



# 化学 IA

担当 佐藤 しのぶ

# 本日の授業内容

- もう少し深く ボーア理論
- ド・ブロイの式
- パウリの禁制原理
- 電子配置

## 4.3 物質の波動性：波動力学

波動力学；原子の中の原子の挙動を説明する理論

根源：1924年にド・ブロイが提案した仮説

光がまるで粒子によって構成されるように振る舞う  
粒子も波の性質と考えているような挙動をする



ド・ブロイの式へ (黒板で説明)

# 量子力学による軌道(orbital)の考え方

1962年 シュレーディンガー

電子波の形とエネルギーを記述する波動関数を求めた。  
これらのそれぞれ異なった波: 軌道 (orbital) と呼ばれる

この概念  
は重要!!!

一つの原子のそれぞれの軌道は、  
一つの特定のエネルギーを持ち、電子が見いだされることが確率的に期待される原子核の周りの領域のこと。



電子の軌道は三つの量子数の値によって  
特徴づけられる

# 量子数とは

原子内の電子の定常状態を表す波動関数(軌道)で規定されるもの。

主量子数( $n$ )、方位量子数( $l$ )、磁気量子数( $m$ )からなる。

# 主量子数 $n$

一つの原子内のエネルギー準位は主量子数の $n$ で定められる主準位、すなわち殻の順にならぶ。

$n$ の値が大きいほど、その殻に属する準位の平均エネルギーは大きい。  
電子の殻から平均距離が大きい。

重要!!!

|       |   |   |   |   |
|-------|---|---|---|---|
| 主量子数  | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 英文字表記 | K | L | M | N |

# 方位量子数 $l$

主殻を構成するもので、副殻、副準位によって構成される。  
方位量子数によって特定される。  
方位量子数は、軌道の形とエネルギーを決める。

$n-1$ の数までとれる。

重要!!!

| $n$   | $l (n-1)$                |
|-------|--------------------------|
| 1     | 0                        |
| 2     | 0, 1                     |
| 3     | 0, 1, 2                  |
| 4     | 0, 1, 2, 3               |
| ..... | .....                    |
| $n$   | 0, 1, 2, 3, ....., $n-1$ |

$n$ =副殻の数

# 方位量子数 $l$

主殻を構成するもので、副殻、副準位によって構成される。  
方位量子数によって特定される。  
方位量子数は、軌道の形とエネルギーを決める。

$n-1$ の数までとれる。

重要なのはここまで

| $l$ の値 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|--------|---|---|---|---|
| 副殻の表記  | s | p | d | f |

s, p, d, f殻は重要：基底状態の原子中の電子によって占められるから



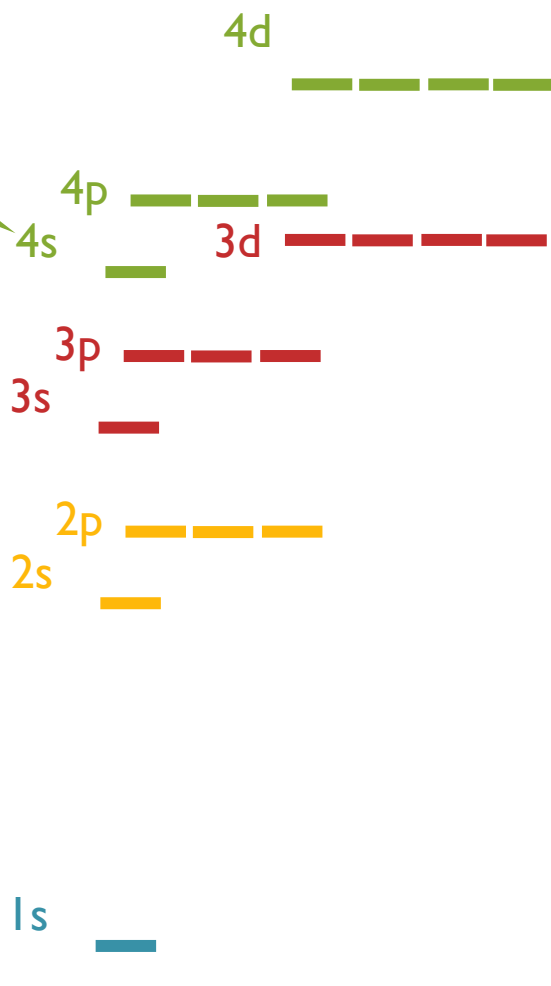
# 磁気量子数 $m_l$

他の軌道に対し、相互の空間的な方向を決めるもの。  
- $l$ から $l$ の数までとれる。

| 主量子数<br>$n$ | 方位量子数<br>$l$ | 副殻名称     | 磁気量子数<br>$m_l$         | 副殻中の軌道の番号 |
|-------------|--------------|----------|------------------------|-----------|
| 1           | 0            | 1s       | 0                      | 1         |
|             | 1            | 2s<br>2p | 0<br>-1, 0, 1          | 1<br>3    |
| 2           | 0            | 3s       | 0                      | 1         |
|             | 1            | 3p       | -1, 0, 1               | 3         |
|             | 2            | 3d       | -2, -1, 0, 1, 2        | 5         |
| 3           | 0            | 4s       | 0                      | 1         |
|             | 1            | 4p       | -1, 0, 1               | 3         |
|             | 2            | 4d       | -2, -1, 0, 1, 2        | 5         |
|             | 3            | 4f       | -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 | 7         |

# エネルギー準位

殻の重なり



$n$ の数の増加に伴い  
エネルギー増加

$n$ の数の増加に伴い  
エネルギー間隔は小  
さくなる

$n=4$

$n=3$

$n=2$

$n=1$ の殻はエネル  
ギーが最も低い

$n=1$

## 4・4 電子の回転とパウリの禁制原理

スピン量子数  $m_s$  : 回転することから生じる  
電子は二つの方向のどちらかしか回転しないので、  
 $m_s$  は二つの値しかとれない。 +1/2 or -1/2

一つの原子の中の二つの電子が、四つの量子数をすべて同じには出来ない

$n, l, m_l$  に特定の起動に対応する特定の値を選ぶと、  
スピン量子数の異なる2つの電子しか持ち得ない。

一つの軌道に入る電子は2つまで。そのスピンは反対方向である。

# パウリの禁制原理

一つの軌道に入る電子は2つまで。そのスピンは反対方向である。

s, p, d, f副殻に収容できる最大電子数

| 副殻 | 軌道の数 | 電子の最大数 |
|----|------|--------|
| s  | 1    | 2      |
| p  | 3    | 6      |
| d  | 5    | 10     |
| f  | 7    | 14     |

殻に許される電子の数は $2n^2$ 個  
これから逆算も可能

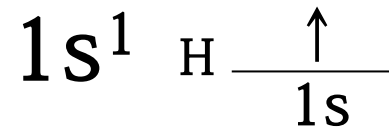
重要

電子スピンは原子と分子の磁氣的性質の原因  
反磁性：他の磁石に引き寄せられない  
常磁性：磁場に強く引き寄せされる。

## 4・5 元素の電子配置

水素の場合

1s副殻に1個の電子をもつ



軌道図表

### 電子配置のきまり

出来るだけ低いエネルギー準位に入れる。  
二つ以上の軌道を持つ副殻に入る電子は、  
出来るだけスピンの向きが同じ方向に向くようにする。  
(フントの規則)



様々な原子の電子配置

黒板で説明

# 次回の授業

ブラディ 一般化学(上)

3. 周期表と原子の構造 (P 81～)

予習内容

4.6～4.7あたりまで

<九州工業大学 竹中研究室>で検索  
研究グループ>佐藤しのぶ (Shinobu Sato)で以下のページを確認しておくこと。

<http://takenaka.che.kyutech.ac.jp/2015/member/sato.html>