

原子番号7番の窒素Nの電子配置は $1s^2 2s^2 2p^3$ であり、アンモニア $\text{NH}_3$ 分子中の窒素原子は、 $sp^3$ 混成をとると説明できる。4つの等価な $sp^3$ 混成軌道のうち、3つのみが水素との結合に関与している。残り1つの $sp^3$ 混成軌道には、孤立電子対（非共有電子対、ローンペア）が存在し、アンモニア分子は三角錐型構造をとる。孤立電子対が存在するアンモニアは、ルイス塩基として働き、また、配位子(ligand)として働くこともできる。

# 原子の構造と周期表

1-1

原子軌道

1-2

4つの量子数

1-3

原子の電子配置と  
構成原理の例外

1-4

遮蔽, 有効核電荷,  
スレーターの規則

## 1-1

# 原子軌道

電子の挙動は、量子力学に従う

原子中の電子は「原子軌道」(atomic orbital)に入っている (存在している)

原子軌道とは、波動関数 $\psi$ によって規定される空間領域である

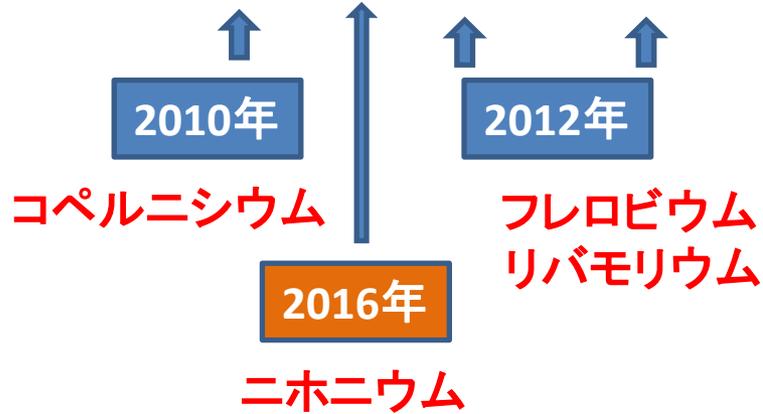
波動関数 $\psi$ はシュレーディンガー波動方程式の解である

電子の分布形状は不連続である。すなわち、量子化されている

1	1																	2			
1	H																	He			
2	3	4														5	6	7	8	9	10
2	Li	Be														B	C	N	O	F	Ne
3	11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18			
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar			
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36			
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54			
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
6	55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86			
6	Cs	Ba	ランタノイド	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
7	87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118			
7	Fr	Ra	アクチノイド	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo			

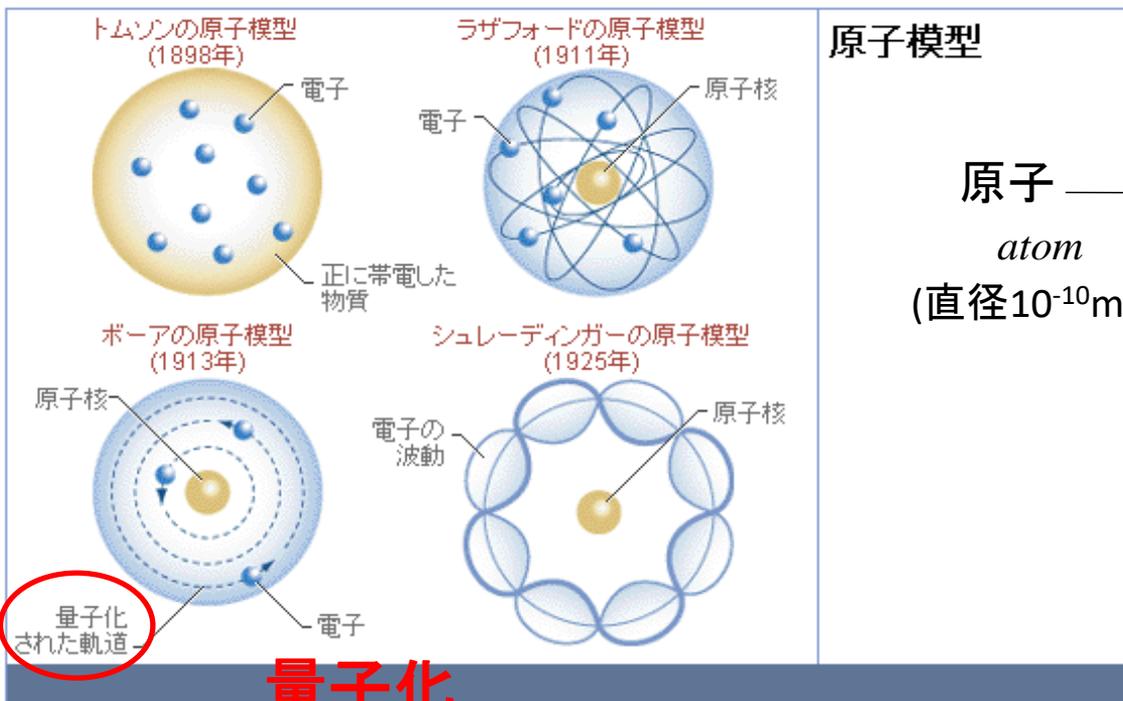
: ヒトに必須な常量の元素  
 : ヒトに必須な微量の元素  
 : ヒトにたぶん必須である元素

*periodic table*



# 原子, 分子, イオンの基本的構造について説明できる

Text p.1~



## 原子模型

原子  
*atom*  
(直径 $10^{-10}$ m)

電子  
*electron*

原子核  
*atomic nucleus*

陽子  
*proton*

中性子  
*neutron*

## 原子模型の変遷

科学者たちが実験を重ね、原子の構造がだいに明らかになってゆくに連れ、原子模型には少しずつ修正がくわえられた。イギリスの物理学者トムソンは、原子の中に正の電荷と負の電荷があることを確認した。イギリスの物理学者ラザフォードは、原子の中の正の電荷が原子核の中にかたよって存在することを発見した。デンマークの物理学者ボーアは、電子が原子核からある一定の距離をおいて軌道をおえがくと提唱し、オーストリアの物理学者シュレーディンガーは、原子中の電子の動きが粒子よりも波動に似ていることを発見した。

## 波動方程式

## 同位体

*isotope*

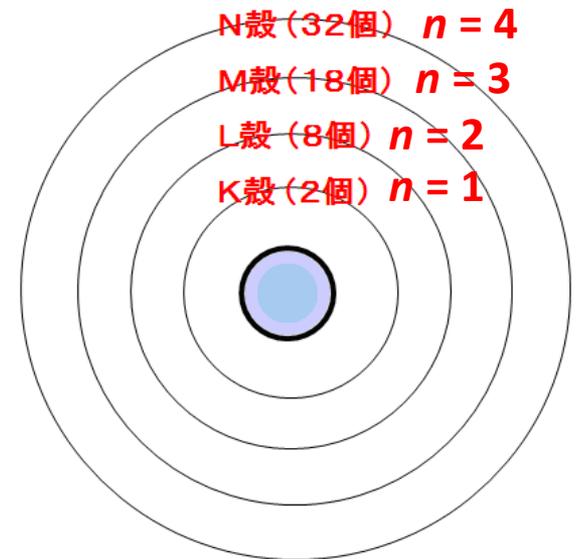
中性子数が異なる

原子の化学的性質

電子状態が決まる

電子配置(基底状態)

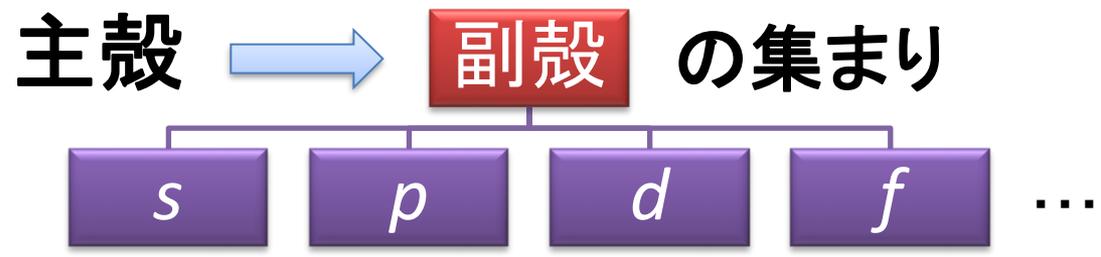
軌道に電子が入るルール



各軌道に  
最大 $2n^2$ 個の電子

主殻 ( $n = 1, 2, 3 \dots$ )

電子の存在領域



主殻	副殻
K ( $n = 1$ )	1s
L ( $n = 2$ )	2s, 2p
M ( $n = 3$ )	3s, 3p, 3d
N ( $n = 4$ )	4s, 4p, 4d, 4f

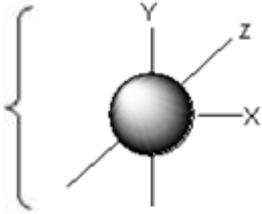
# 原子軌道の形

軌道(orbital) → 電子が存在する領域



1つの軌道に電子  
は最大2個存在できる

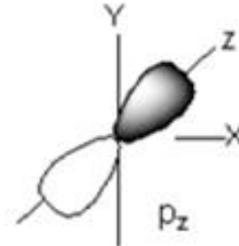
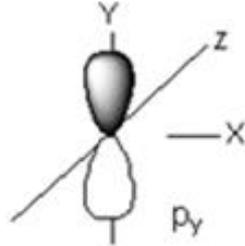
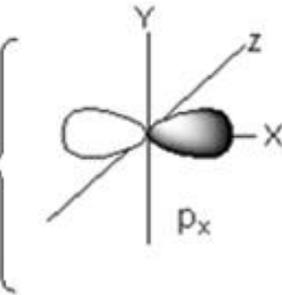
s軌道



$$1 \times 2 = 2$$

orbital electrons

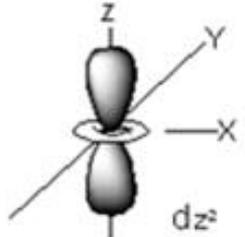
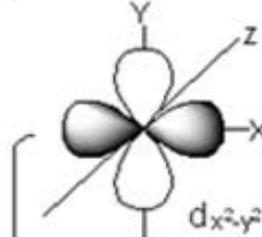
p軌道



$$3 \times 2 = 6$$

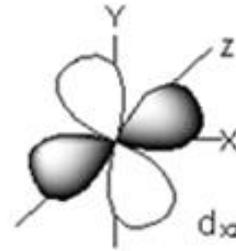
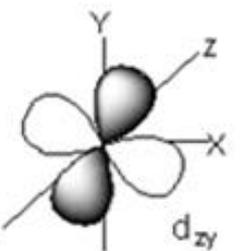
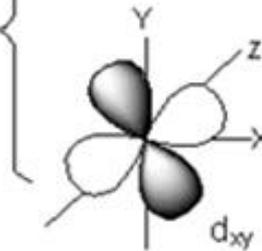
orbitals electrons

d軌道



$$5 \times 2 = 10$$

orbitals electrons



M殻( $n = 3$ )には  
電子は  $2 \times 3^2 = 18$  (個)

3s, 3p, 3d

$$2 + 6 + 10 = 18 \text{ (個)}$$

# 原子の電子配置について説明できる

## 主殻・副殻と電子数

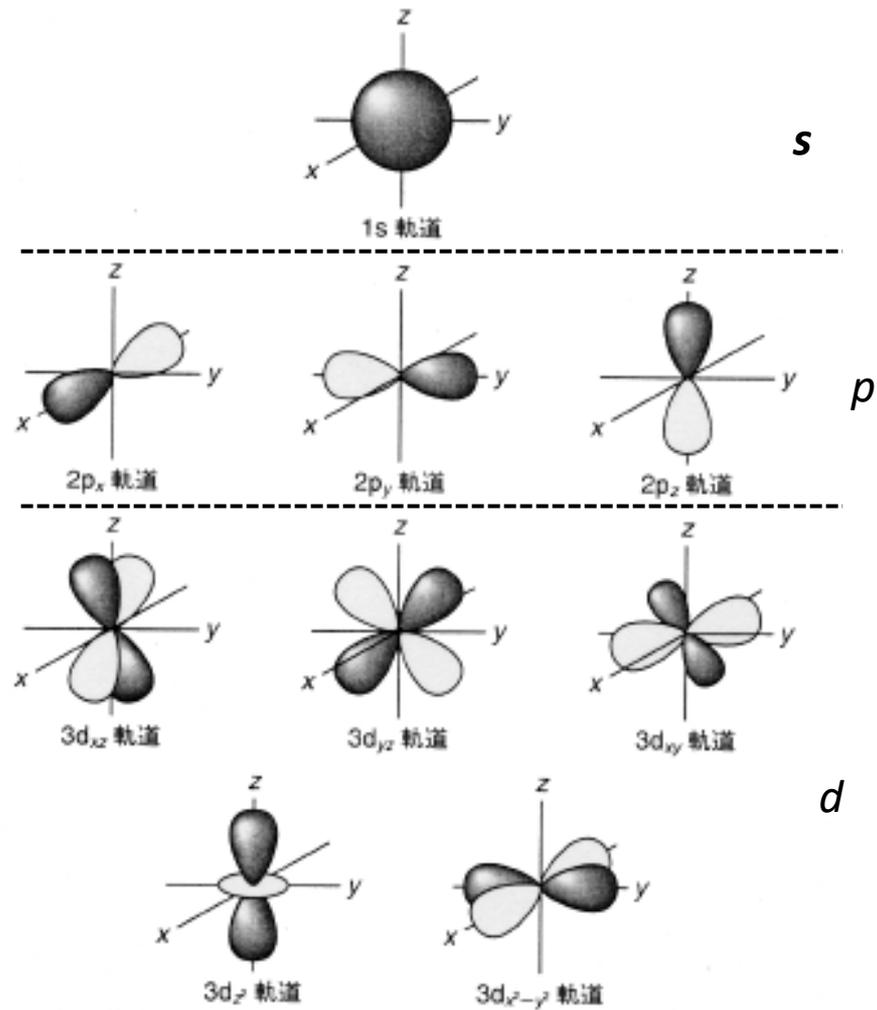
主殻	主量子数	副殻	電子の数
	(n)		
K	1	s	2 (1 × 2)
L	2	s, p	2+6 (3 × 2)
M	3	s, p, d	2+6+10 (5 × 2)
N	4	s, p, d, f	2+6+10+14 (7 × 2)

1s

2s

2p

$2n^2$



原子軌道の形 (軌道の黒い部分と白い部分は反対の符号をもつ)

## 問題

L殻には電子は最大  個収容できる

L殻の主量子数は  である

L殻に存在する軌道(副殻)は次の4つである.  
(主量子数のあとに軌道名を)

# 原子の電子配置に関するルール

基底状態・・・ある原子において最も安定な電子配置

Ground state



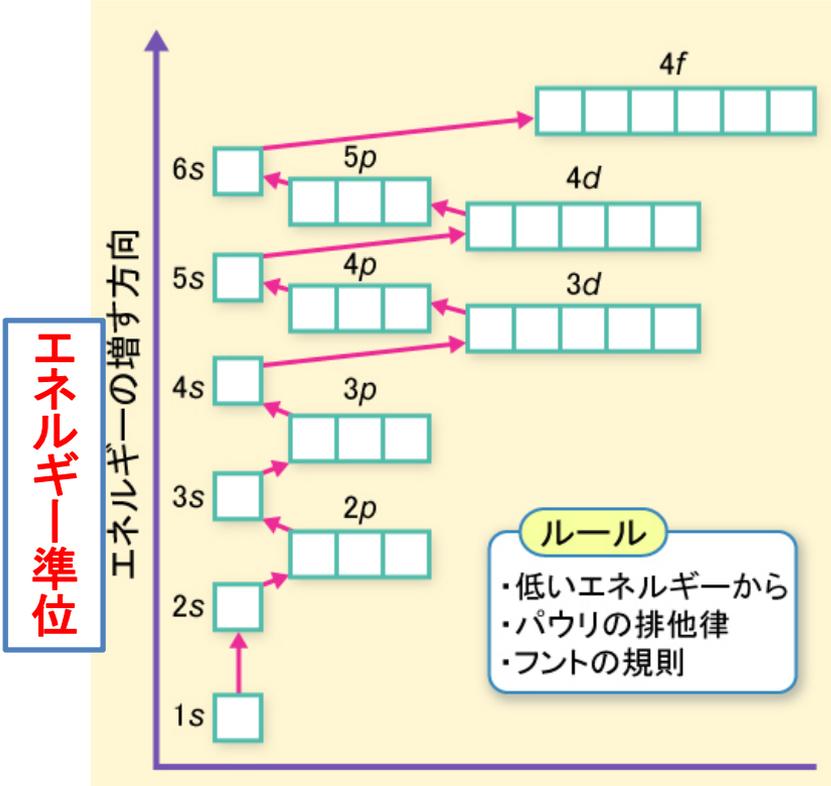
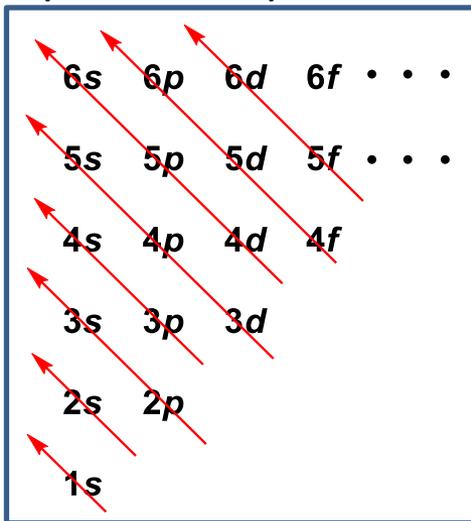
三つの原理または規則によって定められる。

## 1) 構成原理:

電子はエネルギーの低い軌道

から順に收容される. その順序は  
 $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow \dots$

となる.



- ルール**
- ・低いエネルギーから
  - ・パウリの排他律
  - ・フントの規則

## 原子の電子配置に関するルール

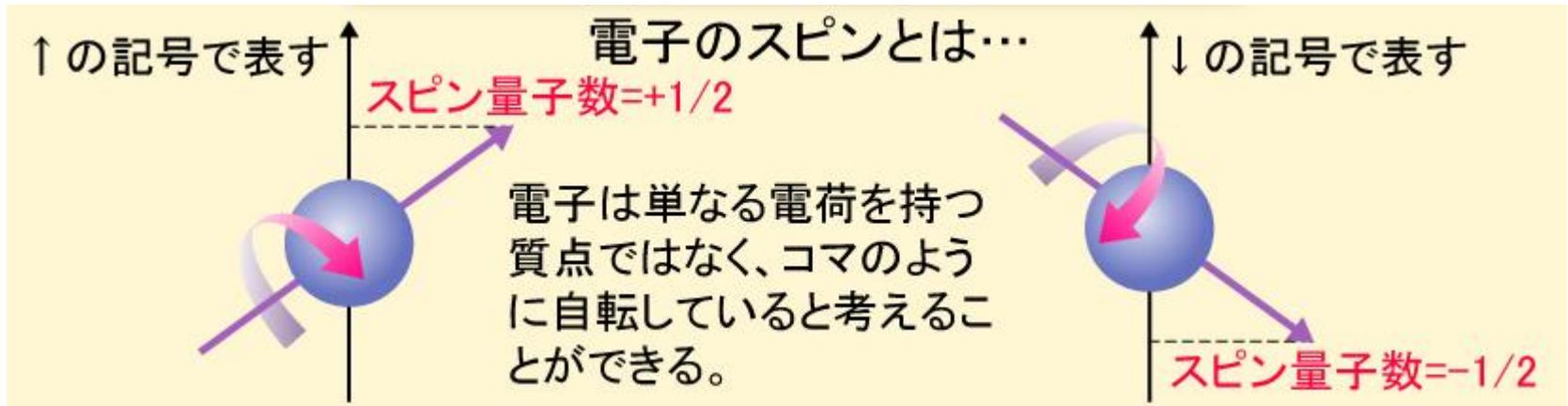
**基底状態**・・・ある原子において最も安定な電子配置

Ground state



三つの原理または規則によって定められる。

- 2) **パウリの排他原理**: 一つの原子軌道には電子は2個しか収容できず、しかもそれらは互いに逆向きのスピン(スピン量子数  $+1/2, -1/2$ )を有していなければならない。すなわち、原子中に同じ電子状態を有する電子は1個しか存在しない。



# 原子の電子配置に関するルール

**基底状態**・・・ある原子において最も安定な電子配置

Ground state

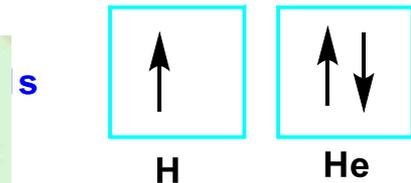


**三つ**の原理または規則によって定められる。

## 2) **パウリの排他原理**：

### パウリの排他律

1. 軌道1つに対し電子は2つまでしか入れない。
2. 二つの電子のスピンはたがいに反対である。



パウリの排他律により以下のような電子の配置は許されない

1つの軌道に3つ以上の電子が入っている。



電子のスピンの互いに反対ではない。

## 原子の電子配置に関するルール

基底状態・・・ある原子において最も安定な電子配置

Ground state



三つの原理または規則によって定められる。

- 3) フントの法則: 縮重した軌道が存在するとき、それらの軌道にすべて1個ずつ電子が収容されるまで、1個の軌道に1個ずつ電子が収容される。このとき、これらの電子はすべて同じ向きのスピンをもつ。(この規則はすべての元素で成り立つわけではない)

### フントの規則

2つ以上の電子は同じエネルギーの軌道が複数あれば、それぞれ異なった軌道に入り、スピン対を作らないように配列する。

# 原子の電子配置に関するルール

基底状態・・・ある原子において最も安定な電子配置

Ground state



三つの原理または規則によって定められる。

たとえば  
3つのp軌道  
( $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ )  
の場合

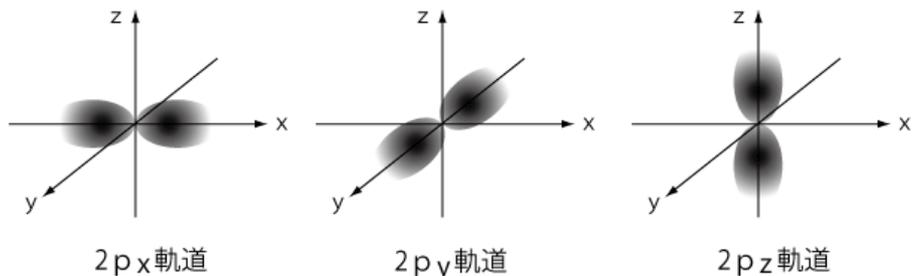
フントの規則により、  
以下のような電子配置はとることができない。

同エネルギーの軌道があるので、別々の軌道に入らなければならない。

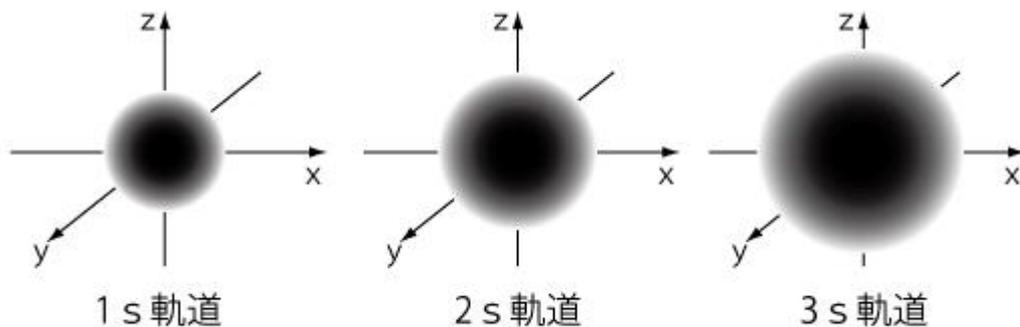
別々の軌道に入ってはいるが、スピン対を作らないように配列しなければならない。

# 問題

${}^3\text{Li}$ の電子はどのように收容されているのだろう  
↑ あるいは ↓ で 埋めよ



⑤

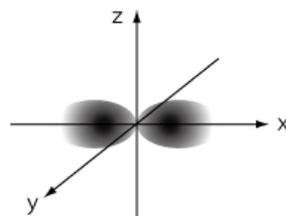
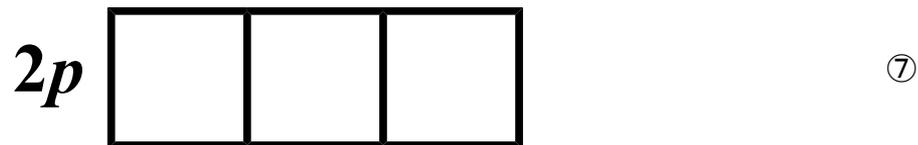


④

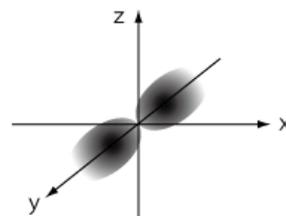


# 問題

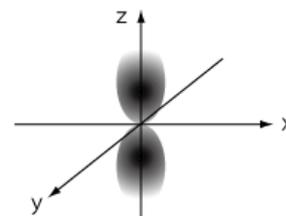
6  ${}^6\text{C}$ の電子はどのように収容されているのだろう  
↑ あるいは ↓ で 埋めよ



$2p_x$ 軌道



$2p_y$ 軌道



$2p_z$ 軌道



# 問題

${}_8\text{O}$ の電子はどのように収容されているのだろうか  
↑ あるいは ↓ で 埋めよ



## 問題

ある原子において最も安定な電子配置（基底状態）は3つの原理または法則により決まる。  
その3つとは

1.

2.

3.

# シュレーディンガー方程式とは

## ● 古典力学

- ✓ 粒子は粒子  
波は波
- ✓ 運動は  
完全に予測可能

↓  
運動方程式

## ● 量子力学

- ✓ 全ては粒子かつ波
- ✓ 運動は確率的にしか  
予測できない

↓  
粒子の運動はシュレー  
ディンガー方程式によっ  
て記述される

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 $\psi$ 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

### 次週までの課題

Text p.13 から p.20 まで, および以降のプリントを読んでおく

プリント 問1から問5 穴埋め