

水素原子の波動関数（復習）

動径関数

球面調和関数

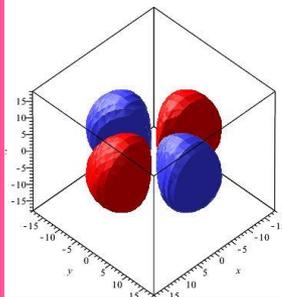
$$\Psi_{3d_1}(r, \theta, \phi) = R_{3,2}(r) Y_{2,1}(\theta, \phi) = R_{3,2}(r) \Theta_{2,1}(\theta) \Phi_1(\phi)$$

$$\Psi_{3d_1} = A_{3d} \frac{r^2}{a_0^2} \exp(-r/3a_0)$$

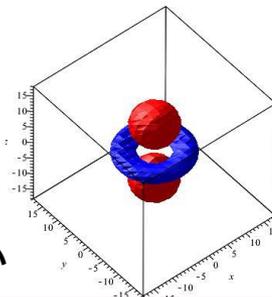
$$\left[\frac{1}{2} \sqrt{15} (\sin \theta \cos \theta) \right] \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\phi) \right)$$

動径関数は
核と電子の距離 r が
どのぐらいのとき
電子が存在
しやすいかを示唆

球面調和関数(角度の関数)が
波動関数の(面白い)形を決める



か

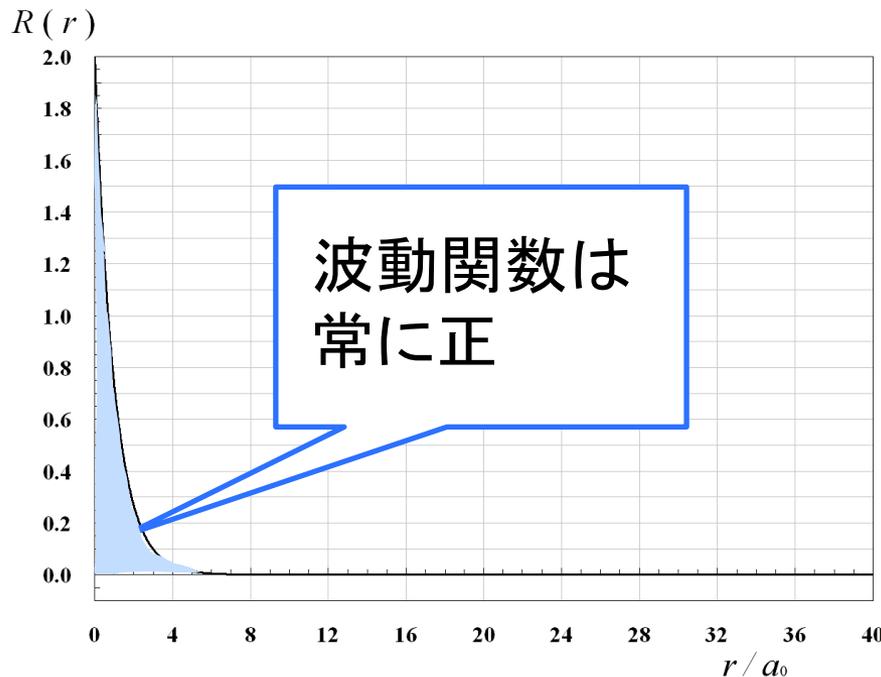


かは $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ 次第

水素原子の動径関数

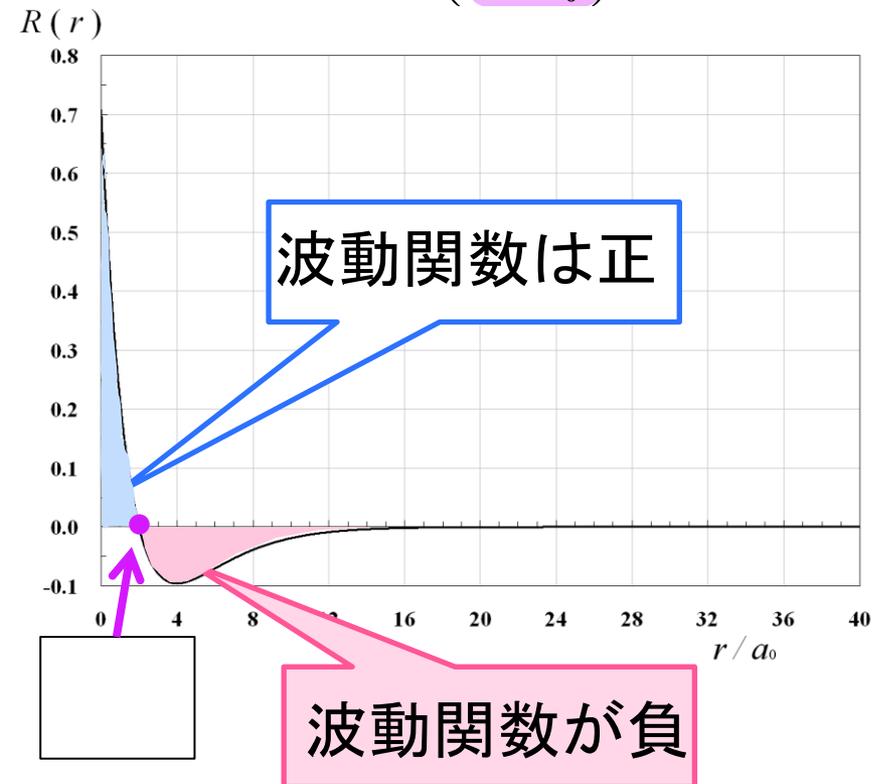
1s関数

$$R_{1s}(r) = R_{1,0}(r) = A_{1s} \exp(-r/a_0)$$



2s関数

$$R_{2s}(r) = R_{2,0}(r) = A_{2s} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) \exp(-r/2a_0)$$



主量子数nの数が増えると、節が増える。→

水素原子の動径分布関数 $P(r)$

電子が

で

見つかる確率密度

$$P(r) = 4\pi r^2 [R(r)]^2$$

関数の2乗

1s関数の動径分布関数

$r =$ $で極大値$

a_0 は約0.5Å。ボーアモデルの
n=1の時の半径に等しい

電子の居心地の良い距離

→

がわかる

$r^2 R(r)^2$

0.6

0.5

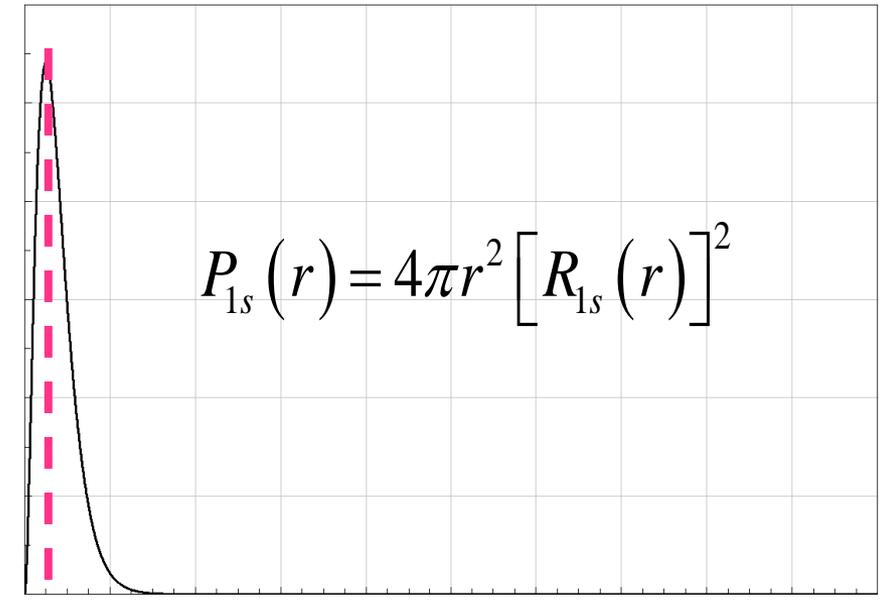
0.4

0.3

0.2

0.1

0.0



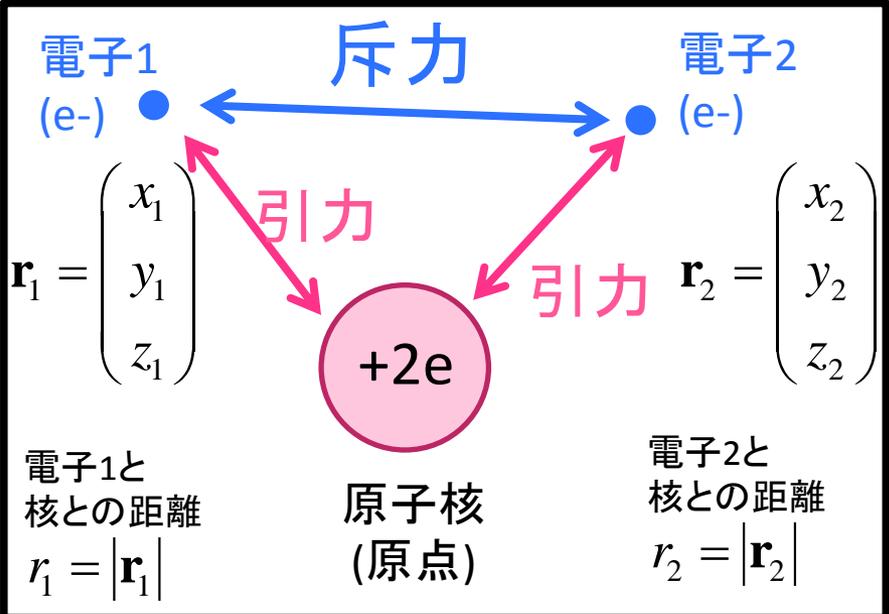
$$P_{1s}(r) = 4\pi r^2 [R_{1s}(r)]^2$$

r/a_0

まとめ（動径関数&動径分布関数）

- 動径関数：距離の関数（例 $R_{1s}(r) = A_{1s} \exp(-r/a_0)$ ）
- 動径分布関数： $P(r)$
（動径関数の2乗 × 球の表面積）
電子が存在しやすい核からの距離を示す
- 1s軌道ならボーア理論の半径 a_0 と一致
- 原子や分子の **だいたいの大きさ** を与える

He原子のシュレディンガー方程式を立てる



1. 電子の数だけ を足す
2. 存在する力の数だけ を足す

シュレディンガー方程式は $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$\hat{H} =$

多電子原子の波動関数

3体問題: 3粒子以上の相互作用問題は解なし
しかしGaussianのようなもので近似解は計算可能

原子の場合: n, l, m という量子数の分類はそのまま

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

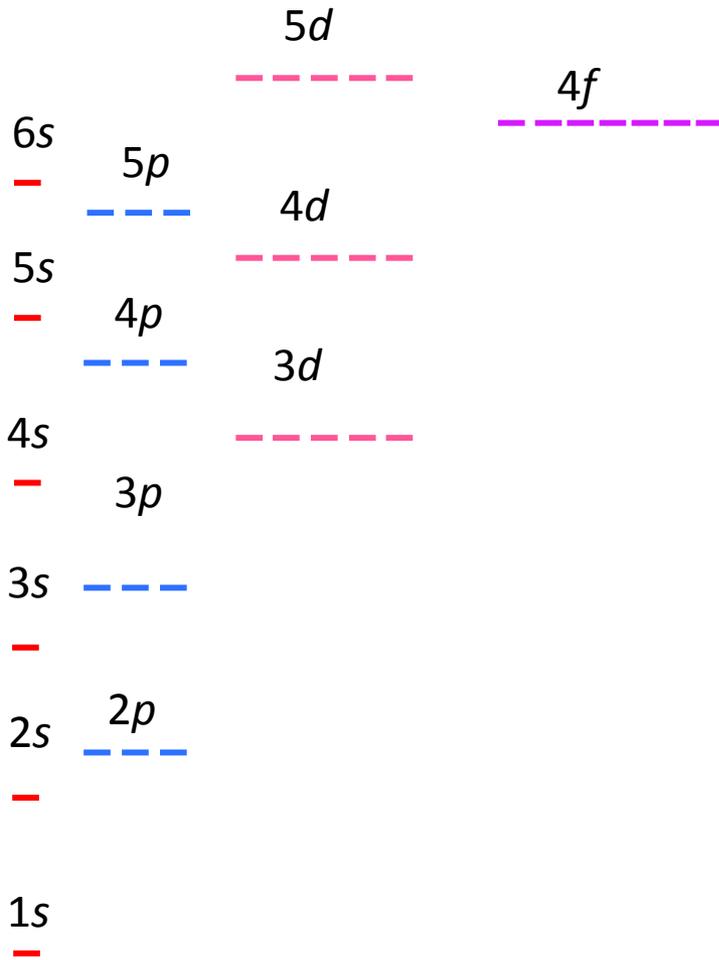
動径関数は

球面調和関数は

多電子原子のエネルギー準位

多電子原子の解

エネルギー



水素原子とは異なる
一般の原子の持つ性質

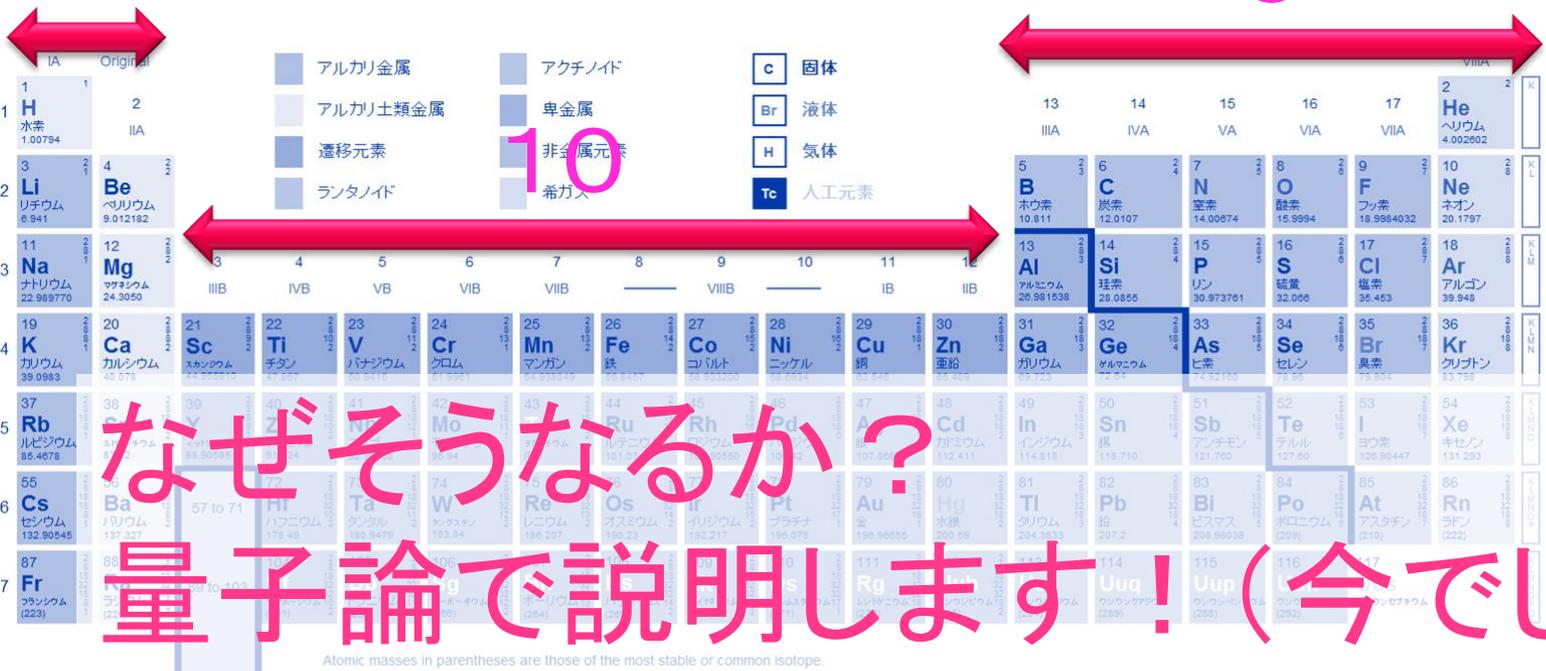
同じ主量子数 n でも
の値(s,p,d,..)によって
エネルギーが異なる
(の順に安定)

→4sが3dより安定化
(安定化の度合いは
原子によって異なる)

周期表の数字の規則

2

6



なぜそうなるか？
量子論で説明します！（今でしょ）

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.



14

2・1, 2・3, 2・5, 2・7: 2 × 奇数

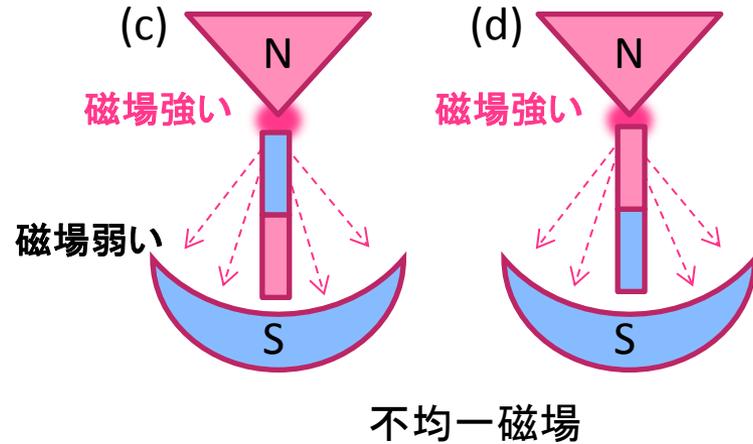
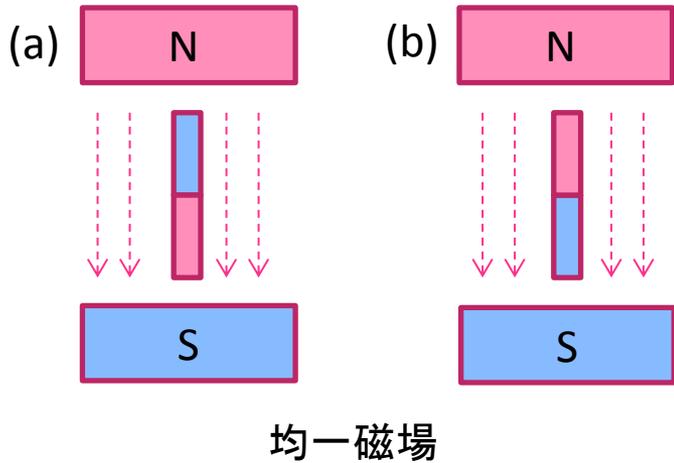
周期表のすばらしさ

- 周期表は、量子力学ができるよりも前に、原子の質量の順に並べて作られた。
- 性質が類似するものが、縦に並ぶように適当に改行してある。

(量子力学とは異なる経験に基づく表)

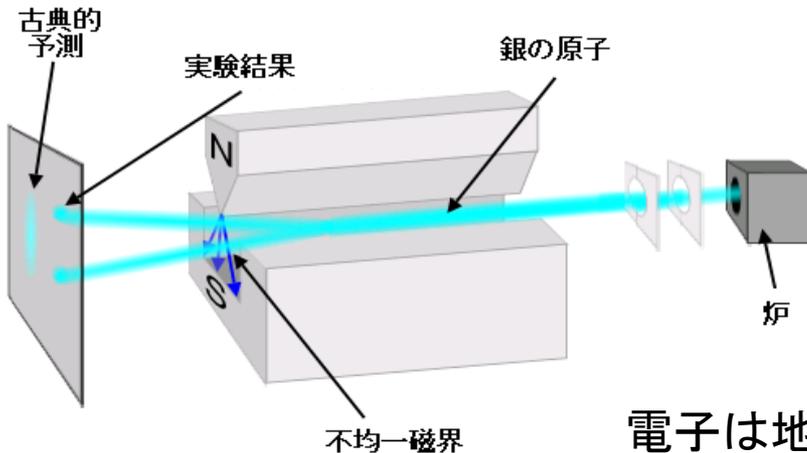
- $2 \times$ 奇数というブロックが見られる。
- 奇数というのは、s、p、d、f軌道の数に対応
- では2は？
- 一つの軌道に、2電子ずつ詰まっていることを示唆している。(スピンという概念の予言)

電子は磁石だ

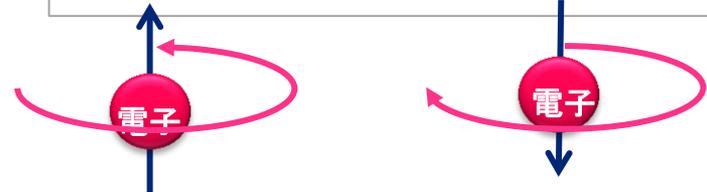


Q. 小さい磁石はどう動く? (a) _____ (b) _____ (c) _____ (d) _____

シュテルン-ゲルラッハの実験



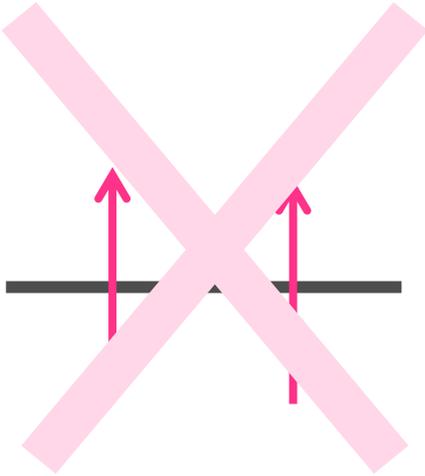
銀原子: 磁石の性質を持っている
 → つきつめると一つの**電子**が
 小さな磁石になっていないとおかしい
 なぜ電子が磁石なのか?



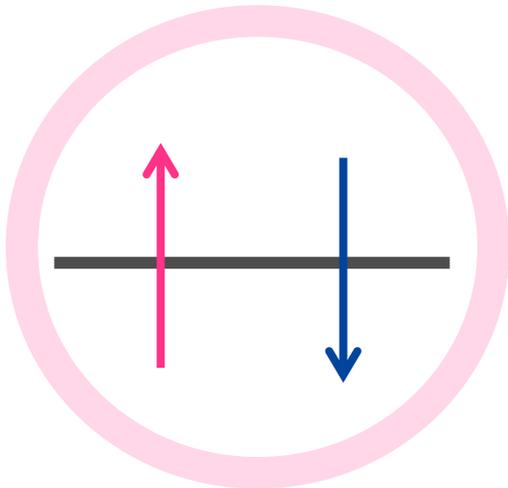
電子は地球みたいに自転していて磁場を発生させている! ?
 (ほんとは自転などはしていないが)

この二つの電子の性質を区別して上スピン・下スピンと呼ぶ。

パウリの排他原理



一つの空間軌道（波動関数）には
同じ向きのスピンをもつ電子は
一緒に入れない。



異なるスピン状態の時のみ、
電子が2つまで入ることができる。

同じ向きに
磁石を並べる
不安定

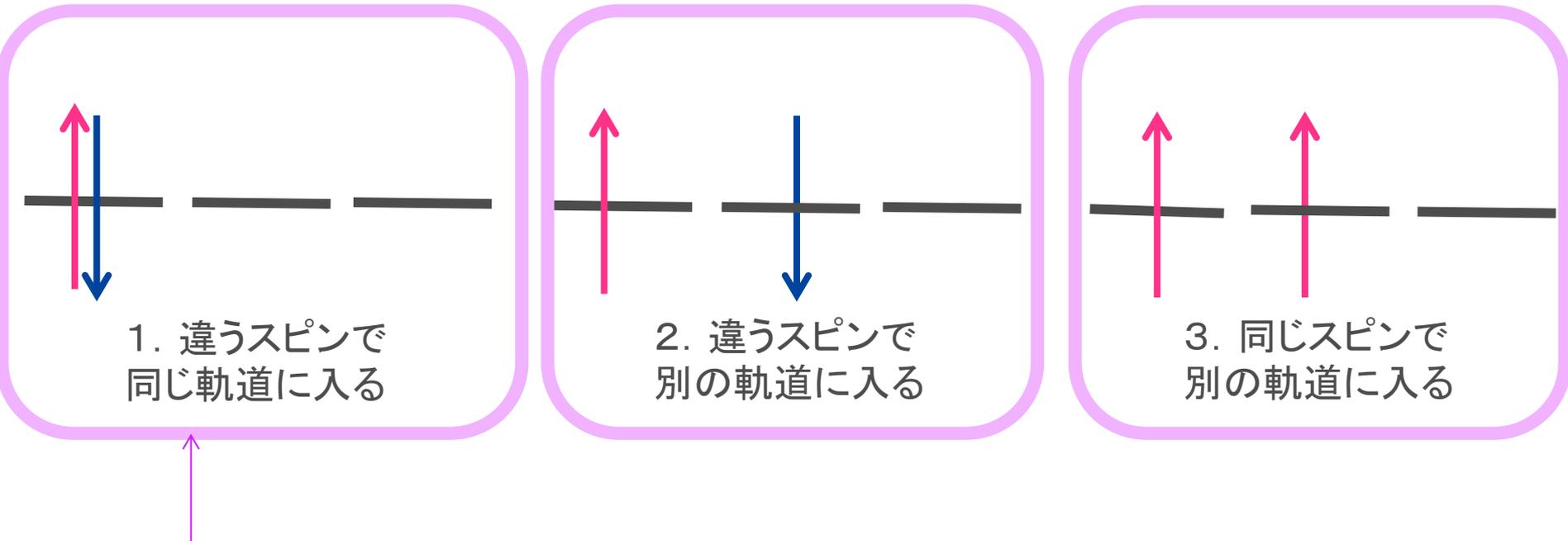


逆向きに
磁石を並べる
安定



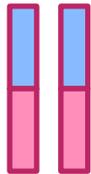
フントの規則

同じエネルギーをもつ空間軌道(波動関数)が複数ある場合はどうするか？(例:p軌道に2電子詰める)



電子が同じ軌道にいと、クーロン反発が起こる。一緒にいなくてよければ一緒にいたくない¹²。

同じ向きに
磁石を並べる
不安定



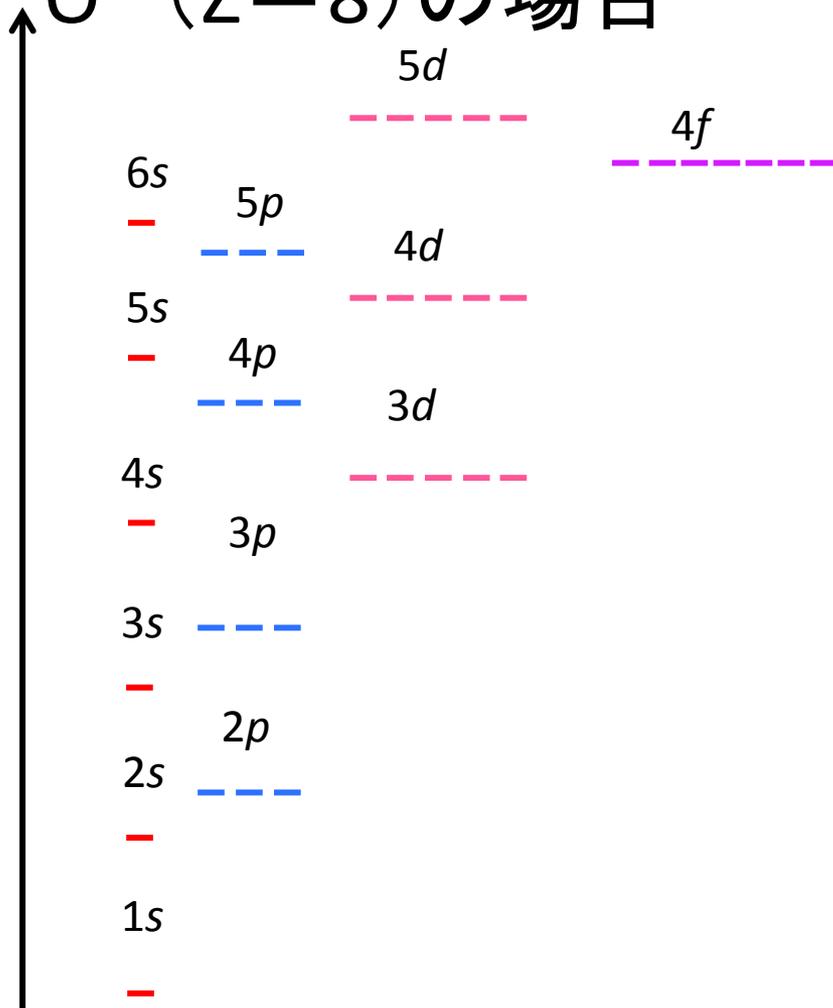
逆向きに
磁石を並べる
安定



電子もスピンを逆向きにすると、
同じ軌道の準位に入る



0 (Z=8) の場合



ポイント

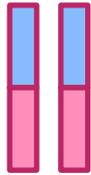
- ・電子はエネルギーの低い軌道から2個ずつスピンを逆にして入る。
- ・縮退する軌道に関しては、フントの規則を満たすように詰まっていく。

周期表

Periodic Table of the Elements

1 H																	2 He															
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne															
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar															
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr															
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe															
55 Cs	56 Ba	57-71 La-Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn															
87 Fr	88 Ra	89-103 Ac-Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn																					
																		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
																		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

同じ向きに
磁石を並べる
不安定



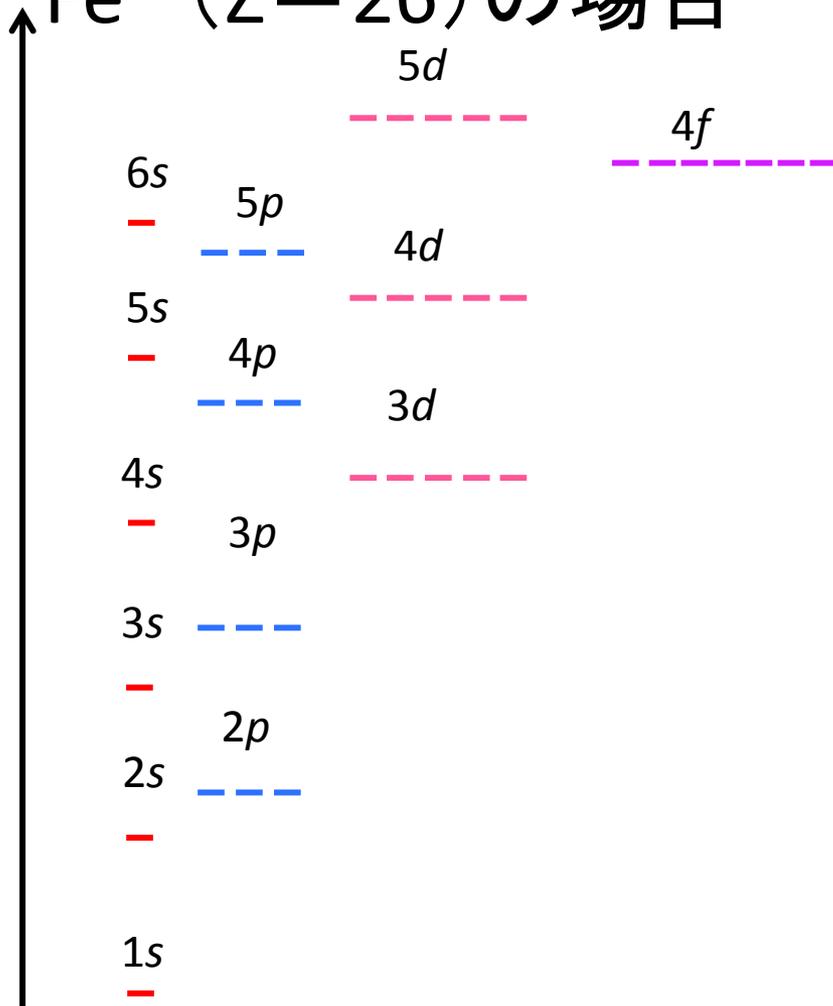
逆向きに
磁石を並べる
安定



電子もスピンを逆向きにすると、
同じ軌道の準位に入る



Fe (Z=26) の場合



ポイント

- ・電子はエネルギーの低い軌道から2個ずつスピンを逆にして入る。
- ・縮退する軌道に関しては、フントの規則を満たすように詰まっていく。

周期表

Periodic Table of the Elements

1 H																	2 He															
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne															
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar															
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr															
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe															
55 Cs	56 Ba	57-71 La-Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn															
87 Fr	88 Ra	89-103 Ac-Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn																					
																		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
																		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

まとめ

- ・多電子原子のシュレディンガー方程式の(近似)解
- ・パウリの排他原理
- ・フントの規則

を用いてすべての原子を最外殻電子で分類すると
周期表の並びを再現できる

→ シュレディンガー方程式は
水素原子だけでなく
一般の原子の性質を予言する力がある