

無機化学 第二回

1. 4つの量子数 (プリント穴埋め)
2. 原子の電子配置と構成原理の例外
3. 遮蔽, 有効核電荷
4. スレーターの規則
電子は, 存在する場所によって中心正電荷
(陽子) から受ける力が異なる
→ 有効核電荷 → 計算 (第一回レポート)
5. 混成軌道
メタンが正四面体であるのは? → sp^3 混成軌道
アンモニアの分子形は? → sp^3 混成軌道

1. 4つの量子数 (プリント穴埋め)

Keyword:

主量子数

方位量子数

磁気量子数

スピン量子数

1. 原子軌道 (atomic orbital)

電子の分布の形状は電子の波動性のため、**不連続**となる（決まった波長の波以外は波の干渉のため存在できない）。

これを**量子化** (quantization) という。

1. 原子軌道 (atomic orbital)

この**量子化**された電子状態と対応するエネルギーは
シュレディンガー (Schrödinger) 方程式を解くことで求めることができる。

量子化された電子状態とエネルギーを決める指数を**量子数** (quantum number) という。

1. 原子軌道 (atomic orbital)

原子に関する量子数は、**主量子数**
(principal quantum number: n) , **方位**
量子数 (azimuthal quantum number:
 l) , **磁気量子数** (magnetic quantum
number: m_l) がある。

電子状態の決まり方の順は、
主量子数→方位量子数→磁気量子数
である。

電子状態は n, ℓ, m_ℓ の
いずれかが異なると、異なる状態
である。

n, l, ml で定まる電子のエネルギーと電子状態を表す数学的関数を
原子軌道 (atomic orbital)

といい、原子軌道に対応するエネルギー値をその軌道の

エネルギー準位 (energy level) という。




1つの原子軌道に

スピン量子数 (spin quantum number)

を異にして

2個の電子が入ることができる。



通常、電子は

もっともエネルギーが低くなるように

入る。電子の入り方を

電子配置 (electronic configuration)

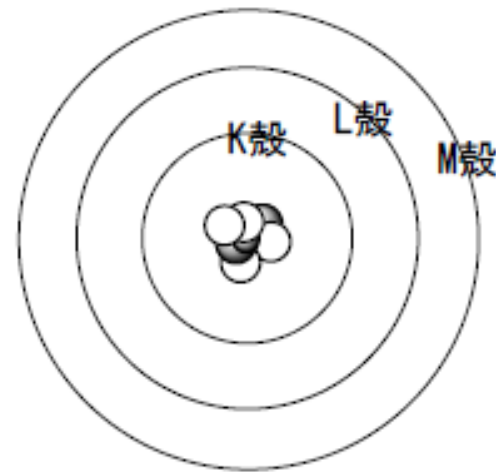
といい、もっとも低いエネルギーの電

子配置の状態を電子の

基底状態という。

2. 主量子数 (principal quantum number: n)

n は原子軌道の基本となる量子数であり、 n の値は、原子軌道によって決まる電子分布の**原子核からの大まかな距離を表す指標**である。



2. 主量子数 (principal quantum number: n)

n は, $n=1, 2, 3, \dots$ の自然数を取り,

それぞれ

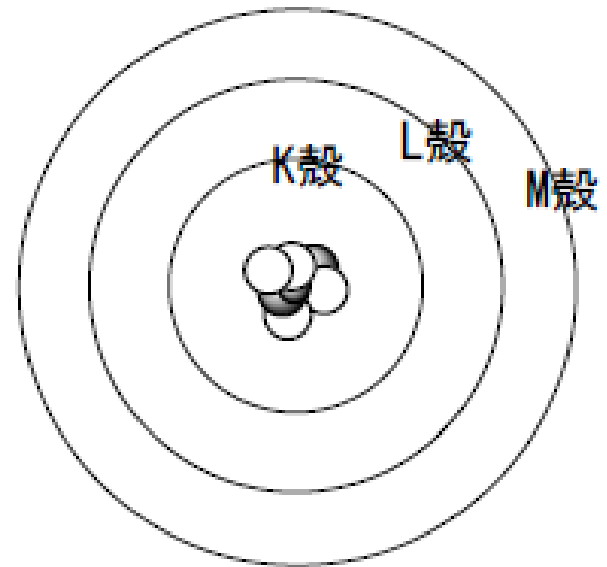
れ**K殻**, **L殻**, **M殻**, \dots という名称が

付けられている (右図)

これを

電子殻 (electronic

shell) という.



2. 主量子数 (principal quantum number: n)

電子殻は、主量子数(n)とそれに付随する方位量子数(ℓ), 磁気量子数($m\ell$)を合わせたものをいう。

各殻によって収容できる電子数が異なり主量子数 n に対し、 $2n^2$ 個が最大収容電子数である。

2. 主量子数 (principal quantum number: n)

**K殻には2個, L殻には8個, M殻には
18個の電子を収容できる.**

問題1. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

1. 原子の電子状態とエネルギーを決める指数を [**量子数**] という.

2. 原子の [**量子数**] は, [**主量子数**] (n), [**方位量子数**] (l), [**磁気量子数**] (m_l) がある.

問題1. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

3. n , l , m_l で定まる電子のエネルギー状態と分布形状は数学的関数として表すことができ、これを [原子軌道] という.

4. 1つの [原子軌道] に [スピン] の向きが異なる2個の電子が入ることができる.

問題1. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

5. n は原子核からの大まかな距離を表す指標で, $n=1, 2, 3, \dots$ の自然数を取り, それぞれ [K] 殻, [L] 殻, [M] 殻, \dots の名称が付けられている.

6. 各殻によって収容できる電子数が異なり n に対し最大収容電子数は $[2n^2]$ である.

3. 方位量子数 (azimuthal quantum number: l)

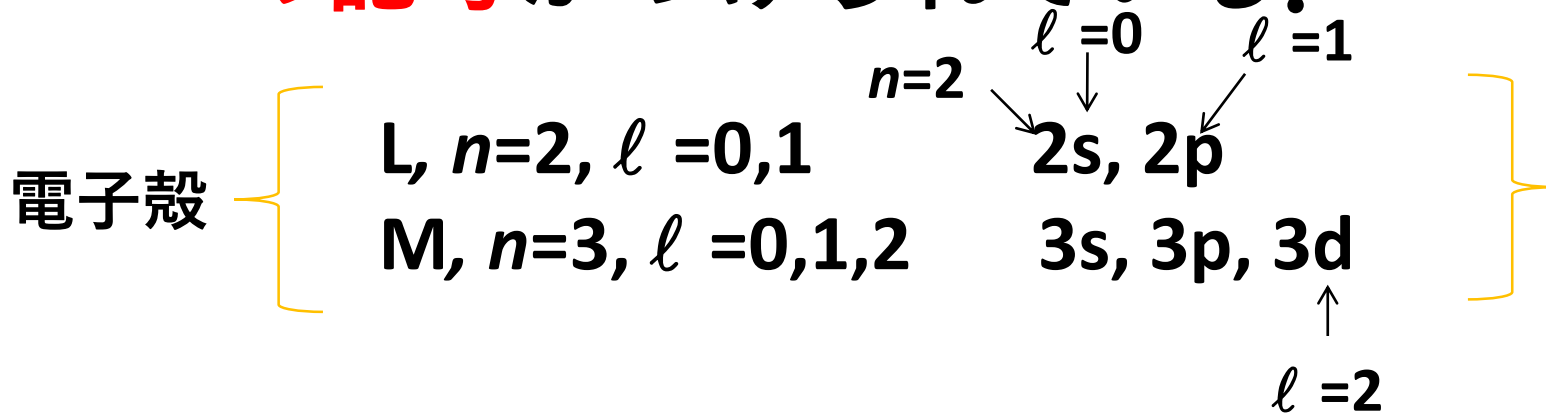
**方位量子数 (l) は、
電子の分布の大まかな形状
を表す量子数である。**

3. 方位量子数 (azimuthal quantum number: l)

l は主量子数 n に依存し, n がきまると,
 $0, 1, 2, \dots, n-1$ までの値をとる.

$n=1$ なら, l は0のみ, $n=2$ なら, l は0
と1, さらに $n=3$ なら, l は0と1と2という
意味である.

$l = 0, 1, 2, 3, \dots$ について $s, p, d,$
 f, \dots の記号がつけられている.



3. 方位量子数 (azimuthal quantum number: l)

s 型の軌道は**球形**，
 p 型の軌道は**亜鈴状**
である (図) .

$d, f \dots$ になるに従い，
原子軌道の形状はより複雑になる.



s 軌道 (球形)

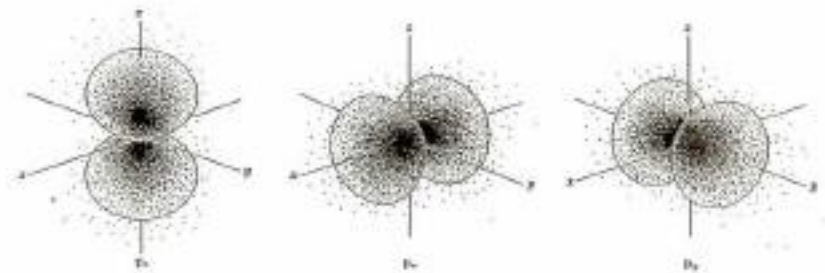


図 1.16 2p 軌道の電子雲

p 軌道 (亜鈴状)

問題2. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

1. 方位量子数 $\ell = 0$ の原子軌道は球状であり, [**s**] 軌道とよばれる.

2. 一般に主量子数 n に対し, 方位量子数 ℓ は, [**0, 1, 2, \dots, n-1**] だけある.

問題2. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

3. L 殻の電子殻は主量子数 = [2] に対応する. L 殻に方位量子数は, [0] , [1] の状態がありそれぞれ主量子数 [2] を併記して [2s] と [2p] の記号で表される.

問題2. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

4. M 殻の電子殻は主量子数 = [3] に対応する. M 殻には方位量子数は, [0], [1], [2] がありそれぞれ主量子数 [3] をつけ [3s], [3p], [3d] の記号で表される.

問題2. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

5. N 殻のすべての原子軌道を記号で表すと, [*4s, 4p, 4d, 4f*] である.

5. 磁気量子数 (magnetic quantum number: m_l)

n と l で定められる原子軌道は、
 l の値により電子の分布形状が異なるが、
それらの原子軌道に入る
電子のエネルギー値は同じである。

5. 磁気量子数 (magnetic quantum number: m_l)

一般に、異なる電子状態が複数あり、それらのエネルギーの値は等しい場合は、**縮重** (縮退 : degeneration) しているという。

5. 磁気量子数 (magnetic quantum number: m_l)

$l \neq 0$ のとき原子軌道は縮重している。しかし、磁場を与えると電子の分布方向の違い（あるいは電子の運動の方向が異なること）により、電子の運動が発生する磁場との反応が異なる（これを異方性 (anisotropy) という）。そのため、磁場のなかでは、原子軌道のエネルギーは l の値によって異なる（分離する）。

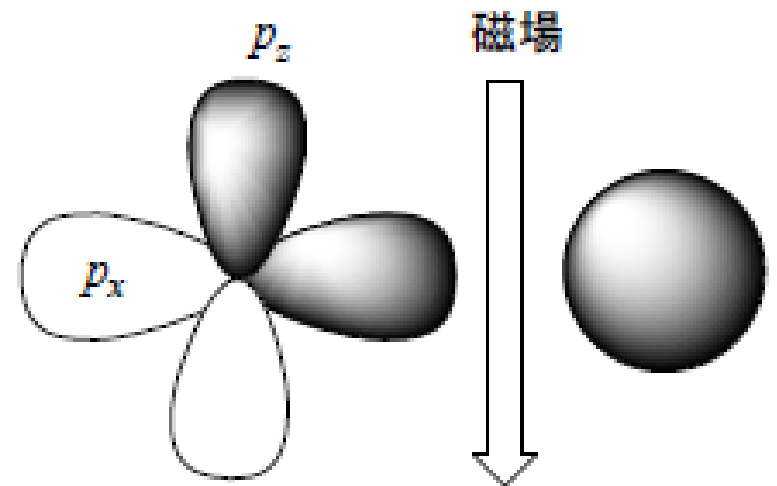
5. 磁気量子数 (magnetic quantum number: m_l)

このように縮重した状態が分離すること
を一般に

解縮重 (解縮退)

という。

s 軌道に入った電子は球状に分布するため、磁場の方向によって、エネルギーは変わらないが、**p 原子軌道**では電子の運動方向が**磁場の方向**に対し**等価でない**ため、磁場を与えると**エネルギー差**が生ずるようになる。



磁場によって分離する状態の数は、 l の値に対して、

$-l, -l+1, -l+2, \dots, 0, 1, 2, \dots, l$

の合計 $2l+1$ 個

がある。

これらを m_l の記号で表し **磁気量子数** と

いう。

m_ℓ は方位量子数 ℓ に依存し、

$\ell = 0$ なら、 $m_\ell = 0$ のみ（1状態）、

$\ell = 1$ なら、 m_ℓ は-1と0と1の3状態、

さらに $\ell = 2$ なら、 $m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$ の5状態があるという意味である。

（副殻の数、3つの p 軌道、5つの d 軌道など）

$2p_x, 2p_y, 2p_z$

要するに、

$l = 0$ の場合は軌道の形が球状であるため

磁場を与えても分離しないが、

$l = 0$ 以外は磁場による異方性により

m_l で与えられる状態数に分離する。

問題3. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

1. 原子軌道に入る電子のエネルギーは,

[主量子数] (n) と [方位量子数]

(l) できまる.

2. $l = 0$ の場合は, 電子は [球] 状に分布する.

問題3. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

3. 異なる状態が複数ありそれらのエネルギーの等しい場合は, それらは [縮重] (あるいは [縮退]) しているという.

4. 電子は [負] の電荷を持つため, 運動によって [磁場] を発生する.

問題3. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ

5. $l = 0$ 以外の原子軌道は, 磁場の中では電子が作る [**磁場**] との相互作用のため, 軌道のエネルギーが異なり分離する. これを [**解縮重**] という.

6. 方位量子数 l の場合, 磁場を与えると [**$-l, -l + 1, \dots, 0, 1, \dots, l - 1, l$**] のように合計 [**$2l + 1$**] 個に分離する.

問題3. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

7. $n=1$ の場合は、方位量子数は [0] のみでそれを記号として [1s] のように表す.

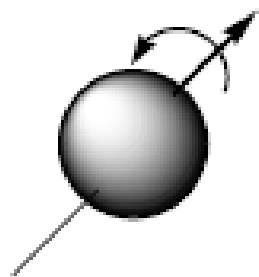
$n=2$ の場合は方位量子数は [0] と

[1] があり前者は記号で [2s] , 後者は [2p] であるが, p 軌道は磁気量子数により3つに分離するのでそれらを

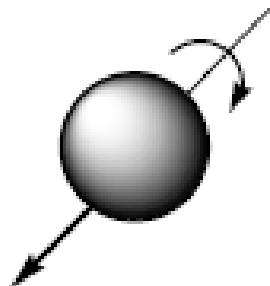
[2p_x, 2p_y, 2p_z] の記号で表す.

5. スピン量子数 (spin quantum number: m_s)

電子は **2つの方向** のどちらかに **自転** している。一方の自転の大きさは $\frac{1}{2}\hbar$ ，他方は $-\frac{1}{2}\hbar$ の角運動量を持ち，前者を **α スピン電子** (α -spin electron)，後者を **β スピン電子** (β -spin electron) という。

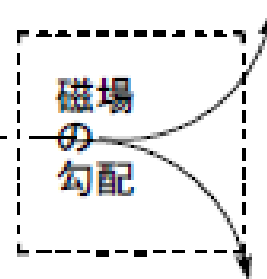


α スピン電子



β スピン電子

電子の流れ

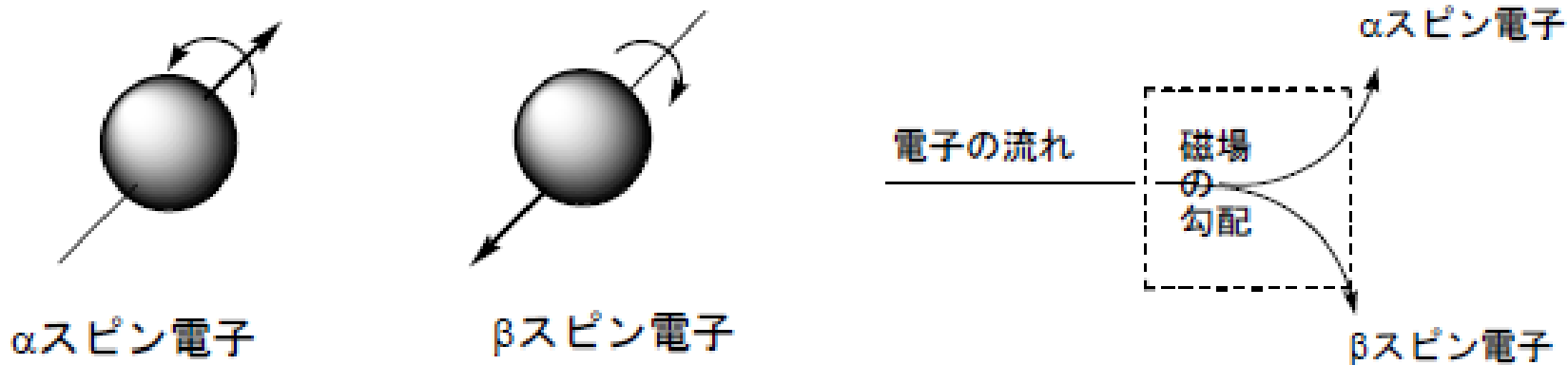


α スピン電子

β スピン電子

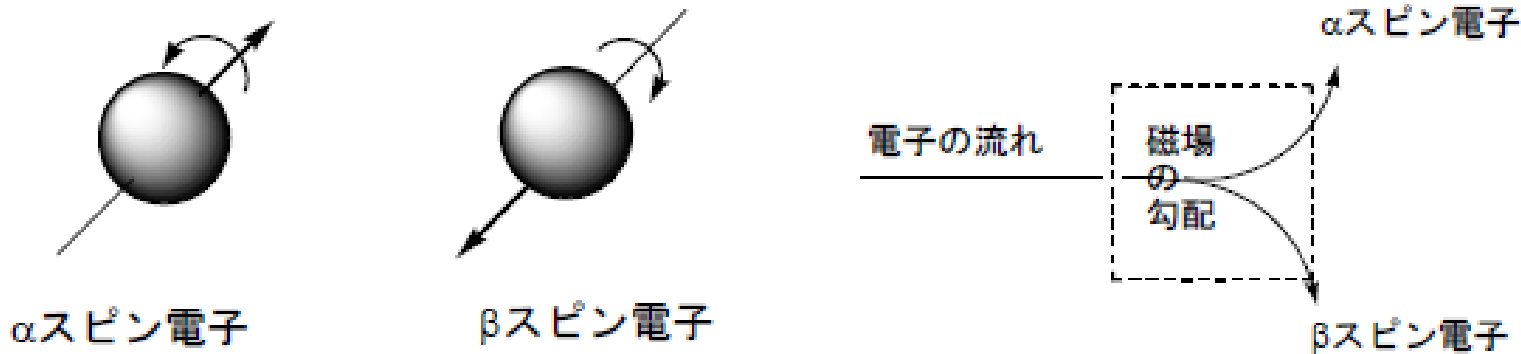
5. スピン量子数 (spin quantum number: m_s)

\hbar の前の**係数 $\frac{1}{2}$ と $-\frac{1}{2}$** を**スピン量子数**という。つまり、 α スピン電子は $\frac{1}{2}$ を、 β スピン電子は $-\frac{1}{2}$ の**スピン量子数**を持つ。



5. スピン量子数 (spin quantum number: m_s)

α スピン電子と β スピン電子では反対の磁場を発生するので、外から磁場を与えられるとそれらが相互作用して**スピンの違いによりエネルギーが異なる**。



問題4. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

1. 電子のスピンとは電子自身の [**回転**] であり、
2種ある.
2. 回転モーメント（回転力）の大きさは、
 $+(1/2)\hbar$ と $-(1/2)\hbar$ である. これらの係数
（ $+(1/2)$ と $-(1/2)$ ）を [**スピン量子数**] という.
3. また、 $+(1/2)$ と $-(1/2)$ のスピン量子数を持つ
電子を、それぞれ、 [**α**] 電子および [**β**] 電
子という.

問題4. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

4. 電子は [**負**] の電荷をもつので、自転運動により磁場が生じる。そのため、外部から磁場をあたえることにより電子のスピンの由来する磁場と相互作用し、異なる [**エネルギー**] 状態が生じる。

問題5. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

1. 原子軌道はエネルギーの低い順に, $1s$,

[$2s$], $2p$, [$3s$], $3p$, [$4s$],

[$3d$], $4p$, \cdots の順に並ぶ.

2. p 軌道は磁場の中では [3] つのエネルギー状態に分離し, d 軌道は [5] つ

に分離する. また f 軌道は [7] つに分離

する.

問題5. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

3. 原子軌道に電子が入るとき, 軌道エネルギーの [**低**] い順に入る. p 軌道は磁場のないところでは [**3**] 重に [**縮重**] している.

4. 縮重している原子軌道に電子が入る場合, 電子は, 縮重した軌道を分散して [**同**] スピンで入り, すべての軌道が1個の電子で埋まったら, 次に [**スピン**] を逆にして入る. これを [**Hund**] 則という.

問題5. 次の [] の中を適切な単語あるいは記号で埋めよ.

5. 窒素原子の電子配置は [$1s^2 2s^2 2p^3$]
である.

シュレディンガー方程式を解くと波動関数の中に整数が入ってくる。
これらの整数は量子数と呼ばれる。
量子数を決めると波動関数 ψ とエネルギー E が決まる。

	名前	取れる値	何を示す尺度か
n	主量子数	1, 2, 3, ...	エネルギー
l	方位量子数	0, 1, ..., $n-1$	角運動量の大きさ
m	磁気量子数	$-l, -l+1, \dots, l-1, l$	角運動量のZ区分

m_s スピン量子数 $+1/2, -1/2$