

無機化学1 第1回(復習1)
水素原子の電子構造

本日のポイント

原子軌道(原子中で電子がとれる状態)

量子数

原子軌道を特徴付ける3種類の整数

主量子数, 方位量子数, 磁気量子数

これらで原子軌道のエネルギー, 位置, 形, 向きが決まる.

主量子数が増える

→ 原子核から遠い, 引力減るのでエネルギー高い

方位量子数の違い

→ 軌道の形の違い: s, p, d軌道

s軌道は原子核の近くにも電子が分布し, 遮蔽を受けにくい

原子軌道

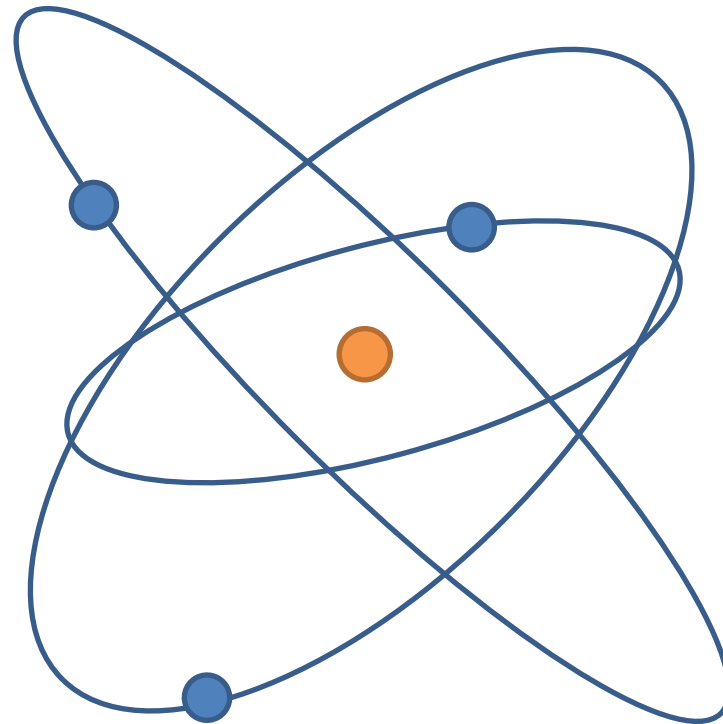
原子中の電子は、好きな状態になれるわけではない。
『特定のいくつかの状態』のうちの一つ(※), をとる.

※通常はエネルギーの低い状態

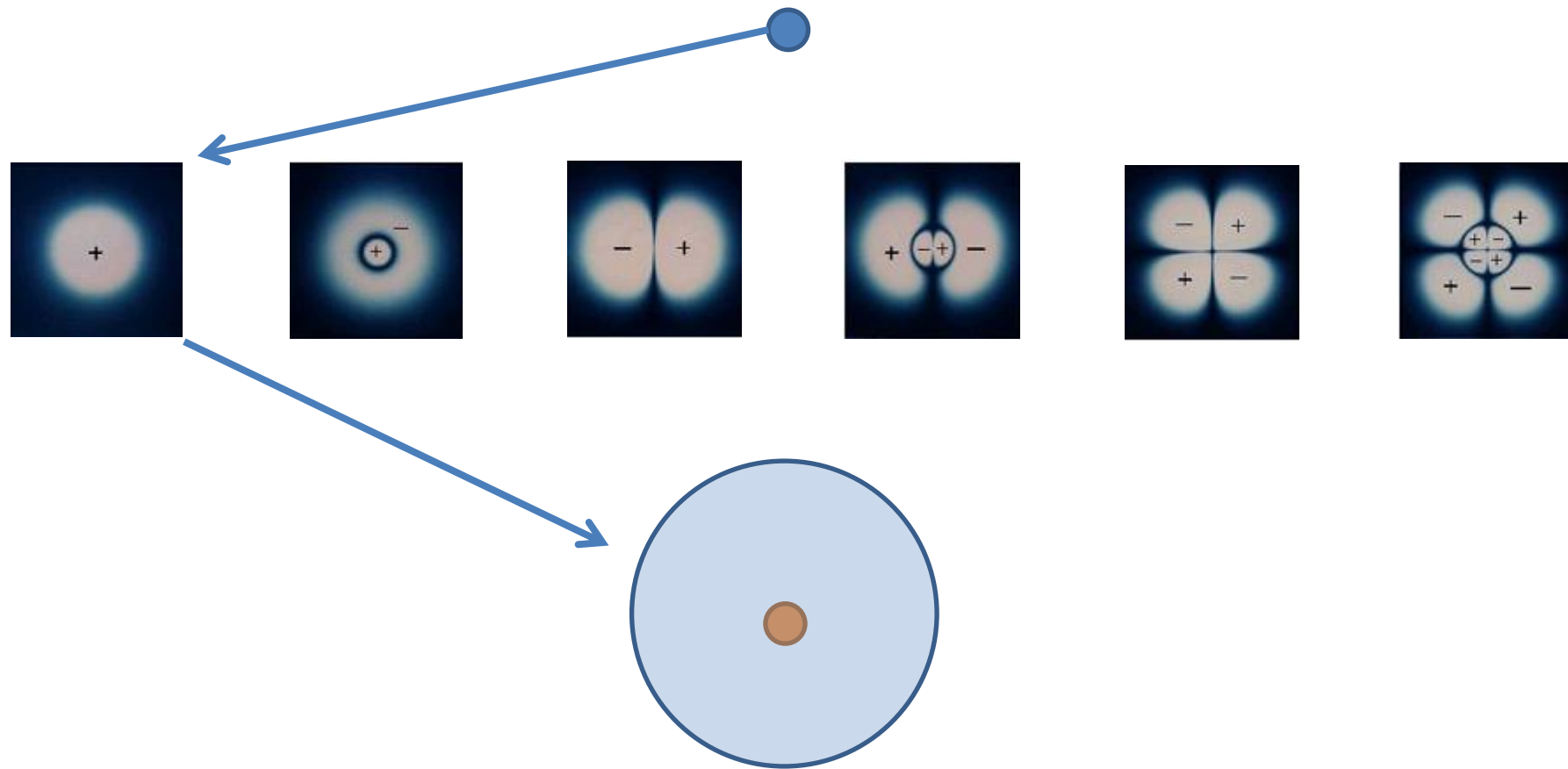
『特定のいくつかの状態』 → 原子軌道

細かいことを言うと、「シュレディンガー方程式」という問題を解くと、その答えとして出てくる関数が電子の状態を表す式(波動関数)になっている。

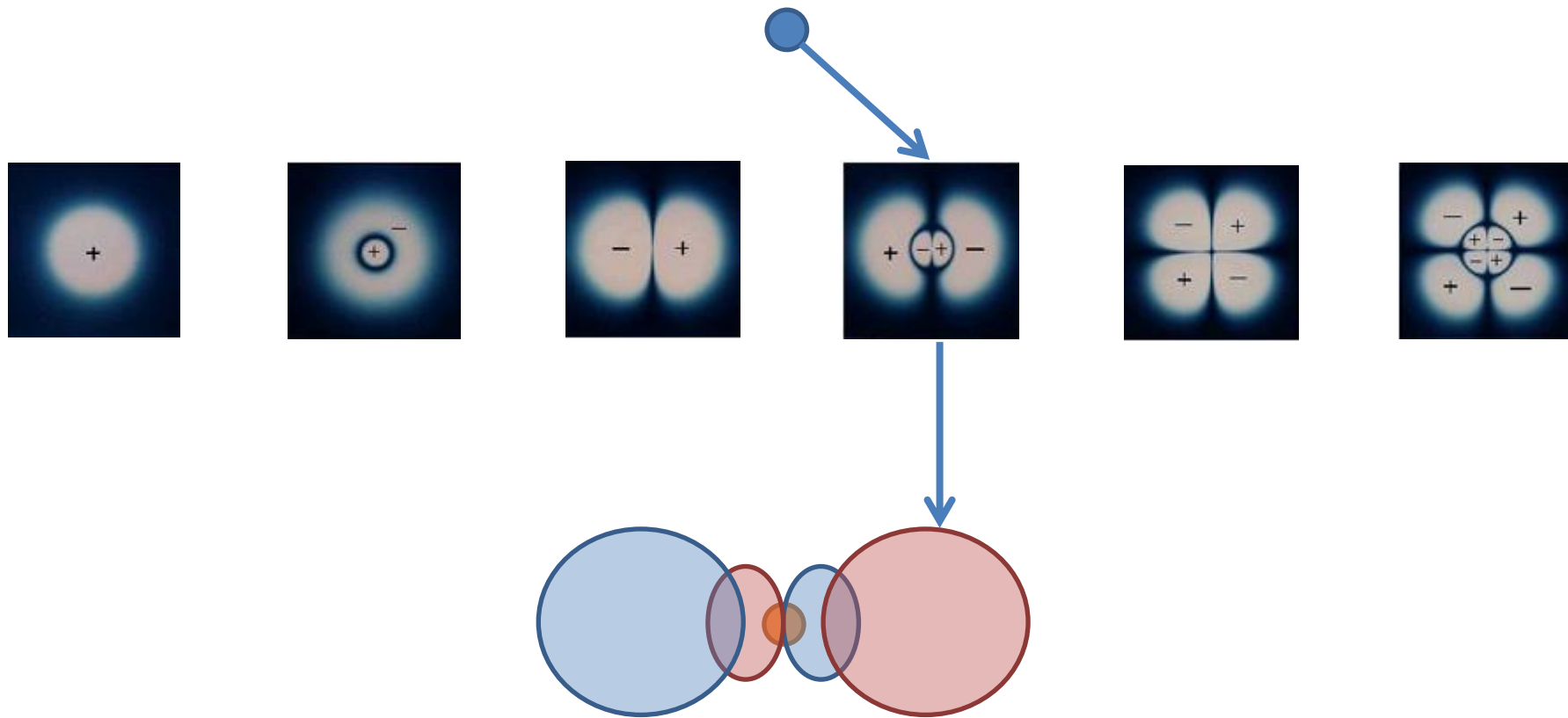
古典力学: 電子は好きな軌道で運動して良い
(粒子は好きな場所を移動できる)



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



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



『原子軌道』は3つの整数で特徴付けられる

→ 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, エネルギーに関係.

主量子数が大きい = 核から遠く, エネルギーは高い

方位量子数: 軌道の形を決める. 電子の回転に対応.

方位量子数 0 (s軌道) → 丸い (等方的)

方位量子数 1 (p軌道) → 2方向に直線状に延びる

方位量子数 2 (d軌道) → 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 (p_x , p_y , p_z の違い等)

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 から電子が埋まる。

方位量子数 l : 0 から $n-1$ までの整数。

$n = 1$ なら $l = 0$ (s軌道) だけ

$n = 2$ なら $l = 0$ (s軌道) または $l = 1$ (p軌道)

$n = 3$ なら $l = 0$ (s軌道) または $l = 1$ (p軌道)

または $l = 2$ (d軌道) をとることが可能。

磁気量子数 m : $-l$ から $+l$ まで。例えば

$l = 1$ (p軌道) なら $m = -1, 0, 1$ の3通り、

$l = 2$ (d軌道) なら $m = -2, -1, 0, 1, 2$ の5通りが可能。

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2: 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

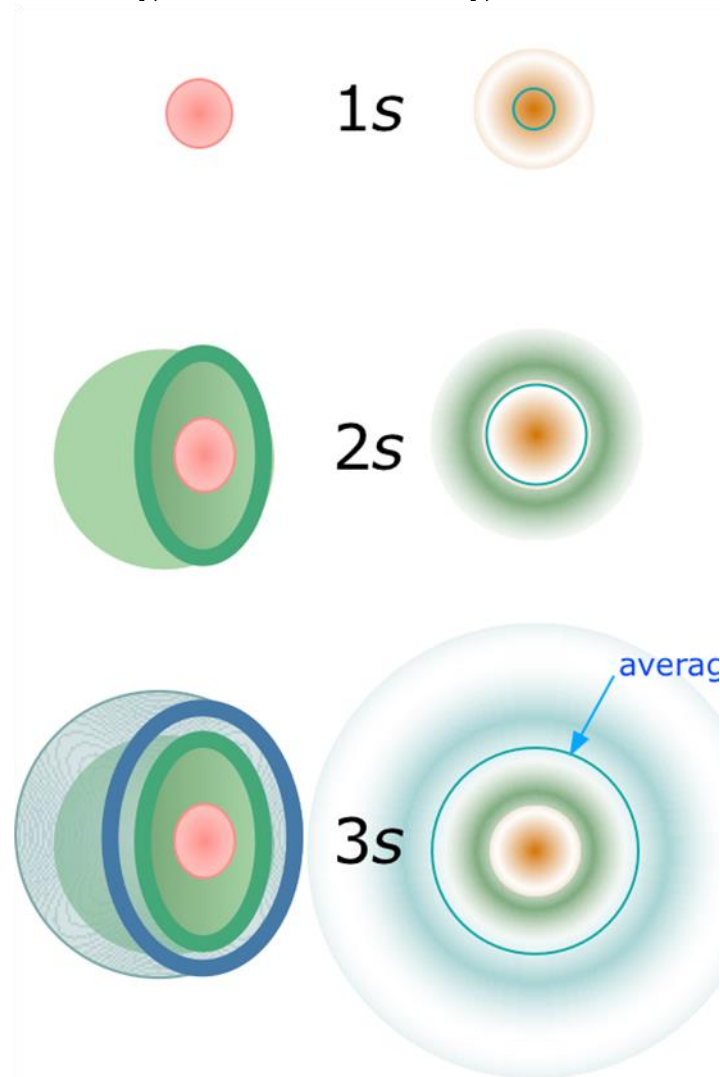
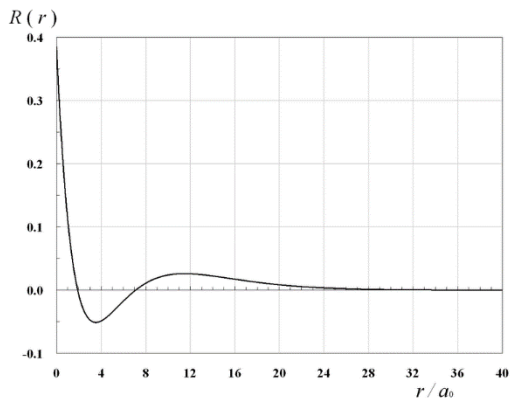
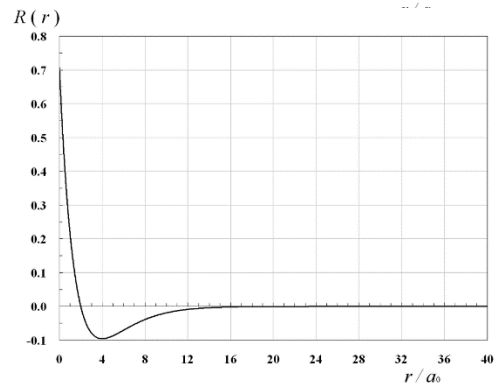
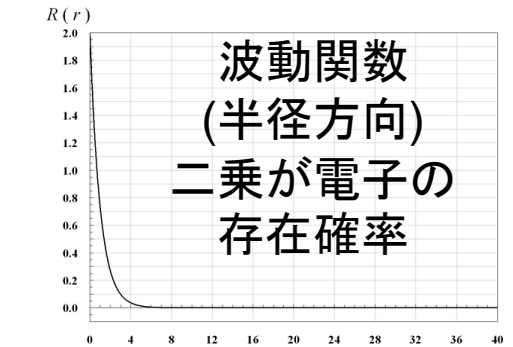
方位量子数が0, 1, 2, 3の軌道を, それぞれs, p, d, f 軌道と呼ぶ

主量子数と、存在する軌道の一覧

主量子数	方位量子数	軌道の名前
1	0	1s
2	0	2s
	1	2p ₁ , 2p ₀ , 2p ₋₁
3	0	3s
	1	3p ₁ , 3p ₀ , 3p ₋₁ ,
	2	3d ₂ , 3d ₁ , 3d ₀ , 3d ₋₁ , 3d ₋₂
4	0	4s
	1	4p ₁ , 4p ₀ , 4p ₋₁
	2	4d ₂ , 4d ₁ , 4d ₀ , 4d ₋₁ , 4d ₋₂
	3	4f ₃ , 4f ₂ , 4f ₁ , 4f ₀ , 4f ₋₁ , 4f ₋₂ , 4f ₋₃

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



<http://www.chem1.com/acad/webtext/atoms/atpt-4.html>

電子の状態を表すもの = 『波動関数』

値が正になったり負になったりと、位置ごとに値が振動する関数

→ 振動 = 波としての性質を持つ

波動関数は空間に広がって存在

→ 1個の電子がもやっと広がって存在している, とも見れる.

(この辺の解釈は複雑. 通常は「確率が広がっている」とする).

波動関数の値がプラスとかマイナスとかは何?

何が正になったり負になったり振動してるの?

→ 正体は不明. 「そういうものだ」と思うしかない.

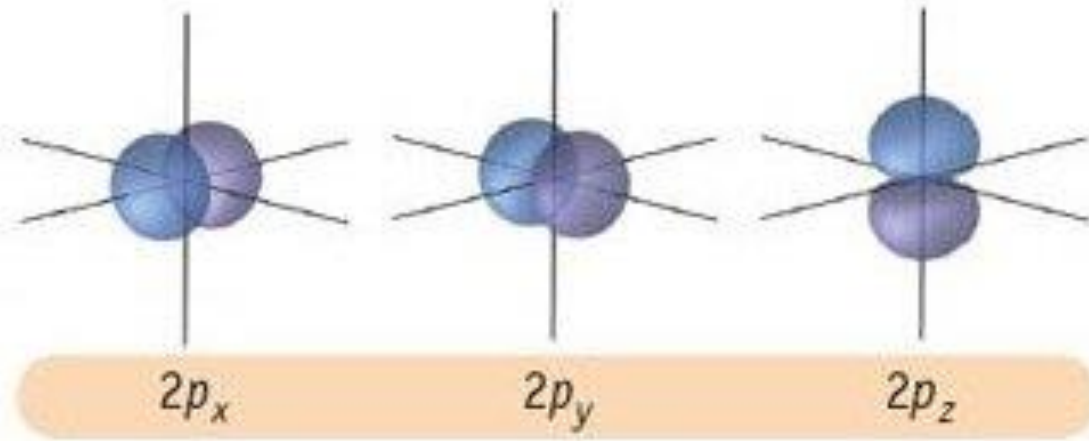
「位相」は別の軌道との間の重なりを考える時だけ重要.

(位相そのものの値を直接測る手段は, 現在の理論が正しいのであれば, 存在しない)

具体例：p軌道 ($l = 1$, 2方向に伸びる)

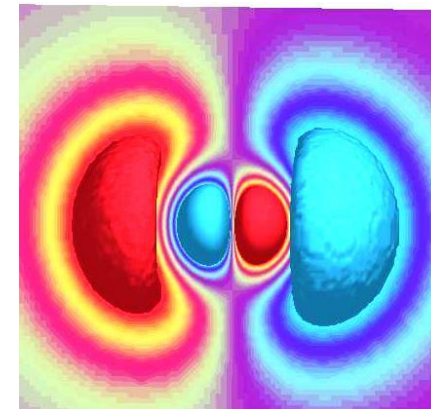
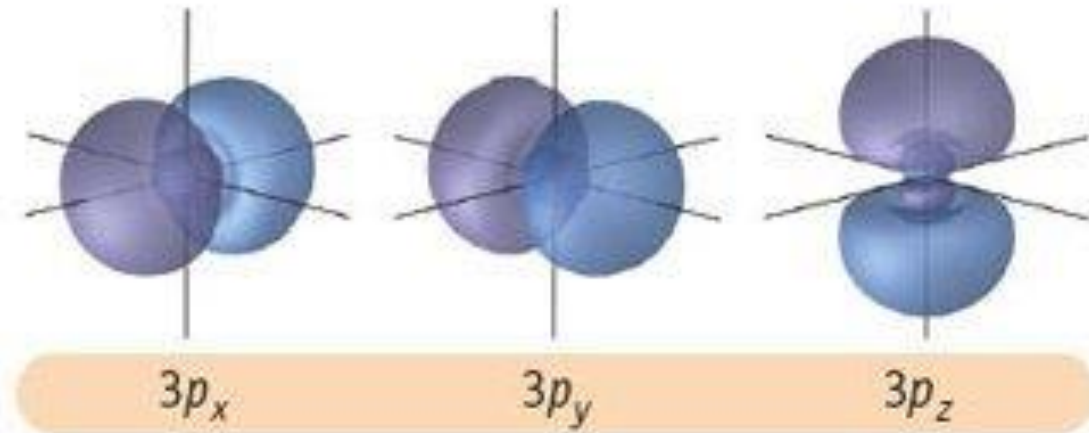
なおこういった軌道の形(曲面)は, その内側で電子を見つける確率が75%だとか90%だとかになるように描かれている.

(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)

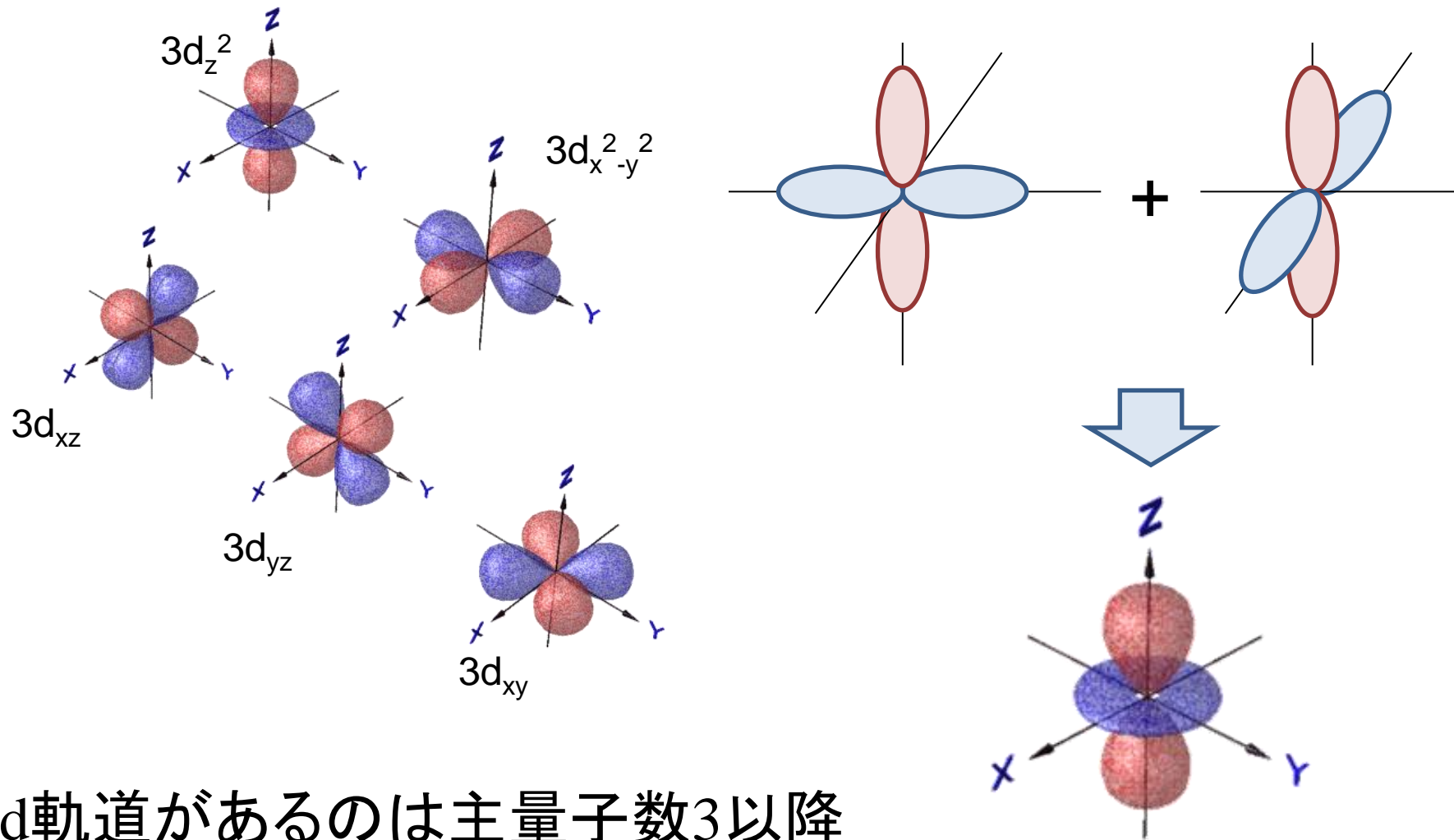
← 磁気量子数の違い



(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)

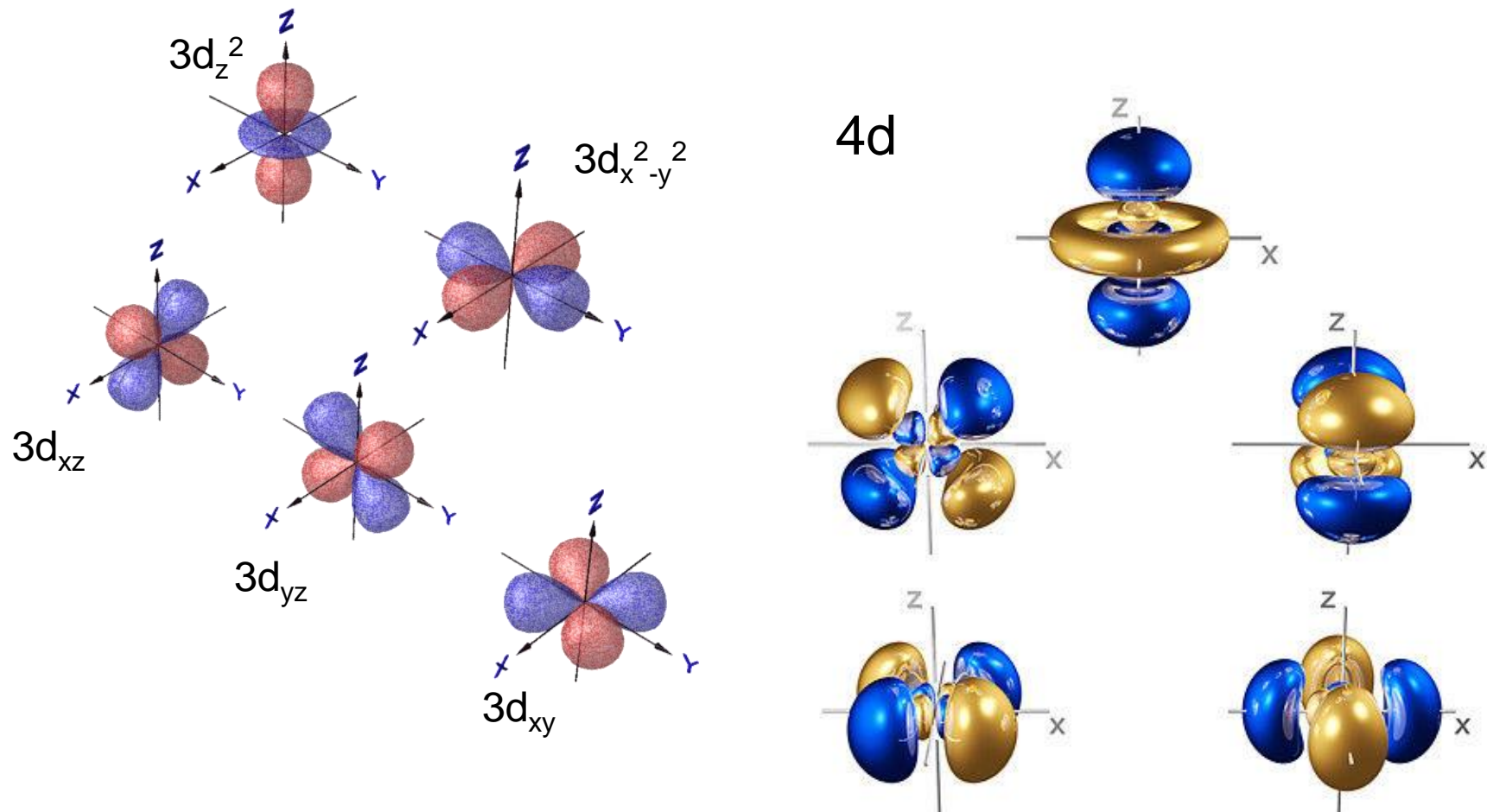


d軌道があるのは主量子数3以降

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

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

具体例：d軌道 ($l = 2$, 4方向に伸びる)



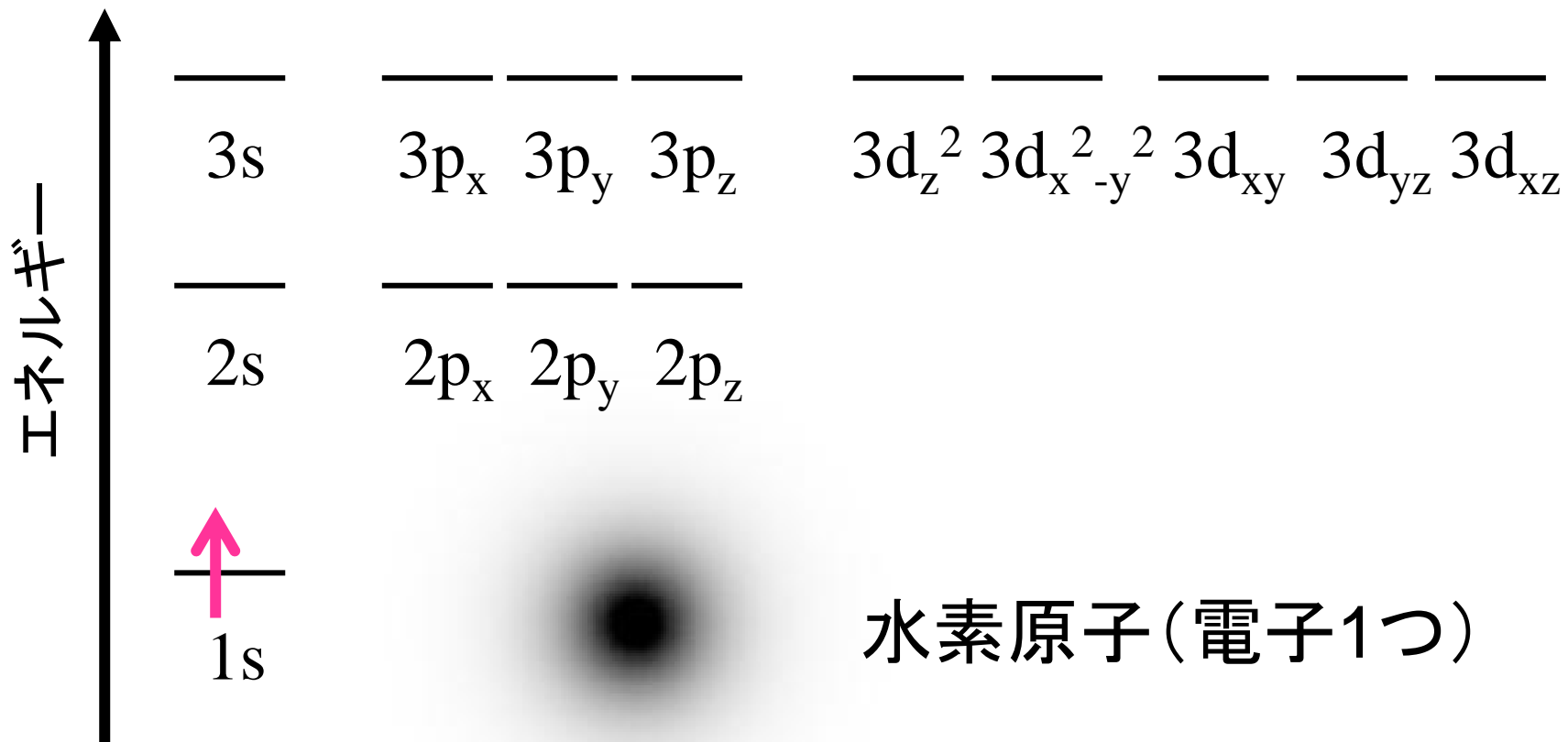
d軌道があるのは主量子数3以降

SCIENCEPHOTOLIBRARY

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

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

原子核 + 電子1個の範囲 (= 水素原子) では
主量子数が同じなら、エネルギーも同じ

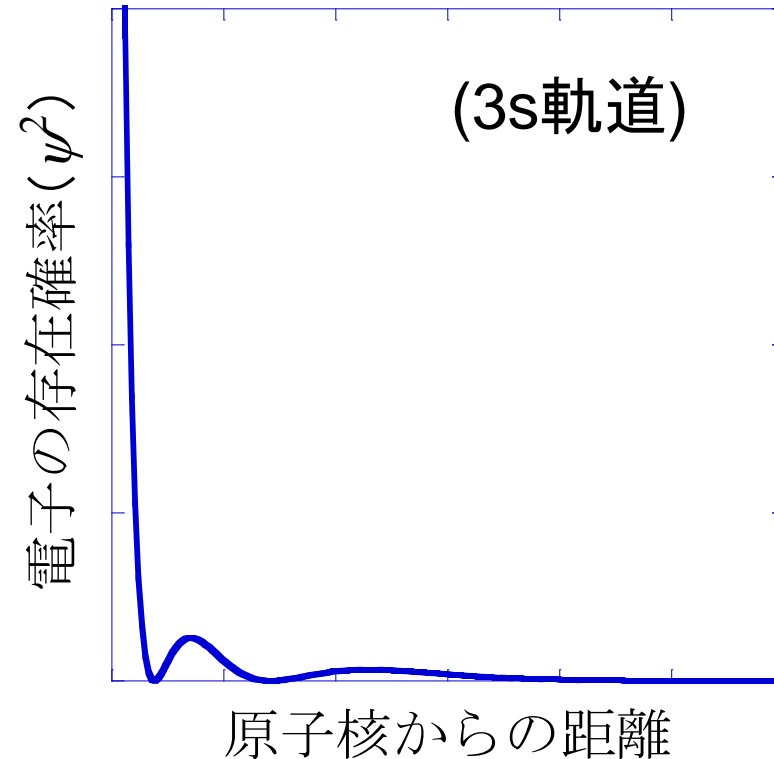
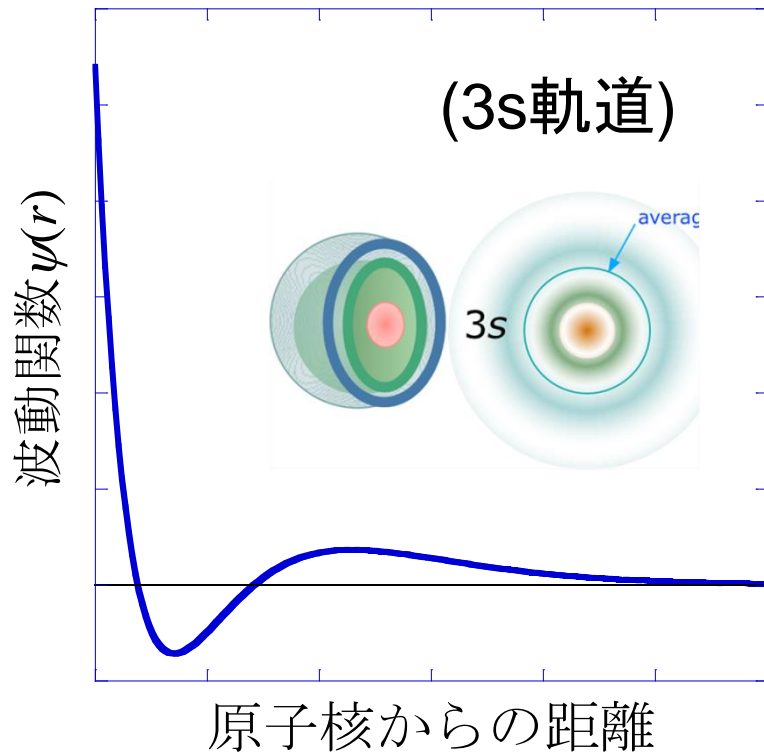


原子核からどのぐらいの距離に電子がいるのか？

「動径分布関数」

「電子が一番見つけやすい距離」はどこか？

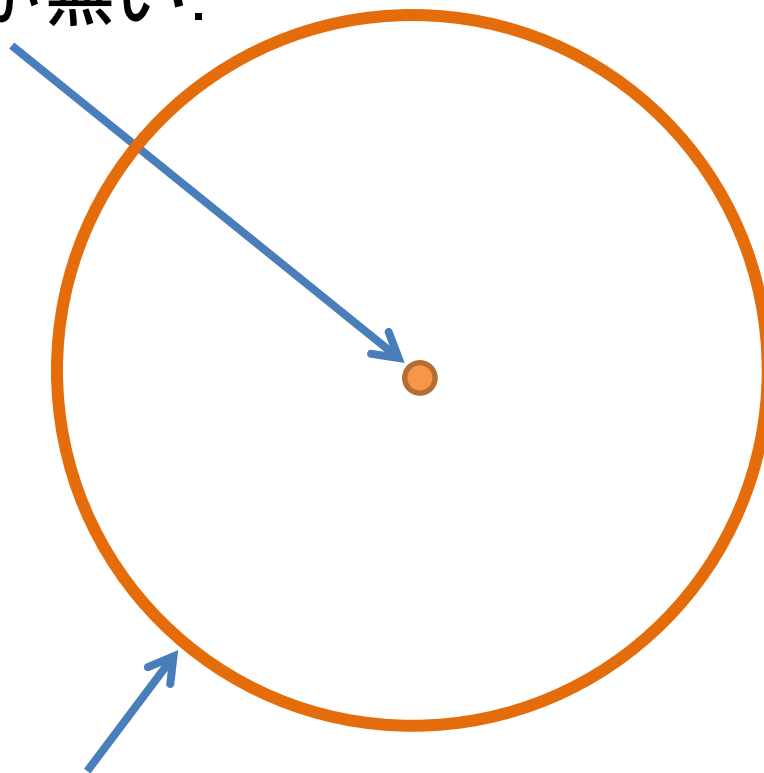
3s軌道 (主量子数 $n = 3$, 方位量子数 $l = 0$)
の波動関数と電子の存在確率



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距離ゼロの点？

「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。

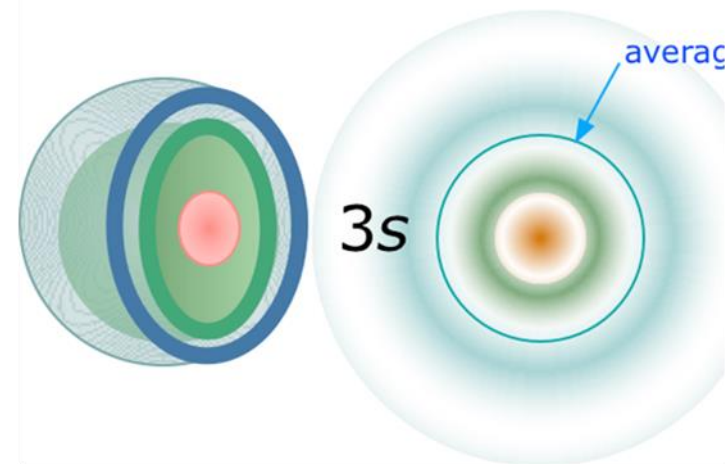
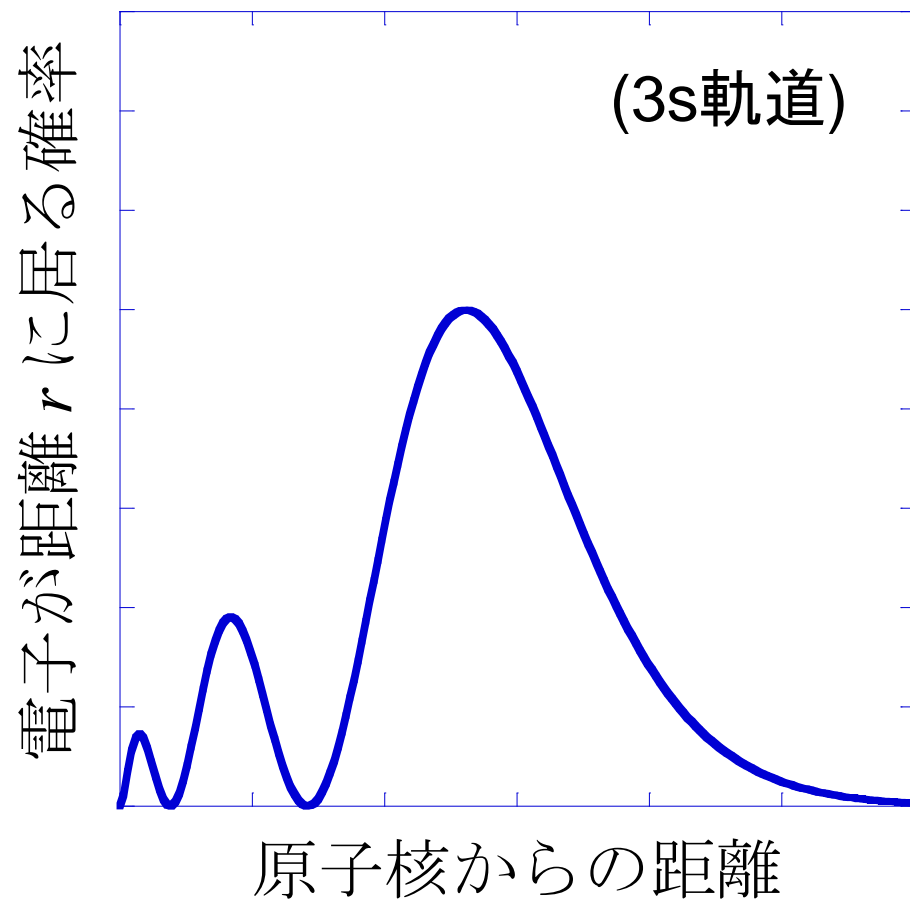
距離ゼロの位置： ψ^2 は大きい
が、
点は1つしか無い。



距離 r の点： ψ^2 はあまり大きくないが、
該当する位置は πr^2 個（円周1週分）存在する。

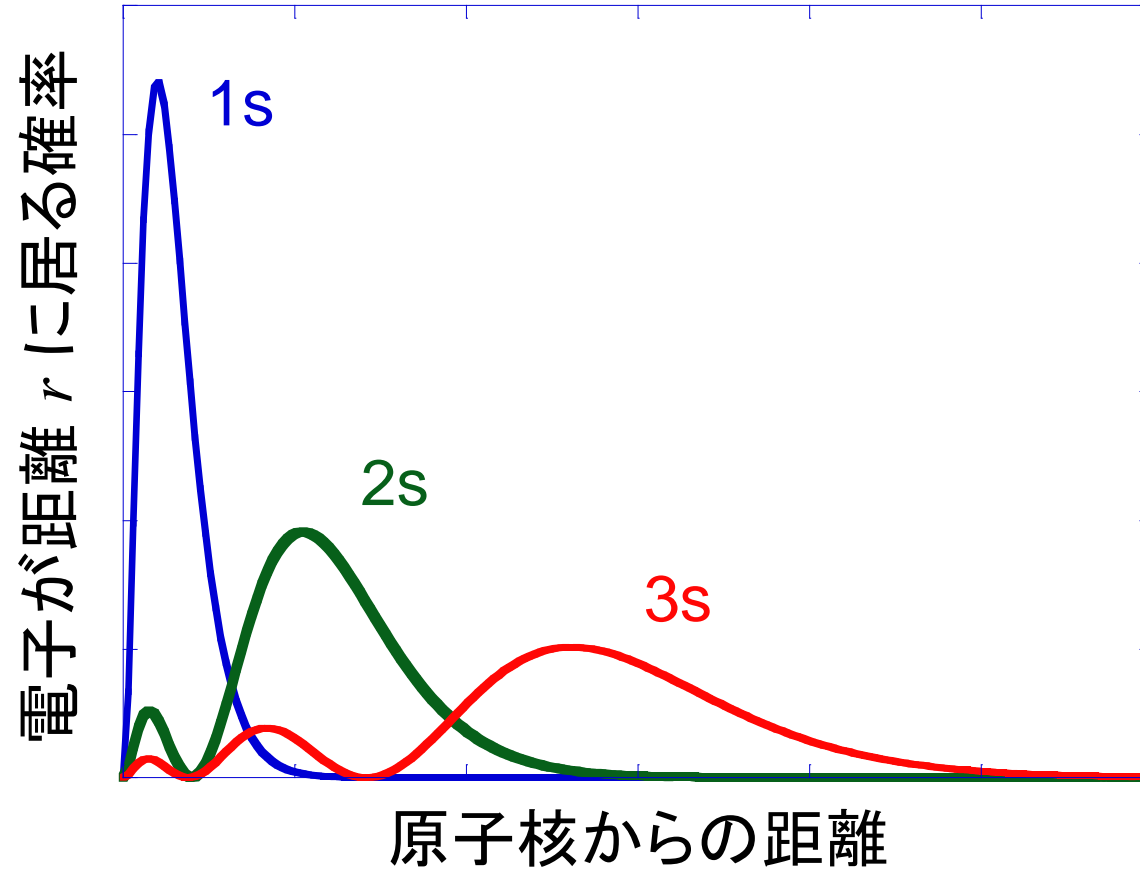
「電子が距離 r に居る確率」

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



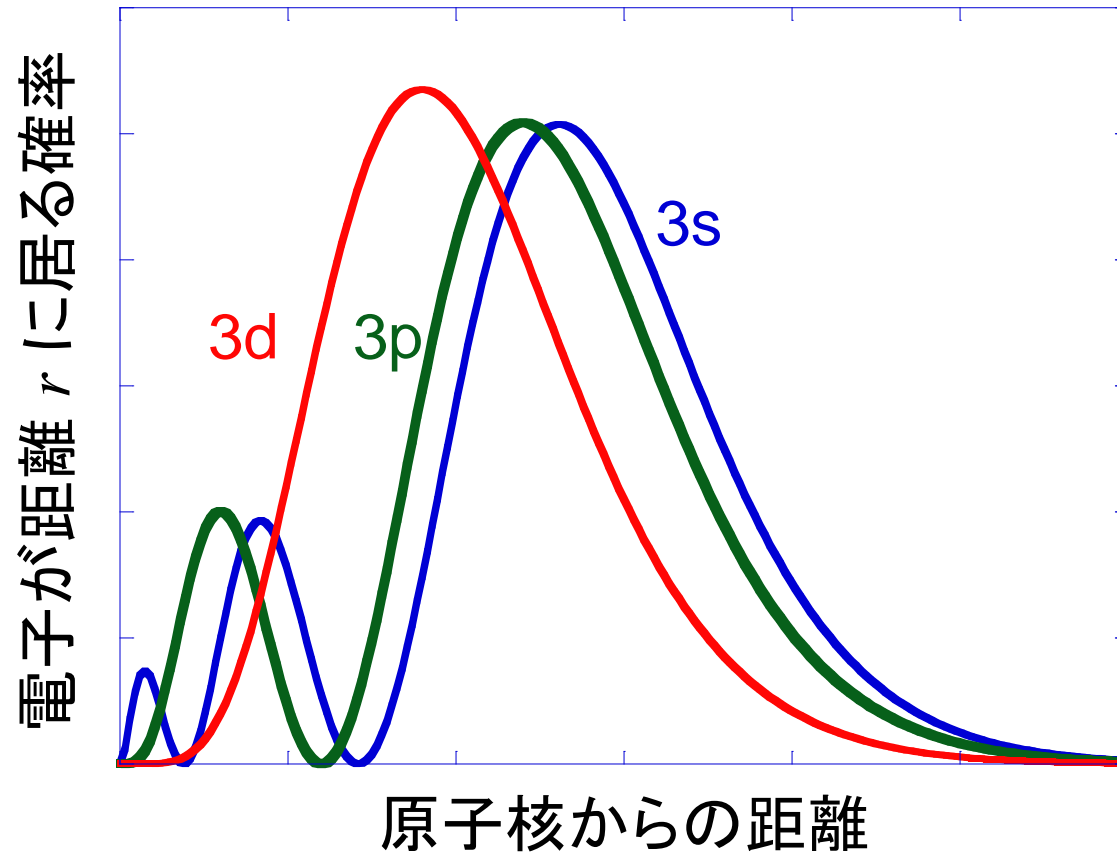
距離 r の確率を足し合わせたこれを、**動径分布関数**と言う

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.

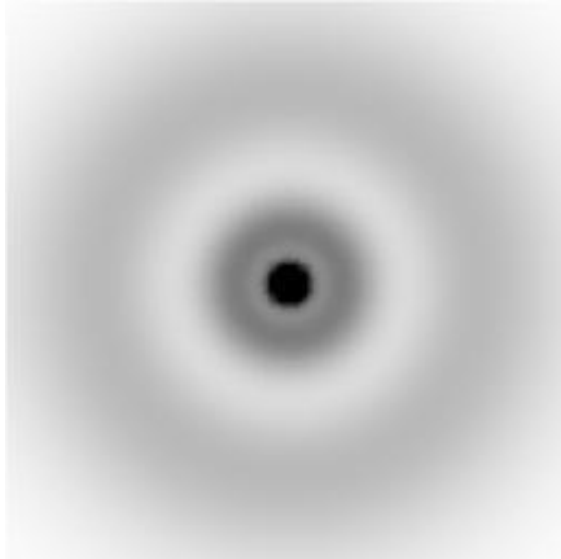
主量子数3の軌道の動径分布関数



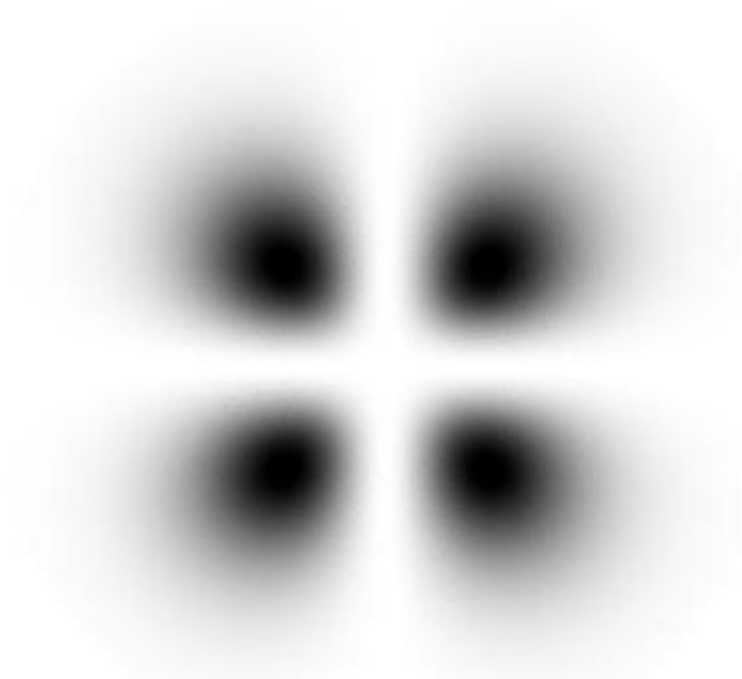
- (図ではわかりにくいですが)核からの平均距離は全部同じ.
- s軌道は原子核の近くに少し, 遠くに沢山.
- p, d軌道に行くほど, 原子核のそばには存在しない.

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).

本日のポイント

原子軌道(原子中で電子がとれる状態)

量子数

原子軌道を特徴付ける3種類の整数

主量子数, 方位量子数, 磁気量子数

これらで原子軌道のエネルギー, 位置, 形, 向きが決まる.

主量子数が増える

→ 原子核から遠い, 引力減るのでエネルギー高い

方位量子数の違い

→ 軌道の形の違い: s, p, d軌道

s軌道は原子核の近くにも電子が分布し, 遮蔽を受けにくい