外から出来ているものもあるが、身近には存在せず化学の対象外)

昔は、

- ・物質は原子(分割出来ない粒)から出来ている
- ・連続的にどこまでも分割出来る

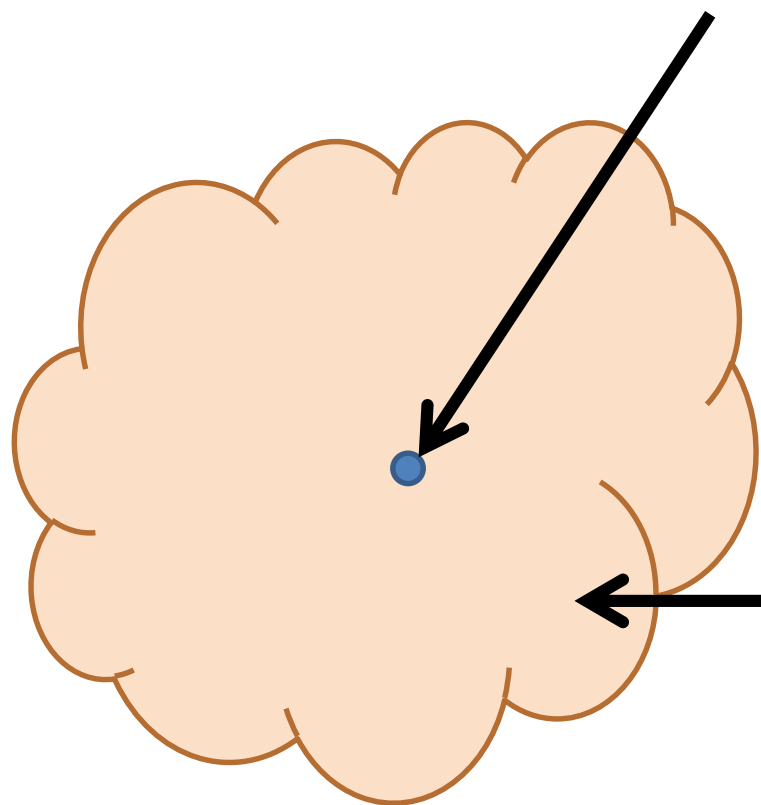
という説が対立していたが(後者が優勢), 1900年頃になりようやく原子説が広く認められるようになった.

原子: 物質の基本であり, 分割不能で, 不変な単位

.....だったのだが, 同時期(1897)に電子が発見されており, 原子が分割可能である事が明らかに. 核分裂の発見もほぼ同時で(1903), 不変では無いことも判明した.

原子の構造

20世紀の初頭によく存在が実験的に認められた原子。
科学の発達により、その内部構造が明らかとなっている。



原子核(正電荷を持つ)

原子番号と同じ数の陽子

同じぐらいの数の中性子

サイズ的にはほとんど点。

(原子サイズの1/10万程度)

原子の質量のほぼ全部

(=陽子の数 + 中性子の数)

電子(負電荷を持つ)

原子番号と同数(中性時)

重さはほとんど無い

もやっと広がっている

この原子モデル成立の流れを超簡略版で

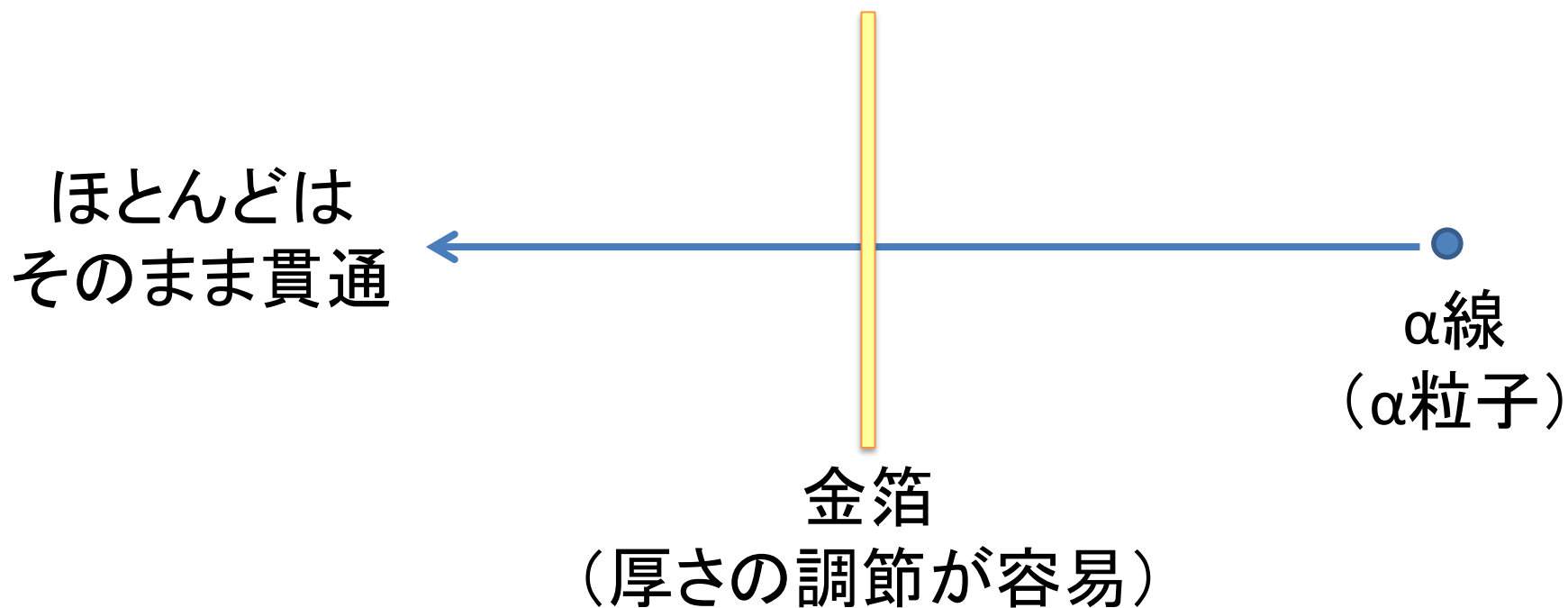
電子の発見

19世紀：真空技術（ポンプ）の発達

- 真空放電管（1855頃，ブリュッカー，ガイスラー）
真空にして高電圧をかけると，空間中を
電流が流れる（真空中を「何か」が飛んでる）
- 陰極線の発見（1860年頃，ブリュッカー）
真空中で金属を加熱すると，「何か」出てくる
- 磁場で曲がることを発見（1875頃，クルックス）
この「何か」は「負に帯電した粒子」と考えられる
- 精密測定に成功（1897年頃，J. J. トムソン他）
この「何か」は，水素原子の1/1000以下の
重さしか持たない，負に帯電した粒子
原子よりさらに小さい「電子」の発見

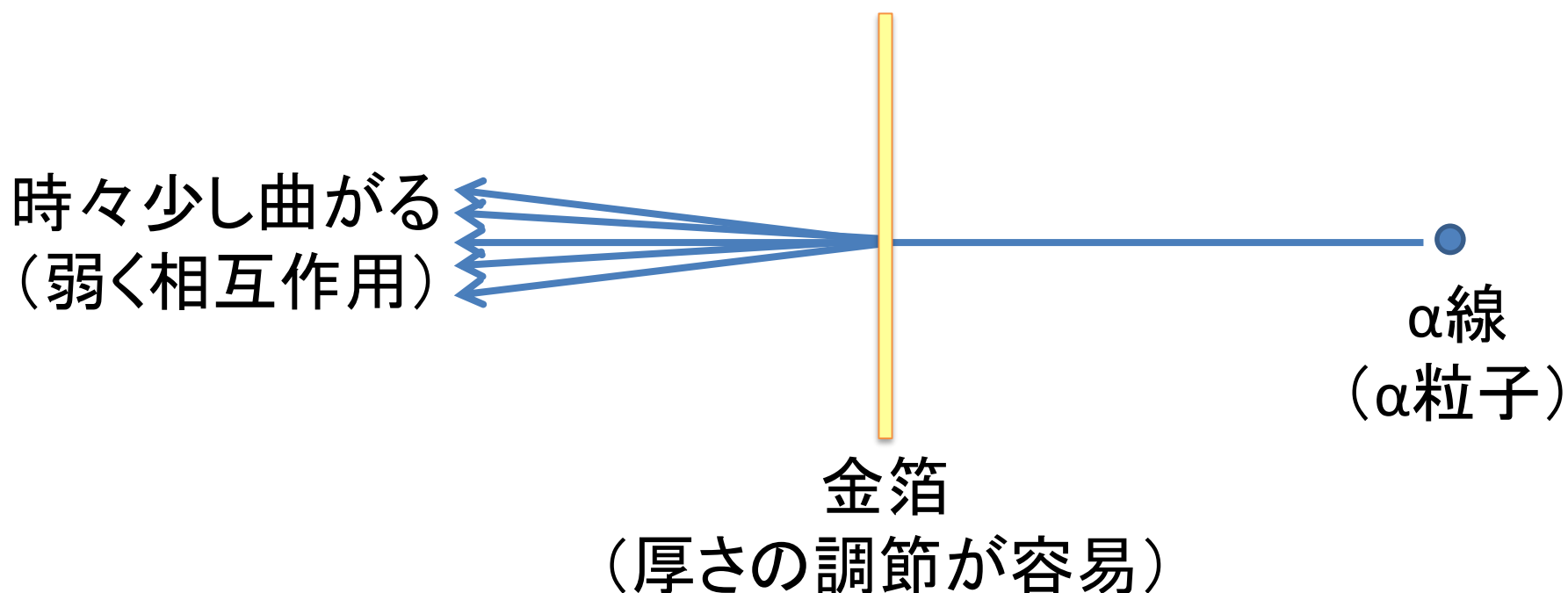
原子の中身はどうなっている？：ラザフォードらによる実験

α 線（正体不明な、+2に帯電した凄く小さく重い粒子。
電子と比べ貫通力が強い）の性質を調べていた。



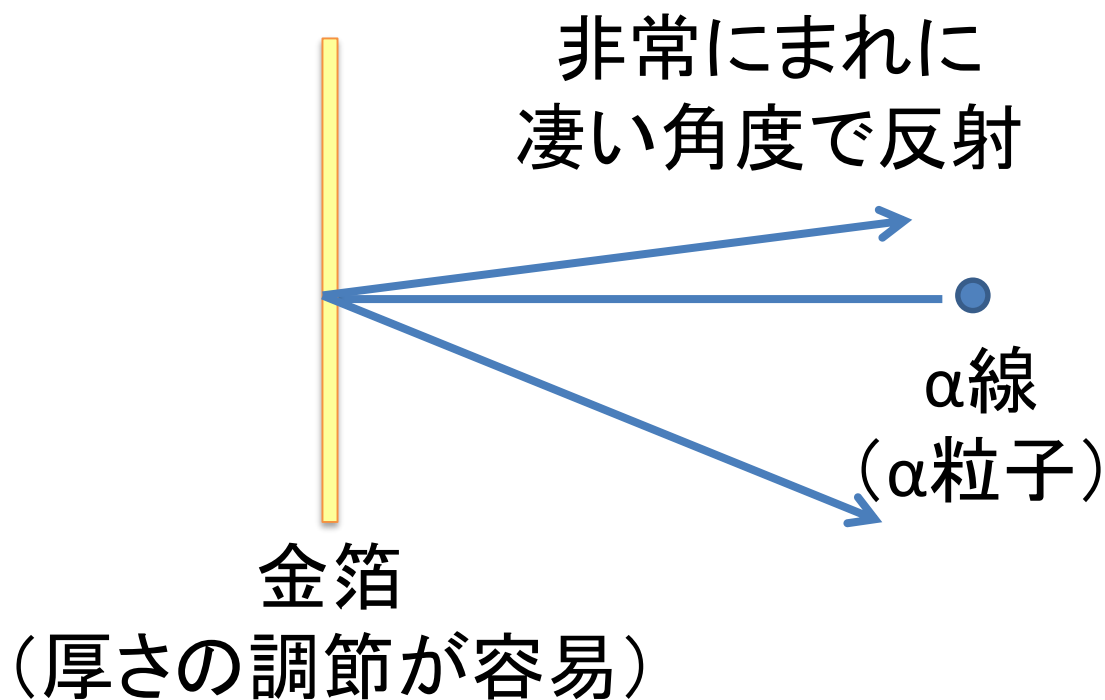
原子の中身はどうなっている？：ラザフォードらによる実験

α 線（正体不明な、+2に帯電した凄く小さく重い粒子。
電子と比べ貫通力が強い）の性質を調べていた。



原子の中身はどうなっている？：ラザフォードらによる実験

α 線（正体不明な、+2に帯電した凄く小さく重い粒子。
電子と比べ貫通力が強い）の性質を調べていた。



これはいったいどうやったら説明出来るのか？

正に帯電した α 粒子を打ち返す

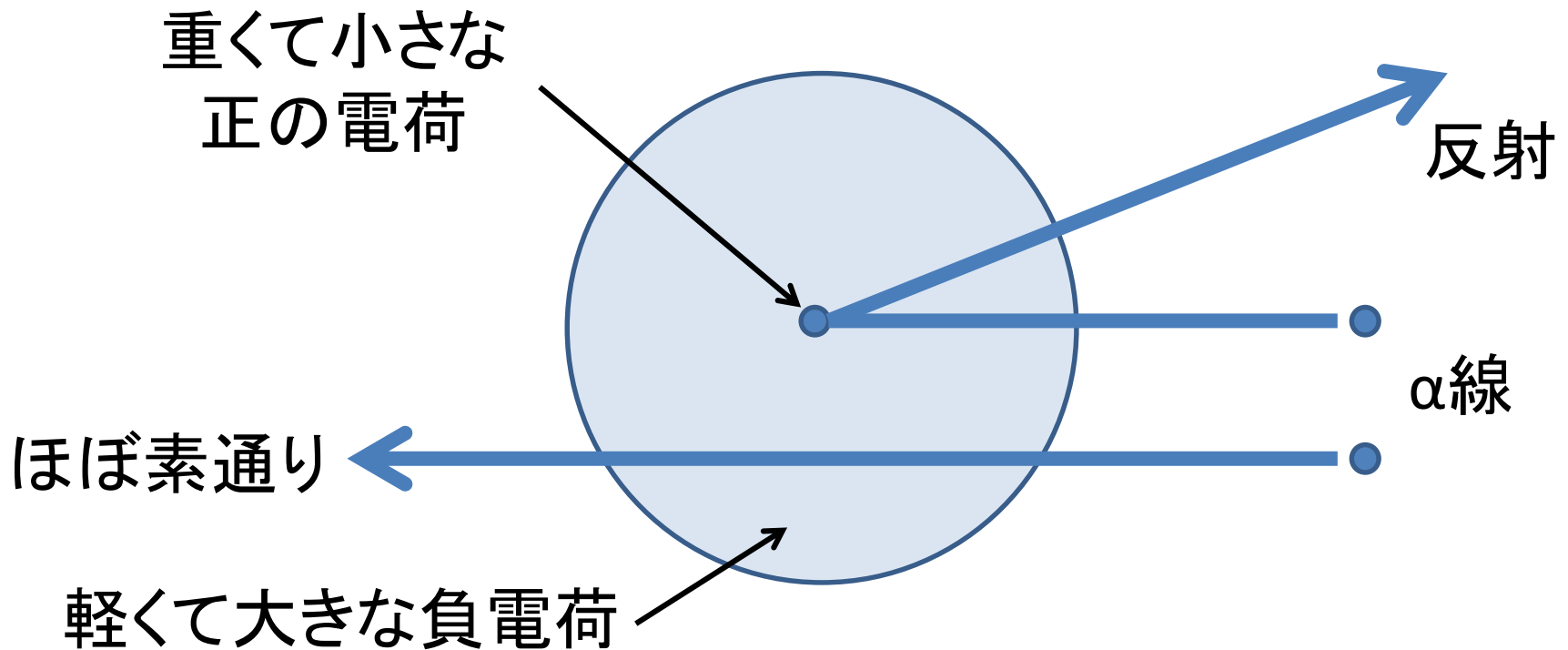
→ 正に帯電した何かがある。

ほとんどの α 粒子はほぼ素通り

→ ほとんどの場所は空っぽ

非常にまれに、勢いよく反射される

→ 重くて小さな正電荷がある



こうして、

「小さくて正の電荷を持つ重い原子核」

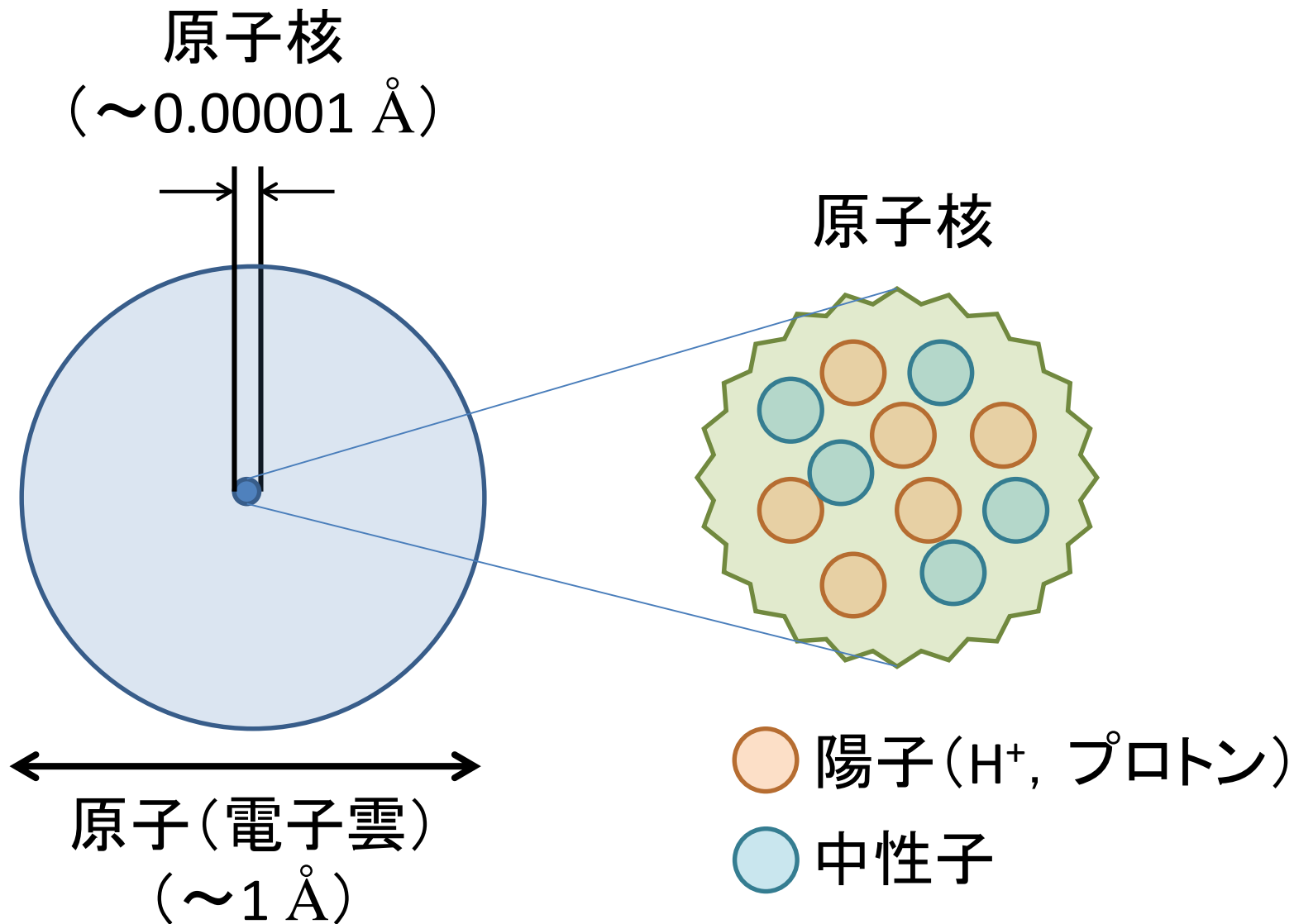
と

「その周りの広い範囲にある軽い電子」

から出来ているという原子模型が成立.

これで原子の構造がわかったかと思いきや、その後原子から電荷を持たない粒子が飛び出すことが発見される.

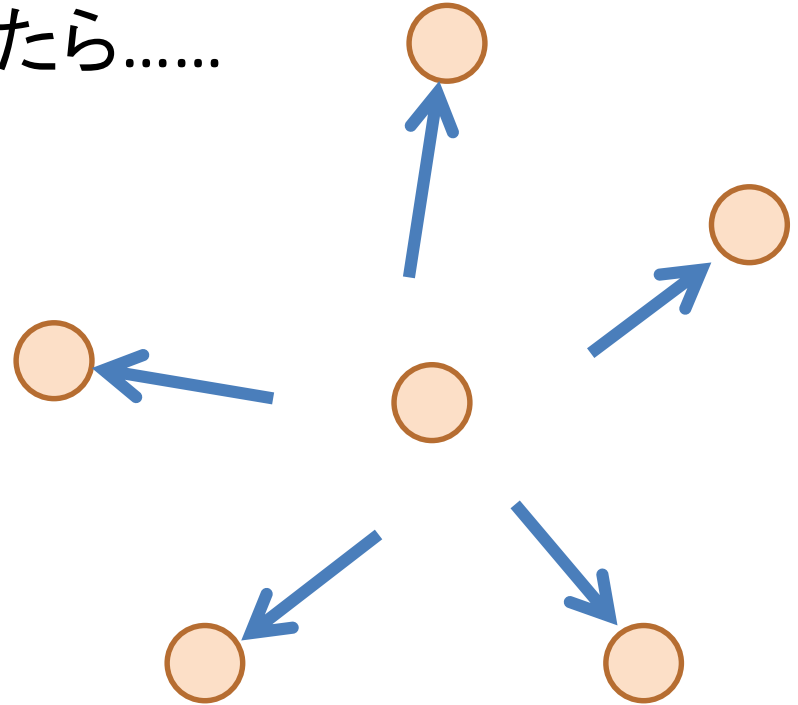
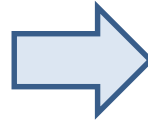
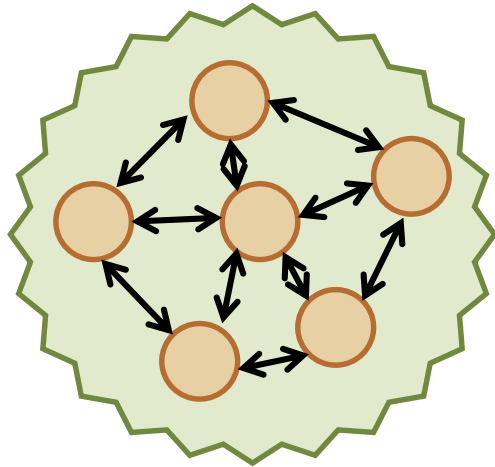
→ 中性子の発見



陽子と中性子の重さはほぼ同じ。
電子はその約1/1840程度の重さ(ほぼ無視できる)。

中性子は、原子核を安定にするのに非常に重要

もし原子核に陽子しかなかったら.....

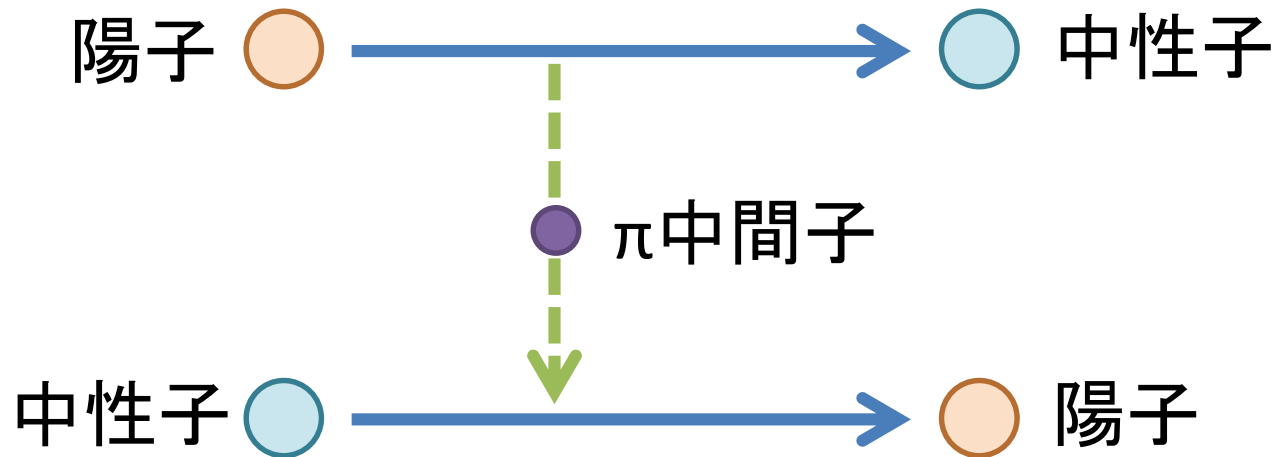


陽子(正に帯電)同士の
強いクーロン反発

あっという間に
原子核はバラバラに

中性子がある場合

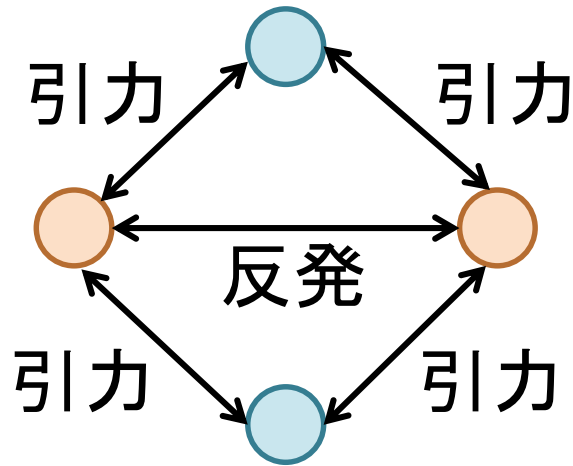
中性子と陽子は、互いに変換出来る



この変換の際に、強い引力が働く

このあたりの話は核物理・素粒子物理になってしまうので、ここでは詳細は省略.

その結果.....



陽子-陽子間の強い反発を,
陽子-中性子間の強い引力で
押さえ込む



原子核が安定に存在出来る

陽子過剰核:クーロン反発が強くて不安定

陽子がこぼれ出たり, β^+ 崩壊によって陽子が中性子に変換されたりといった核崩壊を起こしやすい.

中性子過剰核:元々不安定である中性子が多すぎて不安定

中性子を安定にする引力が足りず, β 崩壊で中性子が陽子に変わる核崩壊を起こしやすい.

そのため, 中性子が陽子と同数かやや多めの時, 原子核は安定.

※重原子では陽子が多く反発が強いため, 中性子がもっと増える

原子の表記

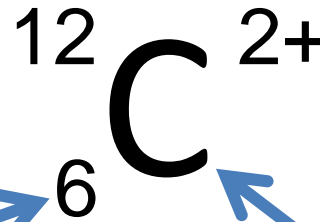
質量数

(=陽子と中性子の数の和)

※両者の重さはほぼ等しい。
電子は軽いので無視

電荷 (=陽子数-電子数)

中性なら書かない
電子が多いと-
電子が少ないと+



原子番号 (=陽子の数)

※元素記号でわかるので、
省略することが多い

元素記号

なお、同位体効果が大きい
水素に関しては、 ^2H や ^3H を
D, Tと書くこともある。

質量数が省略されているときは、自然界での平均値を意味する

こういった「原子」は、どのように生まれたのか？

原子の誕生

そもそもは、ビッグバン(137±1億年前)に遡る

ビッグバン(超高温=超高エネルギーの宇宙)



高エネルギーの光による素粒子の対生成
光子 → クォークや電子等 + その反粒子



宇宙が膨張し、温度(エネルギー密度)が下がる



バラバラだった素粒子が凝集し、
より安定な陽子・中性子を作る

生じた多数の陽子(p)・中性子(n)とその反粒子

 謎の効果(いまだ不明)

反物質の方がちょっと量が少なくなり,
通常物質が少しだけ残る(現在の物質の起源).



不安定な中性子は,

分解して陽子に変化

or

陽子を捕まえヘリウム原子核 ${}^4\text{He}$ に(p+p+n+n)

※一部は重水素 ${}^2\text{H}$ (p+n)に変化

この結果、宇宙には

- ・陽子(水素原子核)
- ・ヘリウム原子核
- ・電子

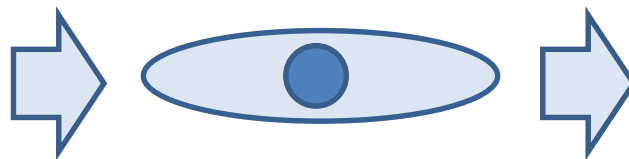
が多量に生成するが、これ以外の元素はほとんど無い。
残りの元素は全て第1世代の恒星が作った。

宇宙を漂う
水素とヘリウム



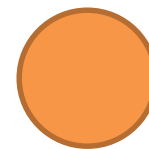
星間ガス

重さ(重力)で
次第に凝集



ガス円盤

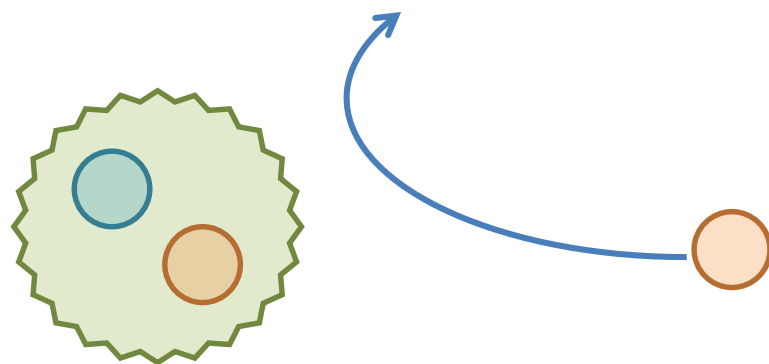
高温・高圧になり
核融合が始まる



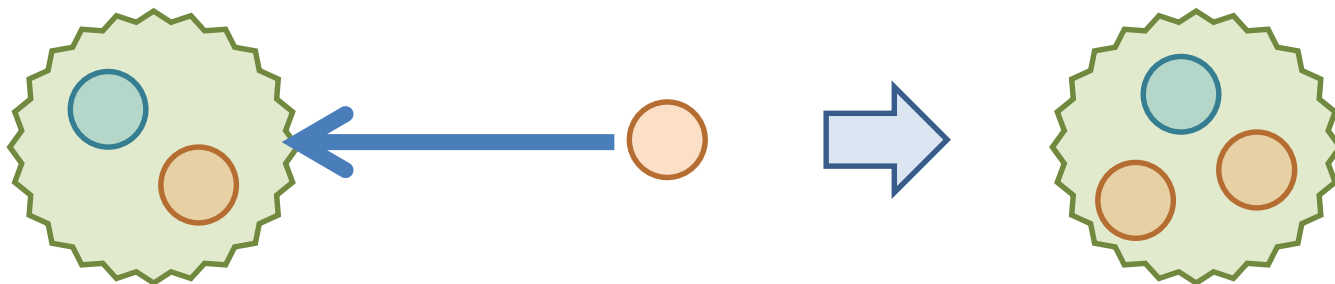
恒星

陽子・中性子がくっついて大きな原子核になると、
結合エネルギー分だけ安定になる。

しかし陽子同士には反発が働くので、
原子核にもっと陽子を詰め込むのは難しい。

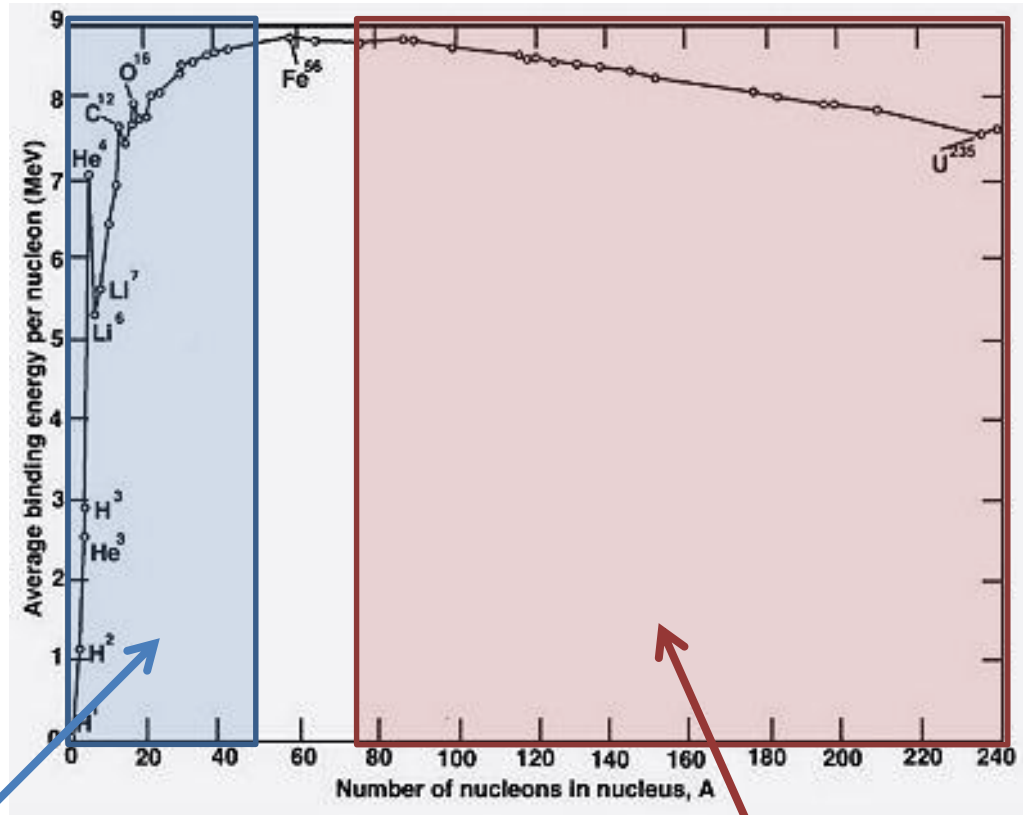


温度・密度が上がると速い速度で衝突する陽子が増え、
クーロン反発に負けずに衝突(=核融合)を起こせる。



このようにして、鉄・ニッケルぐらいまでの元素は恒星中でなんとか合成出来る. しかしそれより重い元素を作るには、エネルギーを投入する必要がある.

核子一つあたりの結合エネルギー



原子番号

核融合して重くなった方が
エネルギーが下がる

核分裂して軽くなった方が
エネルギーが下がる

では、鉄よりも重い原子はどうやれば作れるのか？

→ 中性子を打ち込めば良い

中性子は電荷を持たないので、原子核に容易に入り込む。こうして多くの中性子を吸収した原子核が β -崩壊すると、中性子が陽子(と電子)に崩壊するため、原子番号が大きい原子を作る事が出来る。

この中性子を吸収する過程には、恒星内部でゆっくりゆっくり(slowに)中性子を吸収する「s過程」と、急速(rapid)に大量の中性子を詰め込む「r過程」の二つがあり、それぞれ出来やすい元素が異なっている。

s過程はともかく、一気に大量の中性子を詰め込むr過程とは何なのか？

原子核に多量の中性子を押し込むと、中性子過剰核に.



陽子26	陽子26	陽子26	陽子26	陽子26	陽子26
中性子31	中性子32	中性子33	中性子34	中性子35	中性子36

注:これはイメージで、この通りの反応が起きるわけではない

中性子過剰核は不安定 → β崩壊して原子番号が増える



陽子26	陽子27	陽子28
中性子36	中性子35	中性子34

β崩壊: 中子が電子を出し、陽子に変わる

この過程(r過程)が起こるには

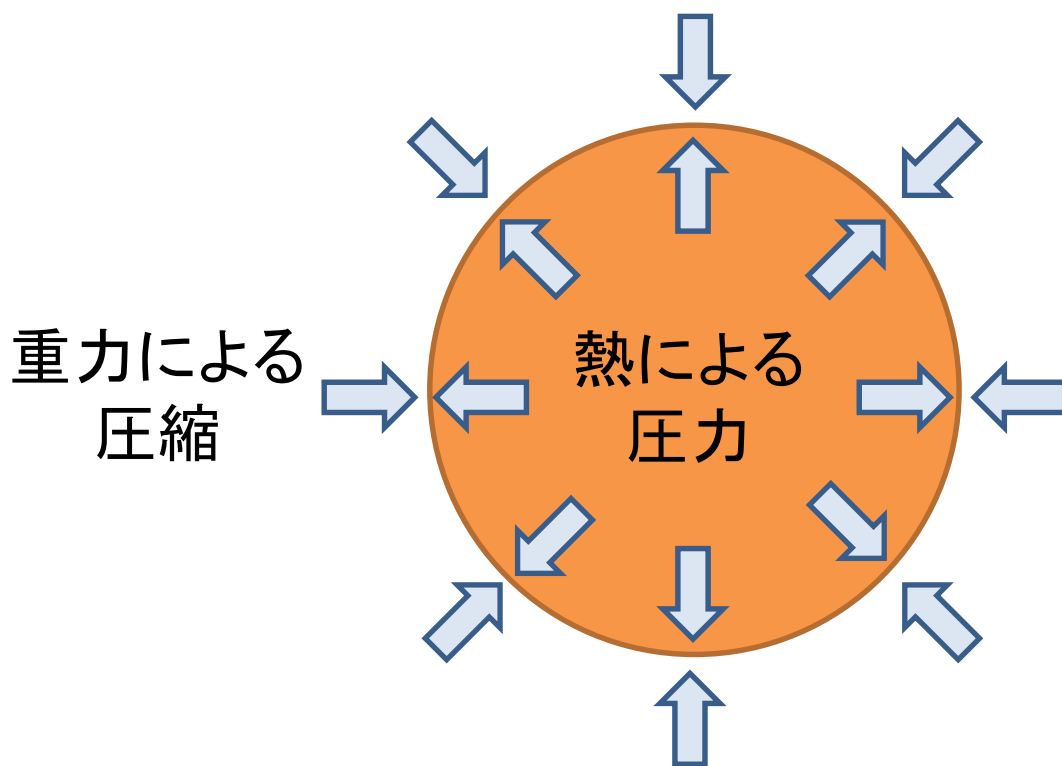
「原子核が崩壊するよりも短時間(1/1000秒以下など)」

の間に、多量の中性子を原子核に打ち込む必要がある。
そんなに高密度の中性子が飛び交っている場所があるのだろうか?

最近の研究から、r過程により生み出される重元素の多くは「中性子星の合体」によって生み出されているらしいことがわかってきた。

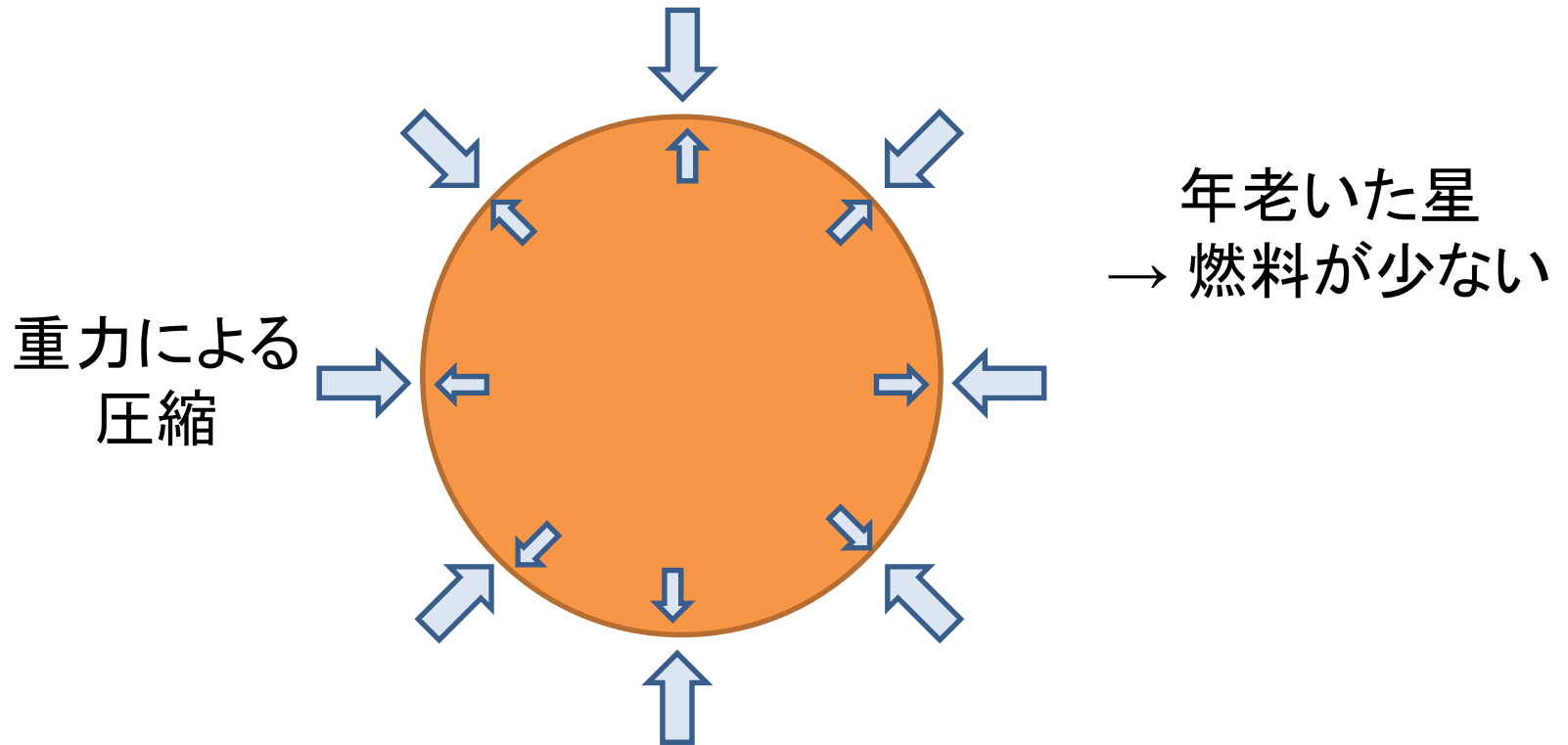
太陽などの恒星はものすごく重い。

このため、非常に強い重力で、圧縮しようとする力が働く。
通常は核融合による熱がこれを支えているが、年老いて燃料が少なくなると重力が勝ち、一気に爆縮・爆発する。



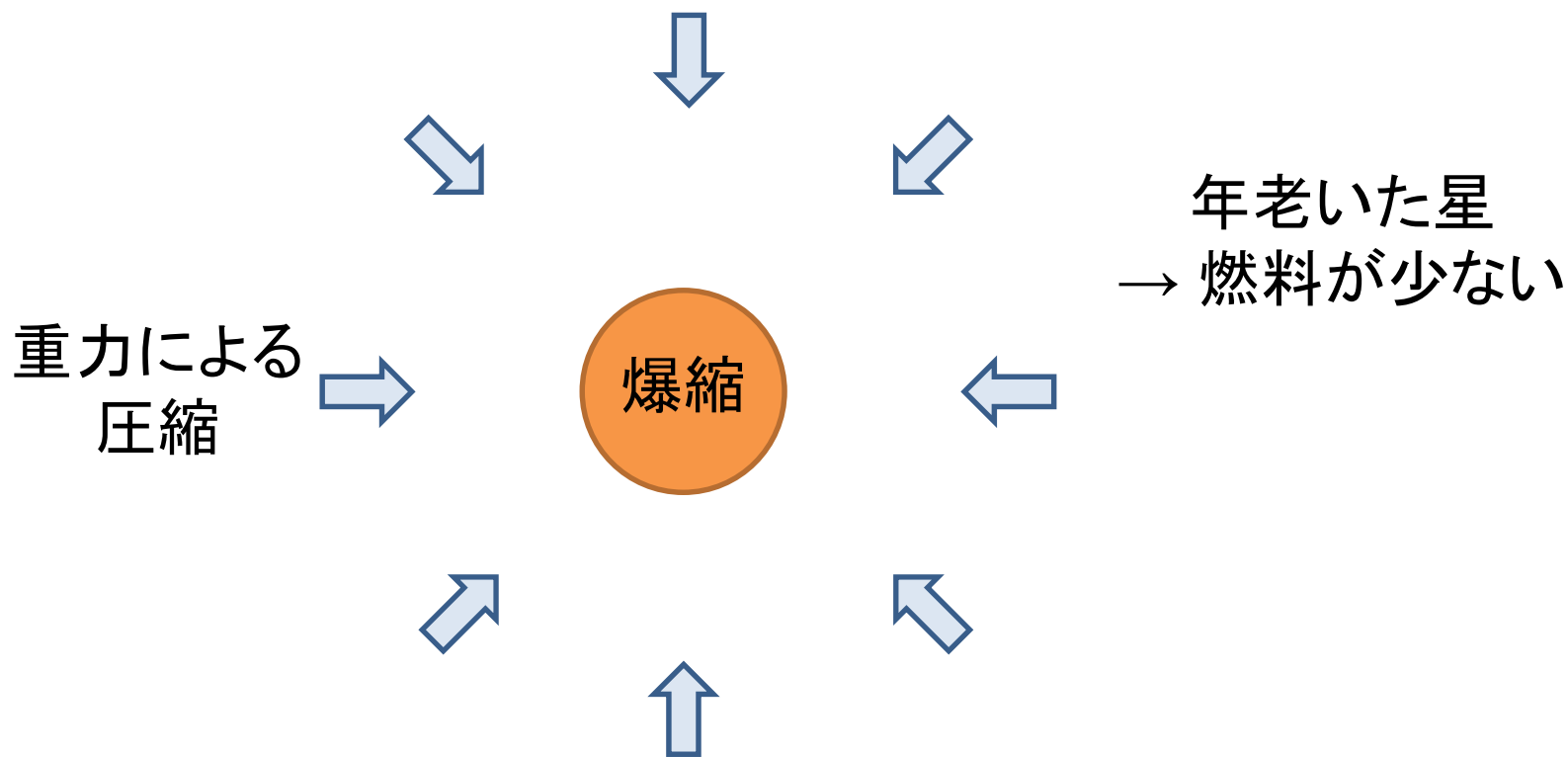
太陽などの恒星はものすごく重い。

このため、非常に強い重力で、圧縮しようとする力が働く。
通常は核融合による熱がこれを支えているが、年老いて燃料が少なくなると重力が勝ち、一気に爆縮・爆発する。



太陽などの恒星はものすごく重い。

このため、非常に強い重力で、圧縮しようとする力が働く。
通常は核融合による熱がこれを支えているが、年老いて燃料が少なくなると重力が勝ち、一気に爆縮・爆発する。



※この爆縮のときにも、ある程度の重原子は作られる。

このとき残されるのが「中性子星」である。

(※重すぎる恒星の場合、ブラックホールになる)

中性子星では、太陽程度(地球の33万倍程度)の物質が直径わずか10~20 km程度(山手線の内側ぐらい)の領域に圧縮されている。このとき恒星を作っていた元素の陽子と電子が重力で強引に圧縮、そのほとんどが中性子へと変換されてしまう。言うなれば、「直径10 kmの、超巨大で超中性子過剰な原子核」のようなものである。

宇宙には、このような中性子星が連星となっているものが多数存在する。そういった連星は重力波を発生しながら徐々に近づき、最後には合体しブラックホールになる。

その瞬間、猛烈な爆発により中性子星表面=少量の原子とあり余る中性子が放出され中性子過剰核を生成、そこから重原子が生み出される。

今我々の身近にある重原子の多くは、第1世代の恒星の内部で生み出されたり、それら第1世代の恒星が超新星爆発する時や、なれの果ての中性子星の連星が合体・爆発した際に生み出されたものである。

（太陽は第2世代、つまり第1世代の残骸から生まれた星）

※ただし、現在でも宇宙にある原子の90%は水素原子で、10%がHe原子。その他の原子は誤差程度の微量である。
（原子の個数で比較した場合）

化学で大事なものは、外側において他の原子と触れる電子.
では、その電子はどのような形で存在しているのか？

シュレディンガーの波動方程式

高校教科書っぽい原子のモデル:

中心にある正電荷を持つ原子核が
周りの電子(負電荷)を引っ張る。
点状の電子は、地球をまわる月のように、
原子核の周りをまわっている。

実はこの考え方は正しくない。

電磁気学によれば「円運動＝加速運動する電荷」
は電磁波を放射してエネルギーを失っていく。

そのため、もし電子が本当にぐるぐる回っている
のなら光を放出しつつエネルギーを失い、原子核
に落下していつてしまう。

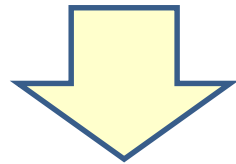
20世紀に入ってから物理学の発展により、電子のような小さなものの運動を説明するためには、「量子力学」と呼ばれる新しい考え方が必要だということが明らかになっている。

量子力学においては、すべての物質を「波」として取り扱う。非常に軽い粒子である電子を説明するには、電子を「粒子」として扱うのではなく、「波」として扱った方がより正確である。

そのような「波」としての物質がどのように動くのかを表す式が、「シュレディンガーの波動方程式」。
(以下、数学的な部分は聞き流しても良い)

古典力学:すべての物体は粒子. 粒子の運動はニュートンの運動方程式で表される.

$$F = ma = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$$



量子力学:すべての物体は波. 粒子の運動は波の運動を表す波動方程式で表される.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(r) = E\psi(r)$$

※定常状態の場合の式. 時間変化する場合は, 微妙に違う.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(r) = E \psi(r)$$

二階微分
運動エネルギー
(動的なもの)

位置エネルギー
(原子核からの引力等)

電子の全エネルギー

電子の「状態」を表す関数
(「状態」が何かは後述)
※「波の形」に相当する

電子は,

『関数の位置エネルギーと二階微分を足すと、元の定数倍になる「状態」しかとれない』

という事を意味している(とれる状態が限定される).

例えば水素原子の電子の状態を計算しようと思うと.....

1. ポテンシャルの部分に, 原子核と電子との引力を代入

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \psi(r) = E\psi(r)$$

2. 方程式が解を持つ条件から, エネルギー E が決まる.
(詳細は省略. 「二次方程式が実数解を持つ条件」のように,
特定の場合しか解があり得ない)

3. ある特定の E の値に対し, その時に方程式を満たす $\psi(r)$ を
求める. これが電子に許される「状態」となる.
(これも, 特定の式の形のみが方程式を満たす)
それ以外は(少なくとも定常状態としては)許されない.

ただし、厳密に解くのは非常に難しい。

それどころか、電子の数が2個以上になると厳密解を求めることは出来なくなる(電子間の反発があるとダメ)。

ただし全く役に立たないわけではなく、「近似解」を求める手法が多数開発されており、「実際の状態に近い解」は求められるようになってきている。

数学的な話はとりあえずここまで。

まあ要するに、

電子は好き勝手に動けるわけではなく、
波動方程式を満たす、限られた「状態」しか
許されない。

ということだけわかっていたらよい。

ここで根本的な疑問.

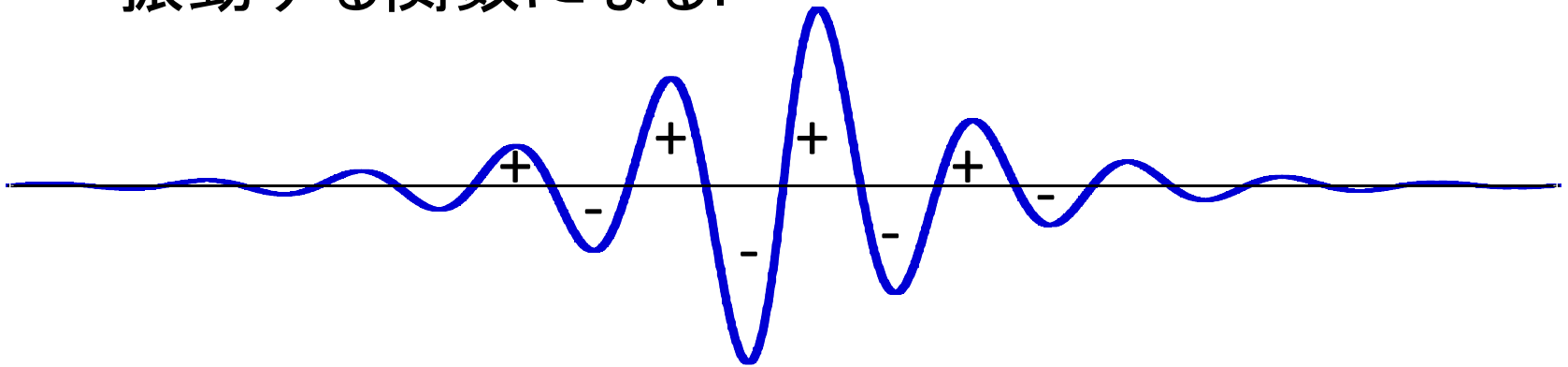
そもそも、電子の「状態」と呼んでる $\psi(r)$ って何？

$\psi(r)$: 波動関数と呼ばれる.

粒子に関する「全ての情報」を含んでいる.

(空間分布, エネルギー, 運動量, etc.)

波を表す方程式からスタートしているので, 空間的に振動する関数になる.

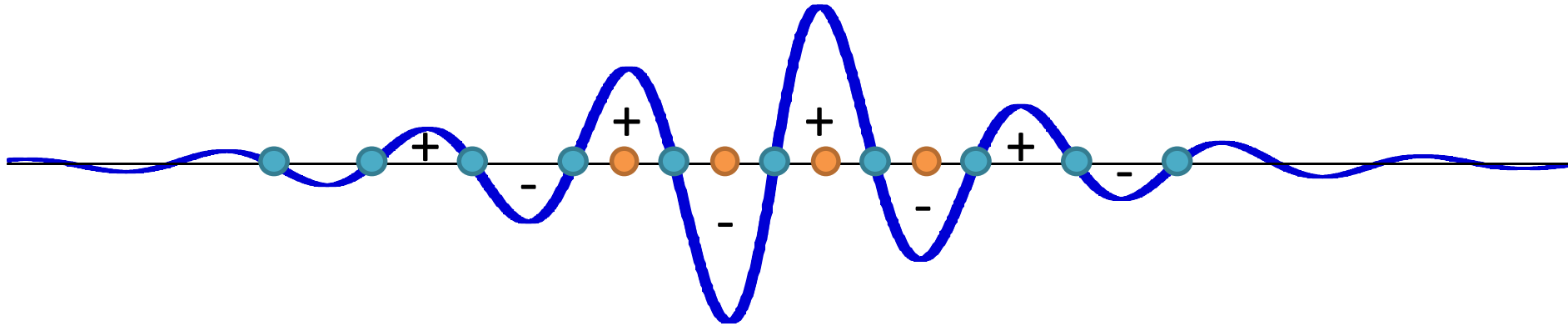


古典論の波: 振幅を二乗すると, その点での波の強度

類推: 波動関数を二乗すると, 粒子の強度になる

粒子の強度 = その点に粒子が存在する確率
(ボルの解釈)

- このあたりで電子を見つける可能性が高い
(二乗するので, + でも - でも関係無い)



- この点で電子を見つける可能性はゼロ
(二乗した値がゼロ = 存在確率がゼロ)

その他の点は, 確率は低いけど
電子を見つける可能性が少しはある.

*なお, 確率なので, 波動関数の二乗を全空間で足し
合わせると1になる(そのように比例定数を決める).

シュレディンガー自体は、

「波動関数の形に、電子自体がぼやけて広がっている」

と考えていたようである。

しかし、「電子がどこにいるのかを測定」すると、必ず一点に1個の電子が見つかるだけで、「1/10個の電子」などは見つからない。そのため「波動関数の二乗は電子を見つける確率を表す」というボルの解釈が主流になっている。

観測した瞬間、その場に「粒子」が出現する、と言っても良い。では観測していないときは粒子はどうなっているのか？
という、それに対しては量子論は何も答えてはくれない。
(シュレディンガー風に、「相互作用してないときは粒子が空間中にぼやけて広がる。相互作用した瞬間に、粒子が一瞬にして一点に集結する」としても同じ結果になる)

確率(の分布)だけがきっちり決まっていて、粒子がどこにいるのかがよくわからない、というのは我々の日常の常識には反している。

しかしそもそも、「日常の常識」などというのはごく限られた範囲を観測して得られた情報に過ぎない。

それとは大きく異なる微小な世界(=量子論の世界)での物質の振る舞いが、我々の常識と同じで無ければならない理由はどこにも無い。

量子論(や、そこでの電子の挙動)には奇妙な特徴が沢山あるが、最終的には無理に日常的なものに当てはめようとせず、「そういうものだ」と理解するしかない。

結局、電子は波なのか粒子なのか？

→ どちらでもありません。粒子と波の性質を併せ持った何かです。そんなものは身の回りにはありませんが、量子の世界は全部そんなものなので諦めてください。

波動関数のプラスとかマイナスとかは何を意味してる？

→ 不明です。よくわかっていません。

物理的に測定できる量は、全て波動関数の二乗に関係しているので、プラスとかマイナス(位相と呼ぶ)がそのまま見えることはありません。

ただし、二つの波動関数が相互作用するときには、互いの「位相の差」は意味を持ち、測定出来ます。

(ただし、物理的意味は不明なまま)

注意！

時々勘違いする学生がいますが、

・波動関数(軌道)のプラスとマイナス

と、

・電氣的なプラスとマイナス

には何の関係もありません。

軌道のある部分が「+」だったとしても、そこに正電荷が存在したりするわけではないので、勘違いしないように。

また、エネルギーの大小とも直接は関係しません。軌道のある部分が「+」でも、そのエネルギーが高かったりはしません。

取りあえず覚えておくべき事:

1. 電子の状態は, 波動関数という波っぽい関数で書ける.
ただし「何が振動しているのか?」は不明
2. 特定のエネルギー & 波動関数だけがシュレディンガー方程式の解になれる. つまり, そういう特定の状態以外を(定常状態の)電子はとることが出来ない.
(数学的に許されない)
3. ある位置での波動関数の二乗は, その点で電子を見つける確率に比例する.
4. 波動関数には位相があり, +になったり-になったりする.
ただし, 存在確率に対しては+も-も関係無い.

では、化学で大事な実際の「原子」の中では
電子がどのような「状態」となっているのだろうか？

水素原子中の電子の波動関数 (原子軌道)

水素原子中の電子の運動

→ 数少ない「厳密に解ける」系

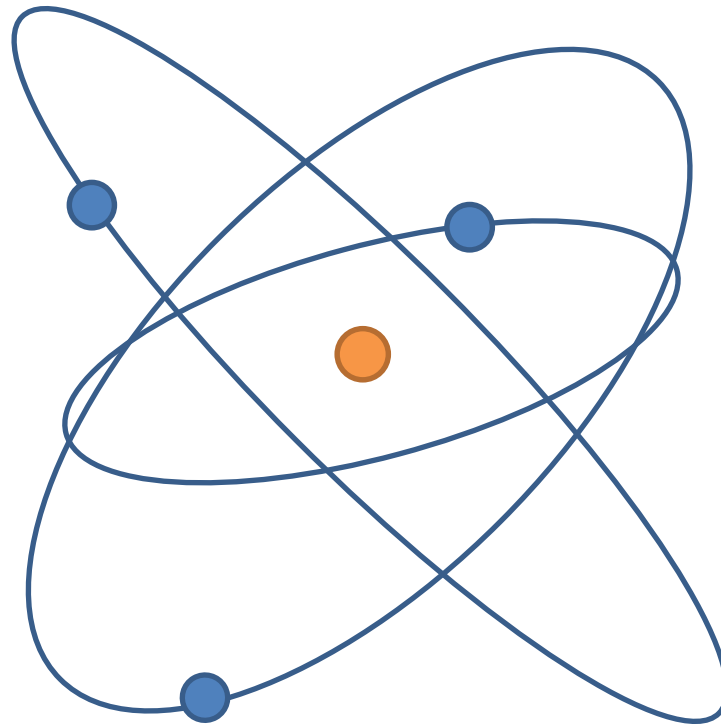
とは言っても水素原子のシュレディンガー方程式を解くのはかなり面倒なので、ここでは結果のみを示す.

ポイント1: 電子に許された「状態」を、「軌道」と呼ぶ.
電子は自由な状態をとれるわけではなく、どれかの「軌道」に入ったときだけ安定になる.

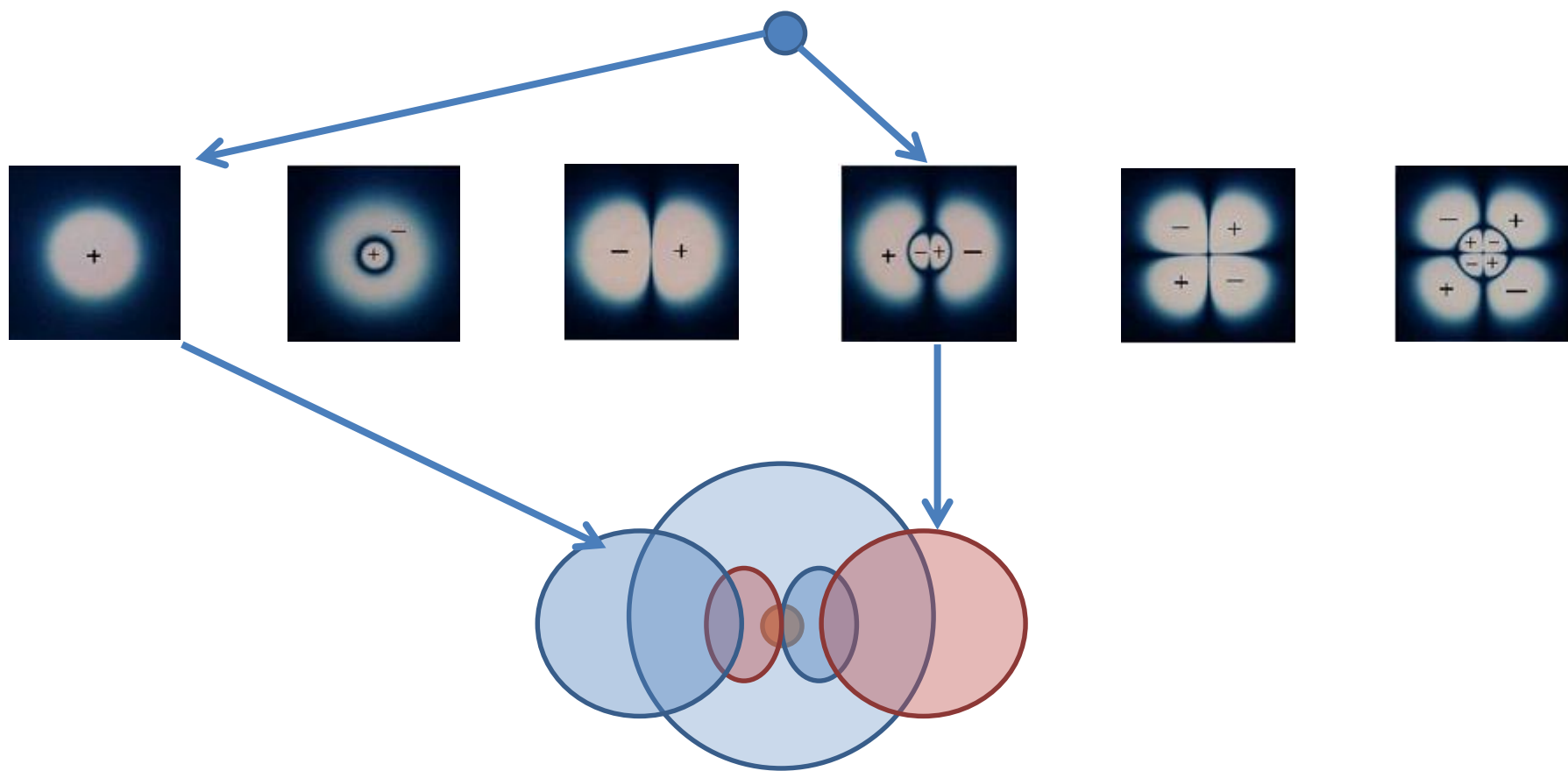
(電子は既に置いてある空席に座ることしか出来ない)

これは、波動方程式においては、特定の関数しか解になれない事に由来する.

古典力学：電子は好きな軌道で運動して良い
(野原で、好きな場所に居座って良いようなもの)



量子力学: 決められた配置に入ることしか出来ない
(既に椅子が置いてあって, そのどれかに座る事しか
出来ないようなもの)



ポイント2: 方程式の解は3つの整数で特徴付けられる
(ボーア模型で, $1/n^2$ の離散的な状態が出たのと類似)

→ 主量子数, 方位量子数, 磁気量子数

主量子数: 核からの平均距離や, エネルギーが決まる.

主量子数が大きい = 核から遠く, エネルギーは高い
※高校化学で言う「電子殻」を表す数

方位量子数: 軌道の形を決める. 電子の周回に対応.

方位量子数 0 → 丸い(等方的)

方位量子数 1 → 2方向に直線状に延びる

方位量子数 2 → 4方向に十字型に延びる etc.

磁気量子数: 軌道の向きに対応.

X方向を向くのか, Y方向を向くのか etc.

これら量子数には、上下関係がある。

主量子数 n : 好きな正の整数 (1, 2, 3.....)

ただし n が小さい方がエネルギーが低く安定なので、通常は小さな n をとる。

方位量子数 l : 0 から $n-1$ までの整数。

$n = 1$ なら $l = 0$ (丸い) だけ

$n = 2$ なら $l = 0$ (丸い) または $l = 1$ (棒状)

$n = 3$ なら $l = 0$ (丸い) または $l = 1$ (棒状)

または $l = 2$ (十字型) までOK。

磁気量子数 m : $-l$ から $+l$ まで。例えば

$l = 1$ なら $m = -1, 0, 1$

$l = 2$ なら $m = -2, -1, 0, 1, 2$ が許される。

例1: 主量子数 n が1の軌道

方位量子数 l は0しか許されない($\because l \leq n-1$)

磁気量子数 m も0しか許されない($\because |m| \leq l$)

従って, 主量子数 n が1の軌道は1つしかない.

この軌道を1s軌道, と呼ぶ

(1が主量子数を表し, sが方位量子数が0を意味する)

例：主量子数 n が2の軌道

方位量子数 l は1か0 ($\because l \leq n-1$)

磁気量子数 m は1か0 ($\because |m| \leq l$)

$\{ n, l, m \}$ の組み合わせとしては、

$\{2, 1, 1\}$, $\{2, 1, 0\}$, $\{2, 1, -1\}$, $\{2, 0, 0\}$

の4つがある。

$\{2, 0, 0\} \rightarrow$ 2s軌道と呼ばれる

$\{2, 1, 1\}$, $\{2, 1, 0\}$, $\{2, 1, -1\} \rightarrow$ 2p軌道と呼ばれる

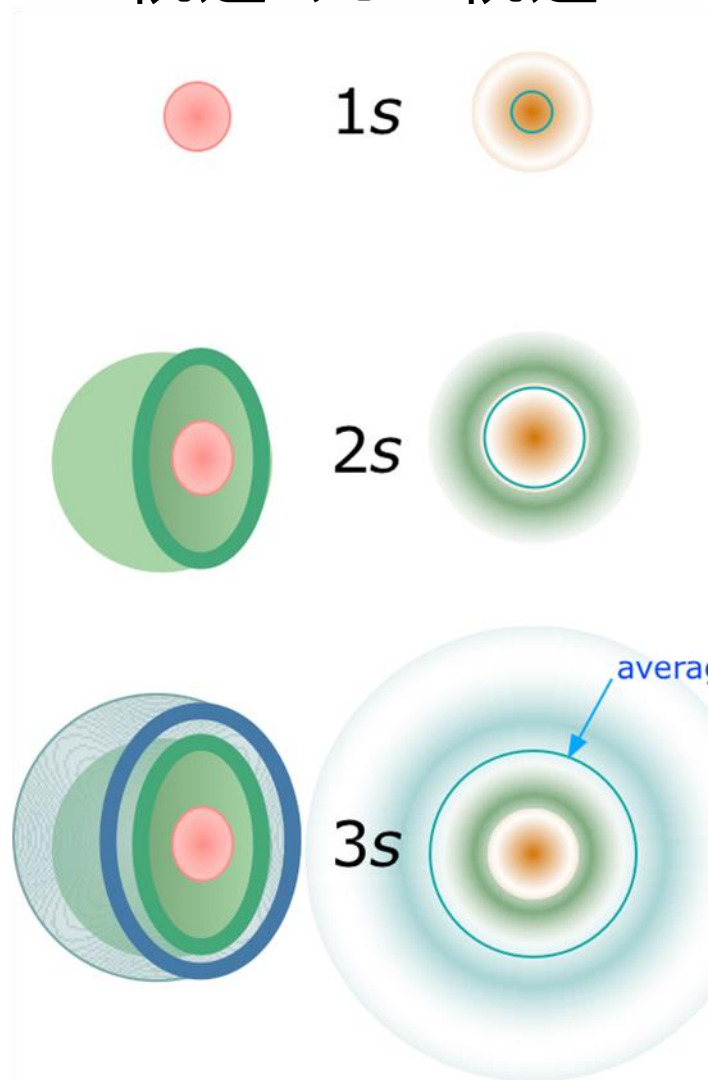
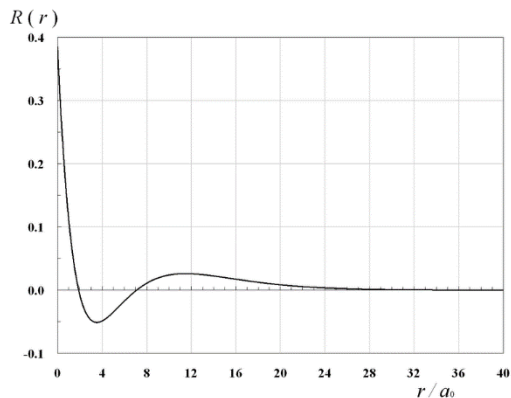
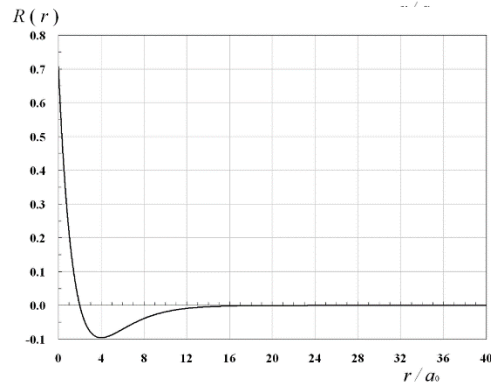
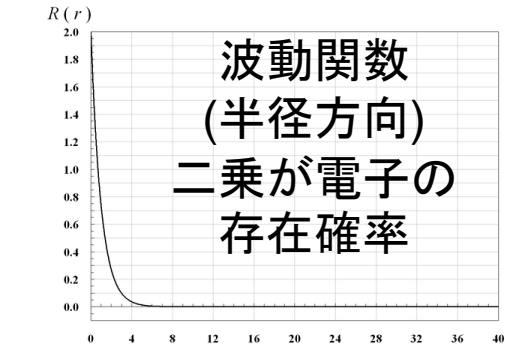
方位量子数が0, 1, 2, 3の軌道を, s, p, d, f 軌道と呼ぶ
(軌道の形による分類)

主量子数と、存在する軌道の一覧

主量子数	方位量子数	軌道
1	0	1s(球形)
2	0	2s(球形)
	1	2p _x , 2p _y , 2p _z (棒状)
3	0	3s(球形)
	1	3p _x , 3p _y , 3p _z (棒状)
	2	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²} (十字)
4	0	4s(球形)
	1	4p _x , 4p _y , 4p _z (棒状)
	2	4d _{xy} , 4d _{yz} , 4d _{xz} , 4d _{x²-y²} , 4d _{z²} (十字)
	3	4f _{5z³-3zr²} , 4f _{5xz²-3xr²} , 4f _{y³-3yx²} , 4f _{5yz²-yr²} , 4f _{zx²-zy²} , 4f _{xyz} , 4f _{x³-3xy²}

軌道の形 = 電子の確率分布を見た方がわかりやすい。

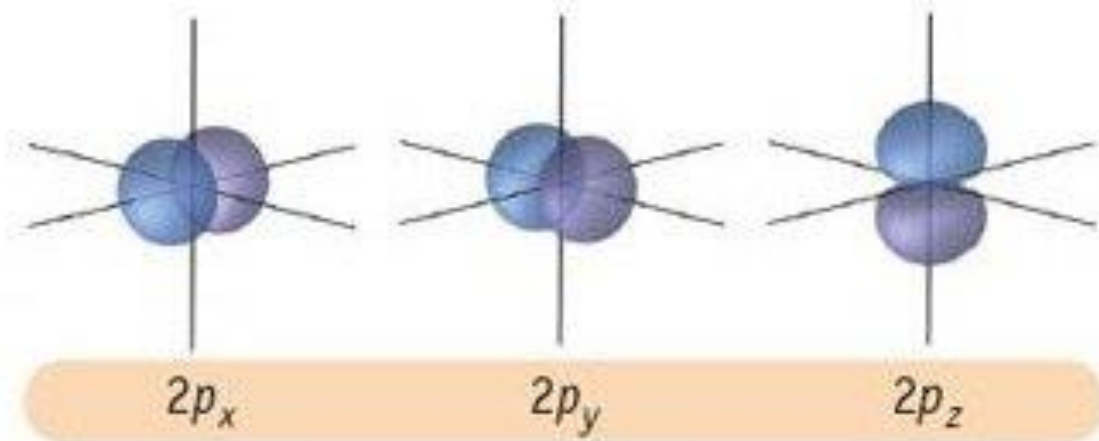
s軌道：丸い軌道



具体例：p軌道 ($l = 1$, 2方向に伸びる)

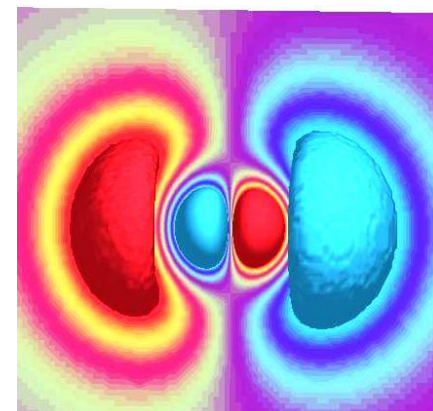
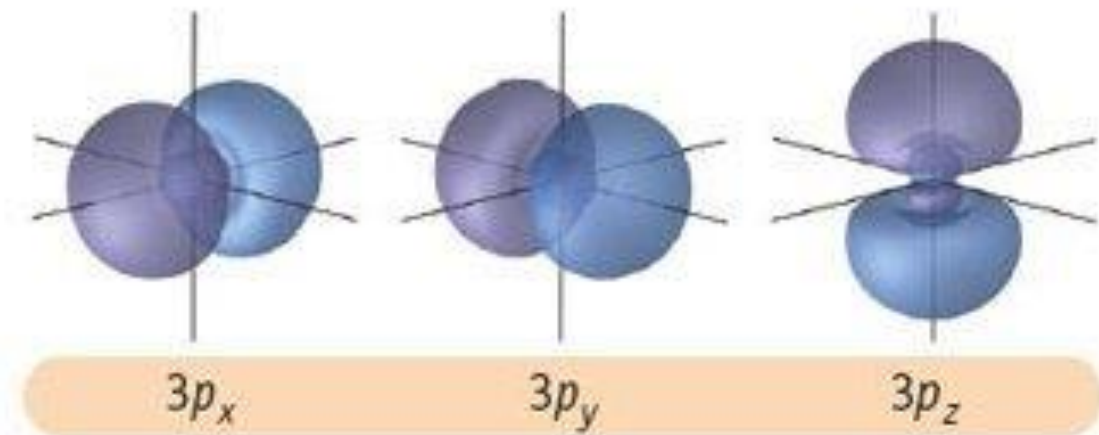
なおこういった軌道の形(曲面)は, その内側で電子を見つける確率が75%だとか90%だとかになるように描かれている.

(波動関数自体は, 無限に遠くまで薄く広がっている)



※ 1p軌道は存在しない
($l < n$ だから)

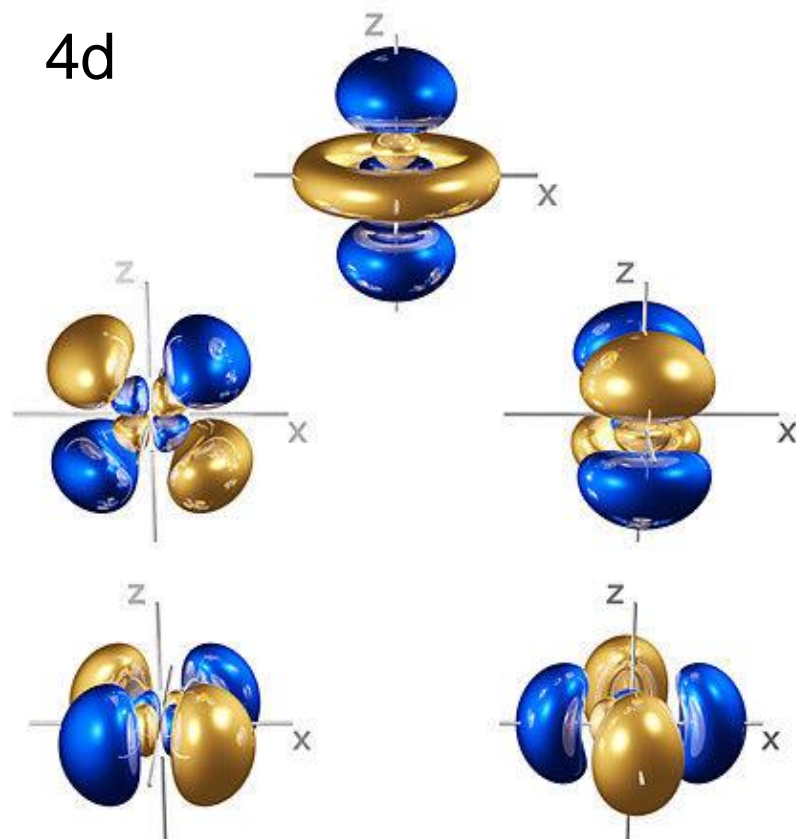
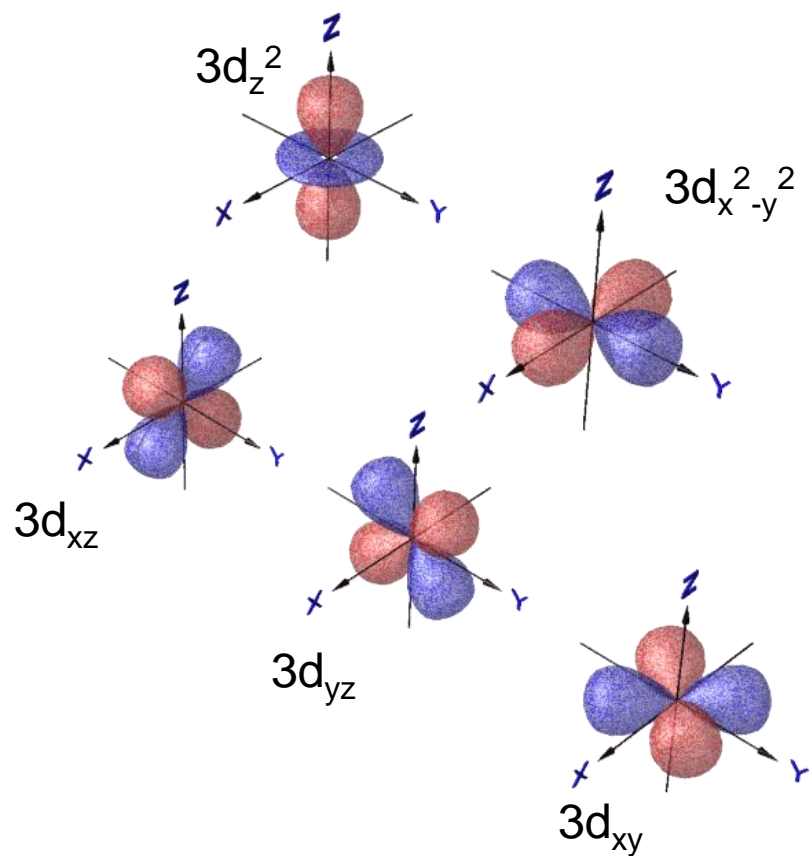
← 磁気量子数の違い



(左) http://www.fccj.us/e_config/movies/3pxYMov.html

(右) <http://faculty.ycp.edu/~jforesma/educ/pchem/chm344.htm>

具体例：d軌道 ($l = 2$, 4方向に伸びる)



d軌道があるのは主量子数3以降

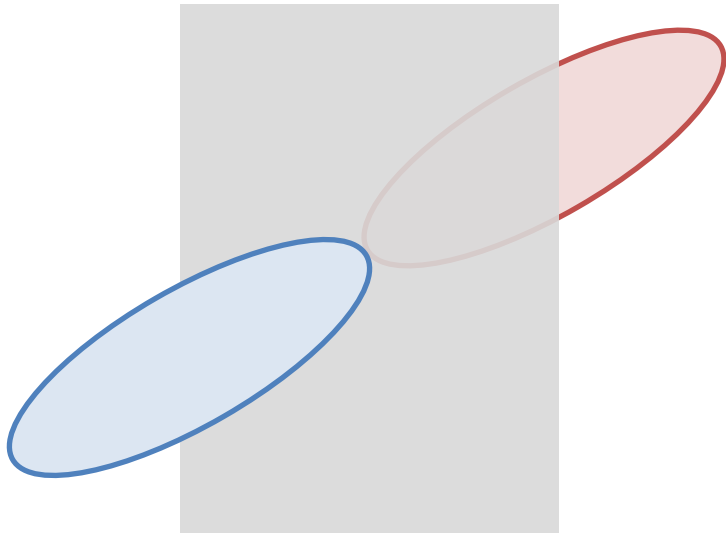
SCIENCEPHOTOLIBRARY

(3d) http://faculty.concordia.ca/bird/c241/notes_ch2-cwp.html

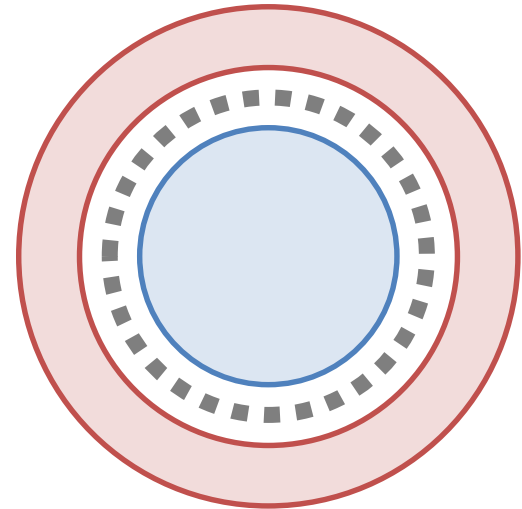
(4d) <http://www.sciencephoto.com/media/2190/enlarge>

軌道の+と-が入れ替わる面 → 節面(せつめん)
(節面では電子の存在確率がゼロ)

例: 2p軌道



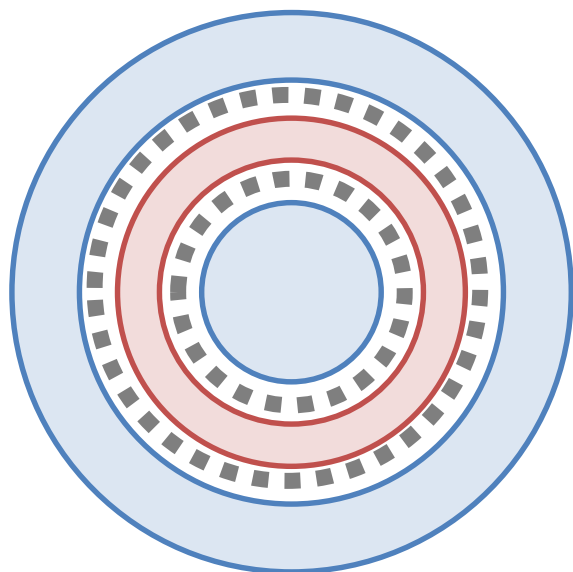
例: 2s軌道(断面)



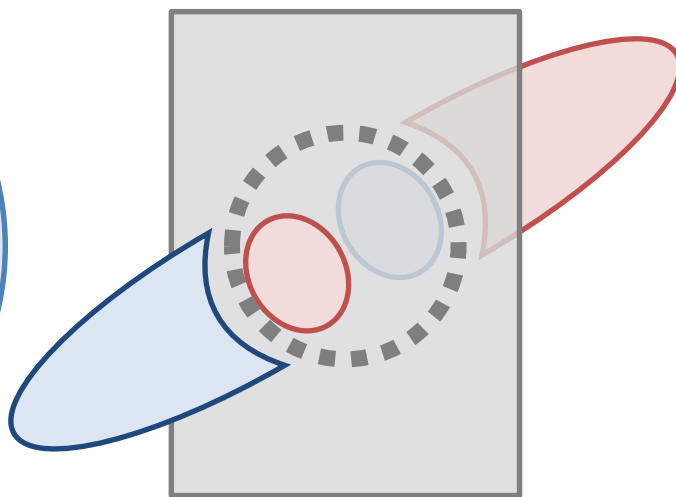
気づいた人もいるかも知れないが、
節面の数 = 主量子数 - 1

例: 1s軌道 → 0 2s, 2p軌道 → 1
3s, 3p, 3d軌道 → 2

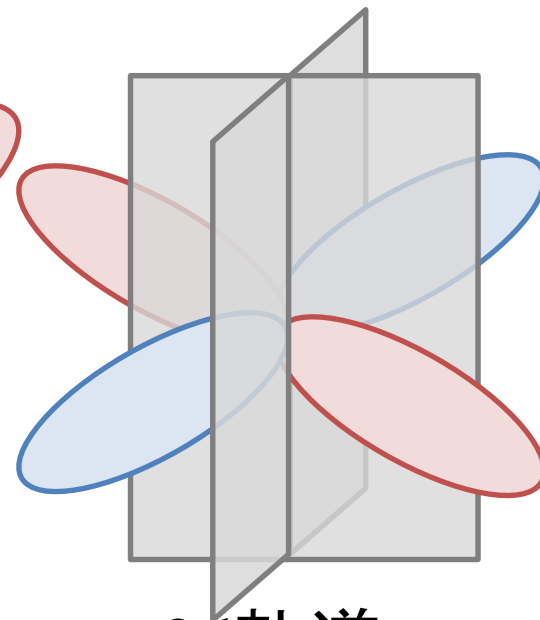
方位量子数が増える → 球面状の節面が減る
非球面の節面が増える



3s軌道(断面)



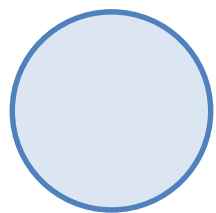
3p軌道



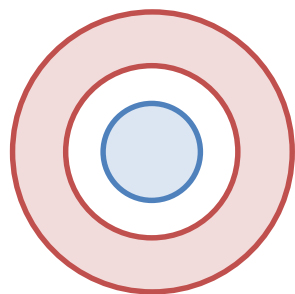
3d軌道

方位量子数(軌道の形. sとかpとかdとか)が同じで
主量子数が増えると,

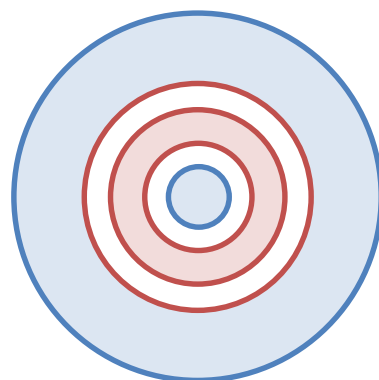
- ・軌道の全体的な形はそのまま, より大きくなる
- ・球状の節面が一つ増える



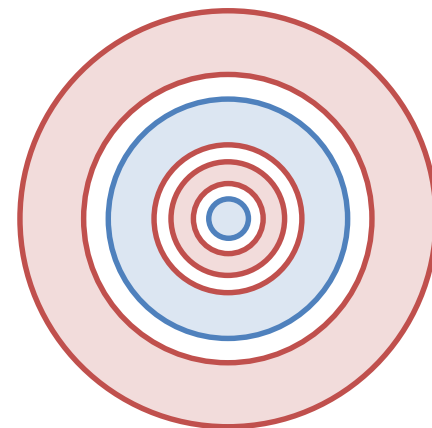
1s軌道



2s軌道



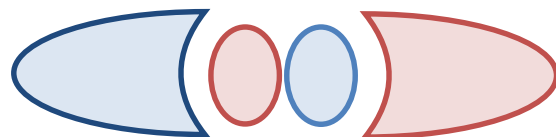
3s軌道



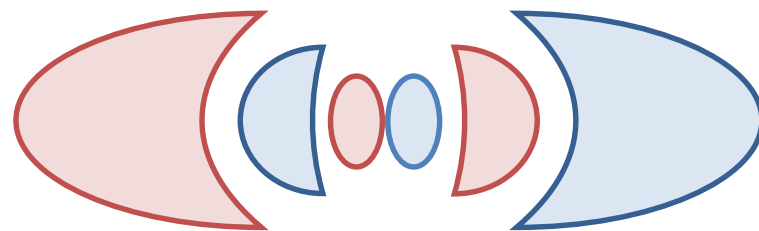
4s軌道



2p_x軌道



3p_x軌道



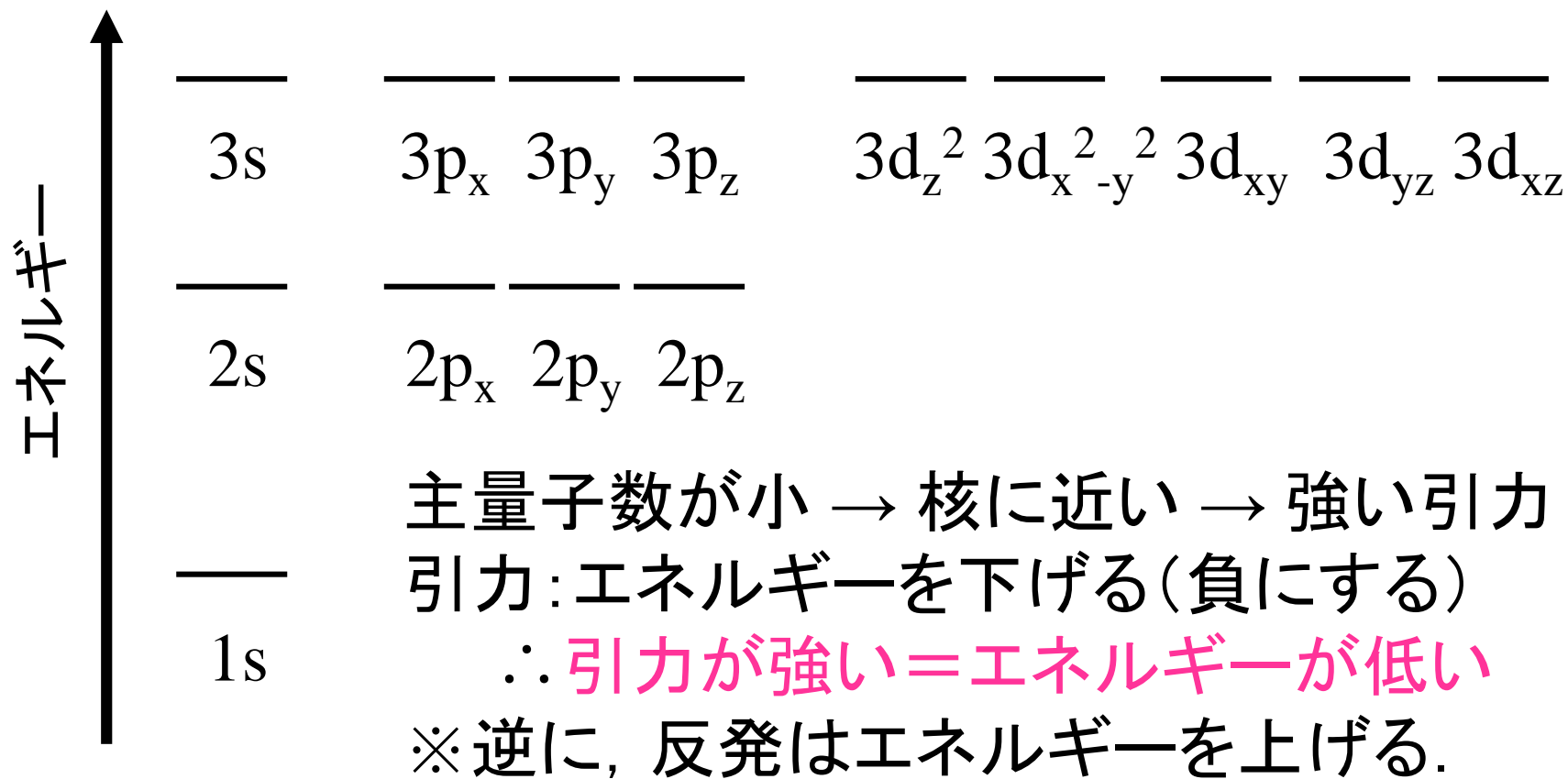
4p_x軌道

軌道のエネルギーと電子の入り方:

原子核 + 電子1個の範囲 (= 水素原子) では

エネルギーは主量子数だけで決まる.

(他の原子では変わってくる → 次回)

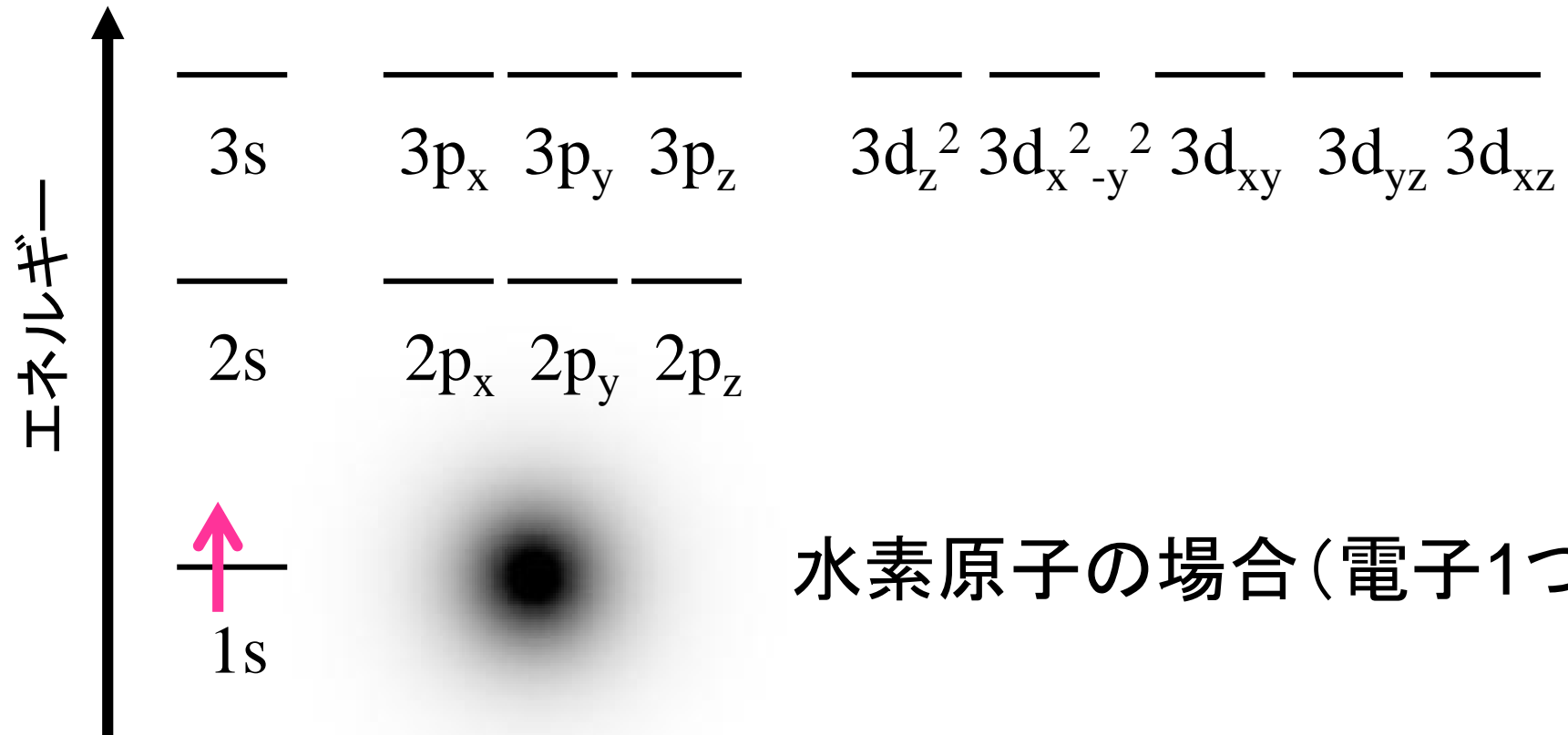


軌道のエネルギーと電子の入り方:

原子核 + 電子1個の範囲 (= 水素原子) では

エネルギーは主量子数だけで決まる.

(他の原子では変わってくる → 次回)



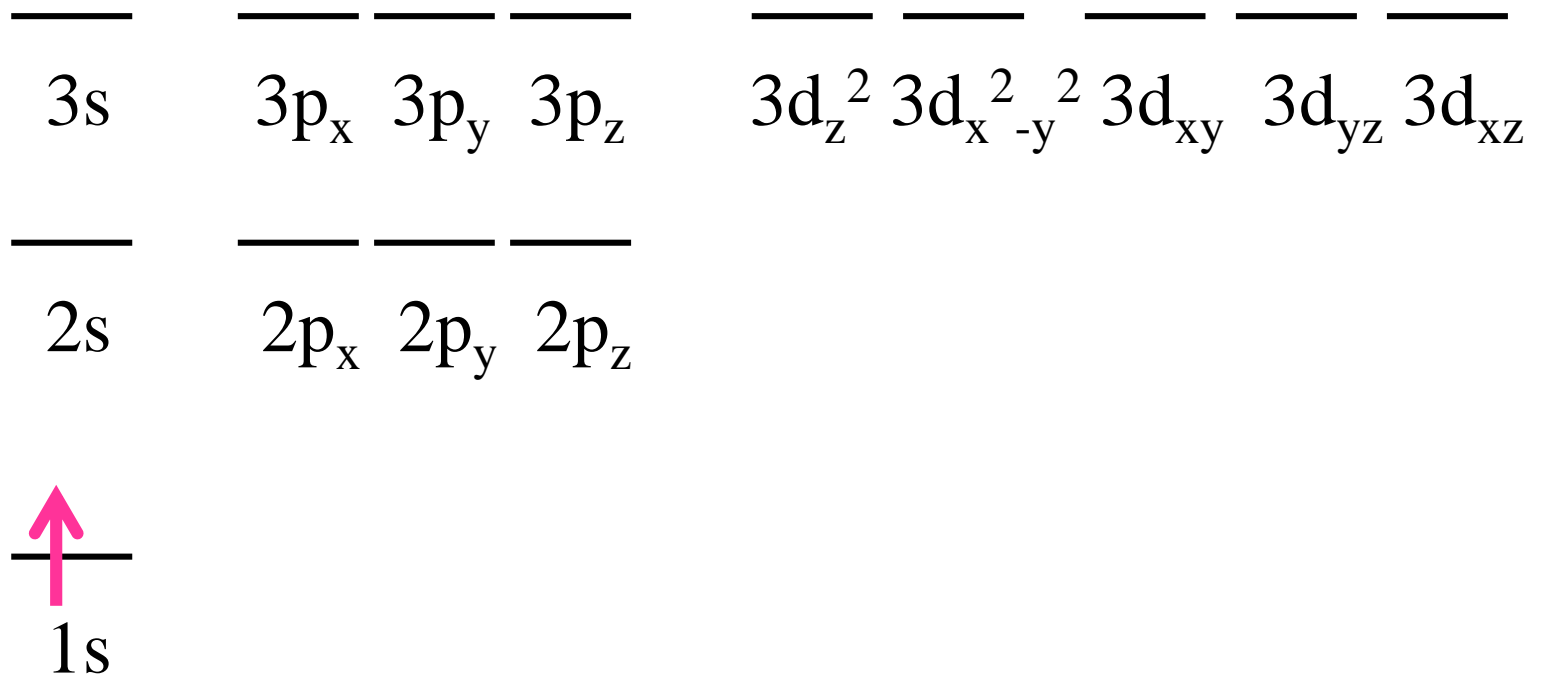
水素原子の場合 (電子1つ)

※普通は、エネルギーの低いところから埋まっていく.

また、この図のように

- ・上側にエネルギーの高い軌道
- ・下側にエネルギーの低い軌道

を書いて、軌道のエネルギーの上下関係をわかりやすく示したものを「準位図」と呼ぶ。



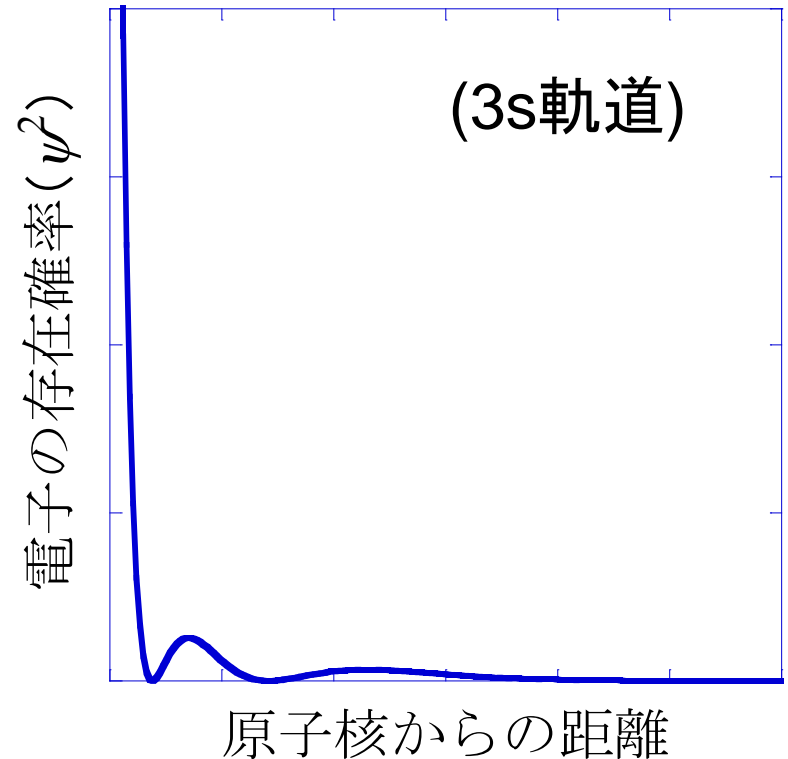
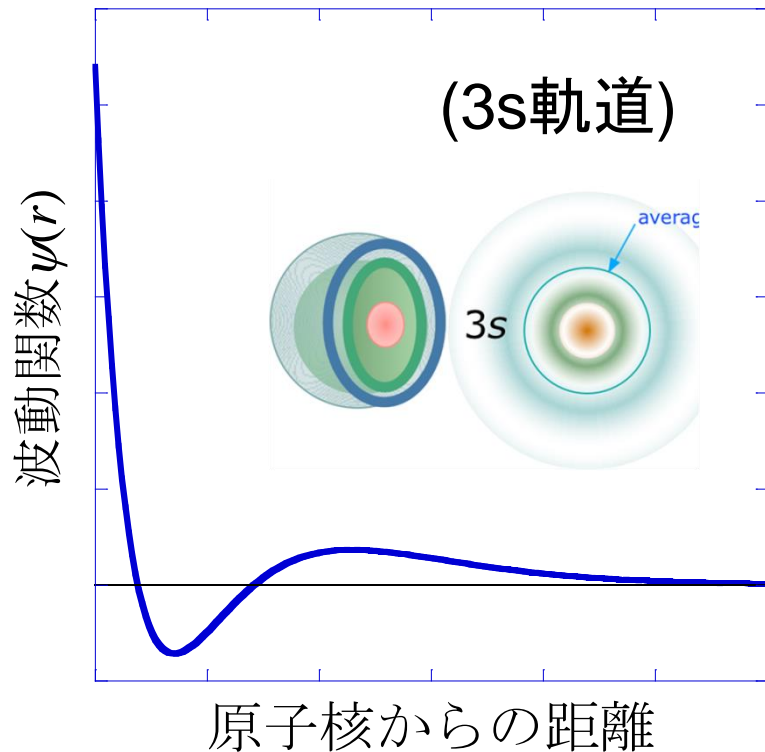
原子核からどのぐらいの距離に電子がいるのか？

「動径分布関数」

「電子が一番見つけやすい距離」はどこか？

3s軌道 (主量子数 $n = 3$, 方位量子数 $l = 0$)

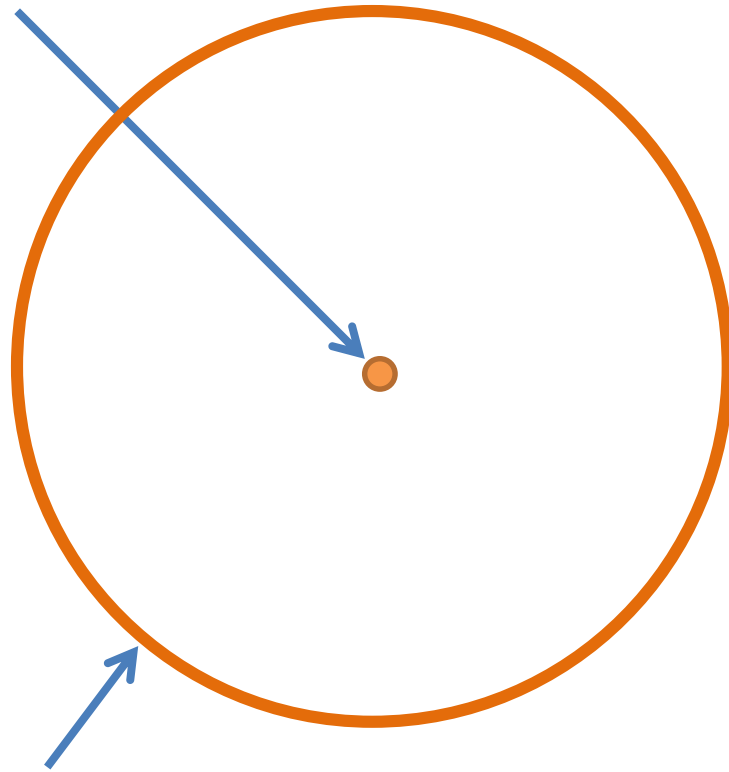
の波動関数と電子の存在確率



電子の存在確率は距離ゼロ, つまり原子核の上が最も大きい. つまり電子が一番見つかるのは原子核の部分？

「原子核から距離 r の点」というのは沢山ある。
全部足さないと、「距離 r に電子が居る確率」は出ない。

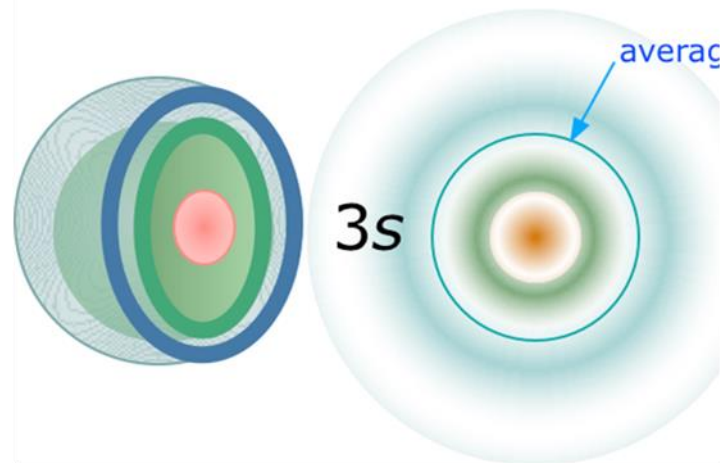
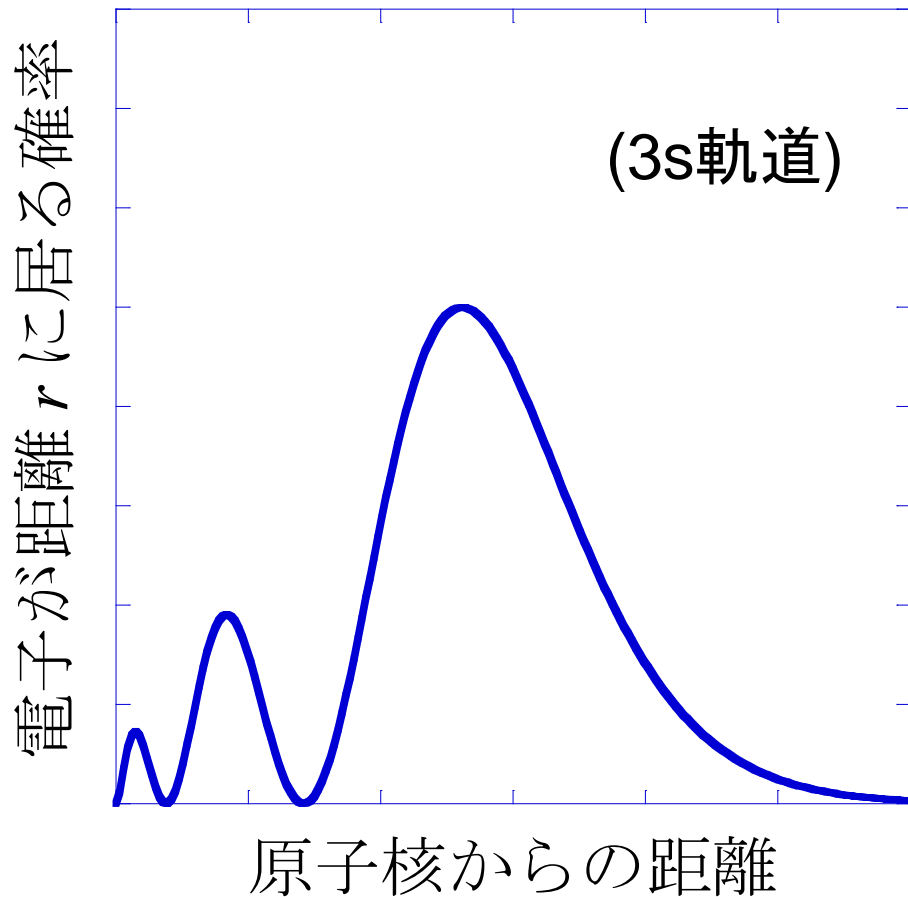
距離ゼロの位置: ψ^2 (=その「点」での存在確率)
は大きいですが、点は1つしか無い。



距離 r の点: ψ^2 はあまり大きくないが、
該当する位置は $4\pi r^2$ 個 (球面の面積分) 存在する。

「電子が距離 r に居る確率」

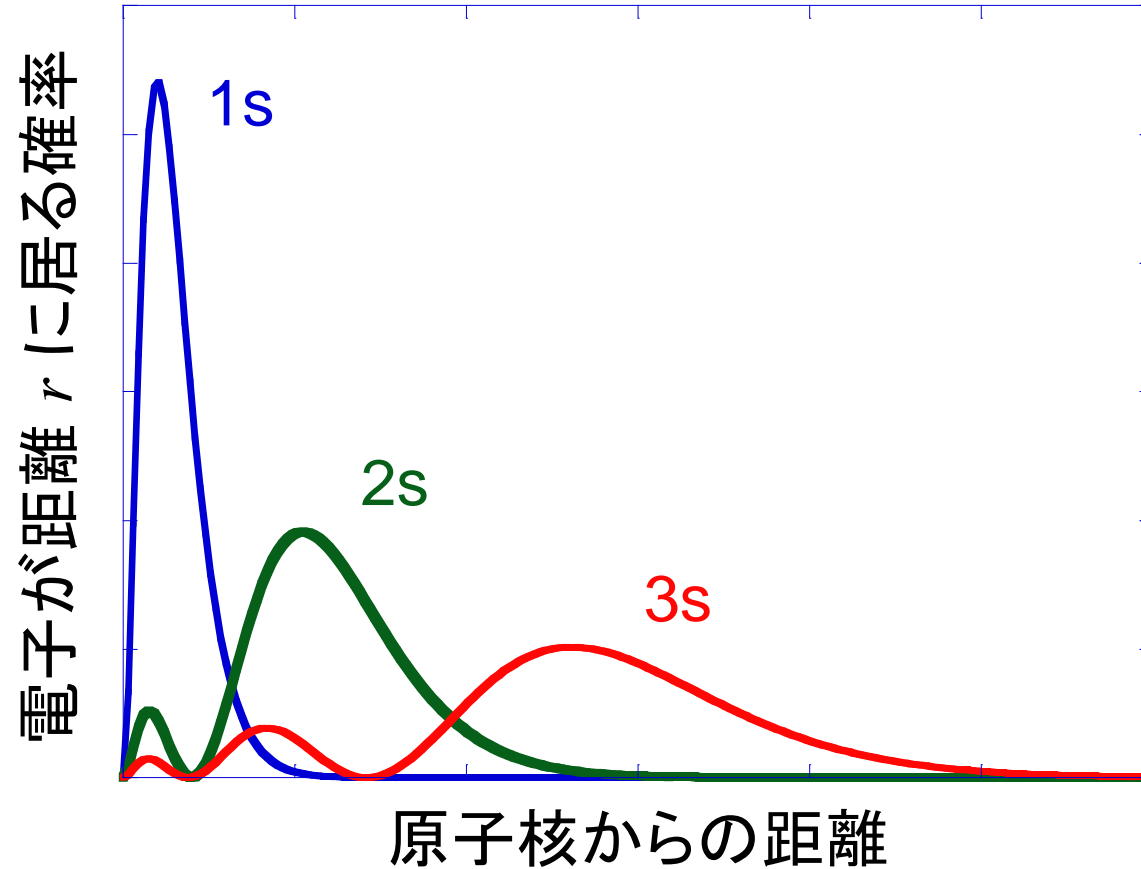
$$= \text{「距離 } r \text{ の1点に居る確率」} \times \text{「} 4\pi r^2 \text{」}$$



距離 r の確率を足し合わせたこれを、**動径分布関数**と言う

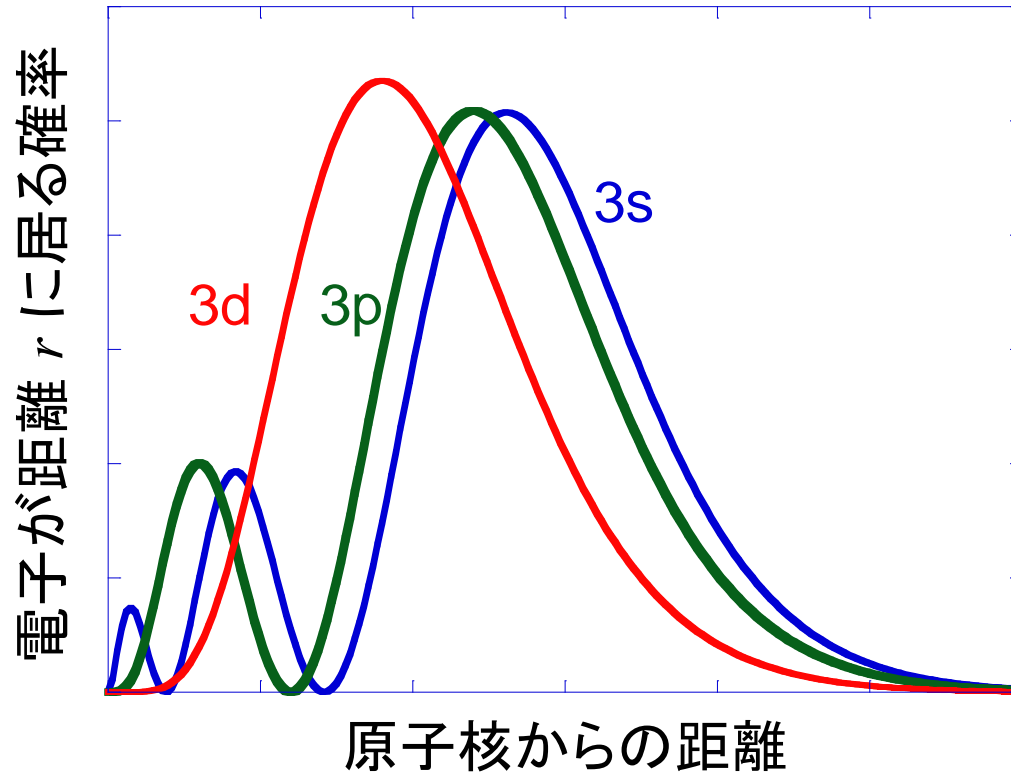
動径分布関数 = 電子が核からどのぐらいの距離にいるか

s軌道の動径分布関数



- ・主量子数が増えるごとに、山が一つ増える。
- ・主量子数が大きいほど、原子核から遠くに電子が居る。
- ・主量子数が大きくても、原子核の近くに少しは存在する。

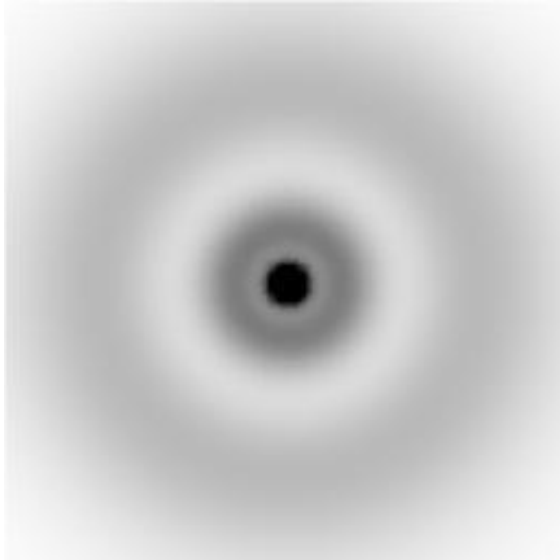
主量子数3の軌道の動径分布関数



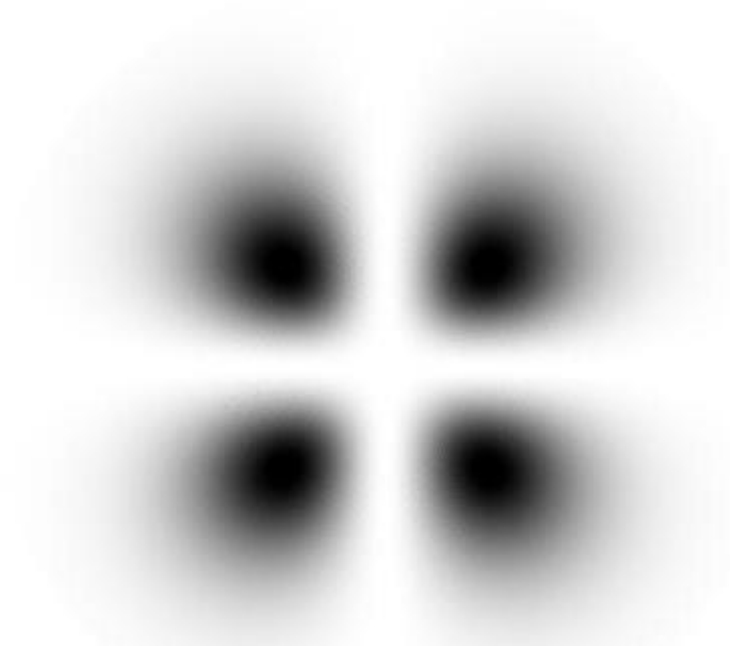
- (図ではわかりにくいですが)核からの平均距離は全部同じ.
(3s軌道のほうが近いわけではない)
- s軌道は原子核の近くに少し, 遠くに沢山.
- p, d軌道に行くほど, 原子核のそばには存在しない.

断面図で書くと, こんな感じ.

3s軌道



3d軌道



繰り返しになるが, s軌道は原子核の近くにも(少しだけ)電子の存在確率がある.

これが, 水素以外の原子では効いてくる(次回に解説).

とりあえず、今日はこれだけは覚えておこう

原子の構造と表記法

電子, 原子核(陽子 + 中性子)

左上: 質量数(陽子+中性子), 右上: 電荷

左下: 原子番号(陽子数)

原子軌道

原子中の電子は特定の「軌道」でのみ安定

電子の「軌道」は3つの量子数で表せる

主量子数(大きいほど核から遠く,

高エネルギーで節面の数も多い)

方位量子数(形. s, p, d..... etc.)

磁気量子数(向き)

例えば: 1s軌道, 4d軌道, 5p軌道などと記す