

無機化学Ia

2016年9月～2017年2月
10月13日 第2回

1. 原子構造と周期律

担当教員:
1回～8回
福井大学学術研究院工学系部門生物応用化学分野
前田史郎
E-mail: smaeda@u-fukui.ac.jp
9回～16回
福井大学産学官連携本部
米沢 晋
教科書: 基礎無機化学 下井 守著, 東京化学同人

休講通知: 来週10月20日(木)は学会参加のため休講とします。補講については後で掲示します。

この授業の前半ではカードリーダーによる出席を取ります。各自学生証をカードリーダーに通してから、着席すること。学生証を忘れた人は、当日の授業終了時まで申し出た人だけ出席扱いとします。後日出席の申し出は受け付けません。

1. 原子構造と周期律 1・1 原子核と電子

1897年 電子 トムソン
1911年 原子核 ラザフォード
1918年 陽子 ラザフォード
1932年 中性子 チャドウィック

表1・1 陽子、中性子、電子の質量と電荷

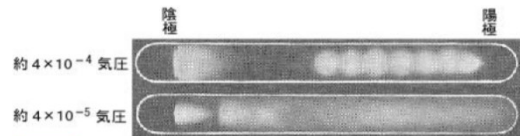
素粒子	質量/kg	質量(電子に 対する相対質量)	電荷/C	電荷(陽子の電荷に 対する相対比)
陽子	1.6726×10^{-27}	1836	$+1.602 \times 10^{-19}$	+1
中性子	1.6750×10^{-27}	1839	0	0
電子	9.1094×10^{-31}	1	-1.602×10^{-19}	-1

電子の発見

(<http://www2.kutl.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld/MicroWorld.html>)
「ミクロの世界」-その1, その2- (九州大学名誉教授 高田健次郎)

「真空放電, 陰極線」

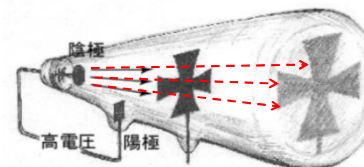
ガラス管の中に1対の電極を入れ, その間に数 kVの高電圧をかける。管内の気体が低圧 (0.1 気圧以下) になると放電が起こる。これを真空放電という。このとき管内には下図のように縞模様が見られる。



圧力が $0.000001 (10^{-6})$ 気圧くらいになると, 縞模様が消えて, 管内が暗くなるが, 放電が止まったわけではなく, 電流は依然として流れている。つまり電極間に何かが流れていることになる。

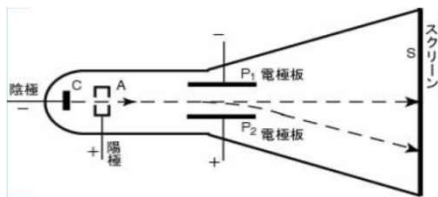
この放電管内を流れている何物かが陰極線と呼ばれるものである。この陰極線をつくる装置を, その発明者クルックス(イギリス: 1832-1919)にちなんで, クルックス管という。

陰極線の性質を調べるため, 下図のように, クルックス管の中に十字の板を置き, 管の反対側に蛍光物質のスクリーンを張っておくと, その上に影ができる。このことから, 陰極線は陰極から陽極へ向かって放射され, 直進する性質があることが分かった。



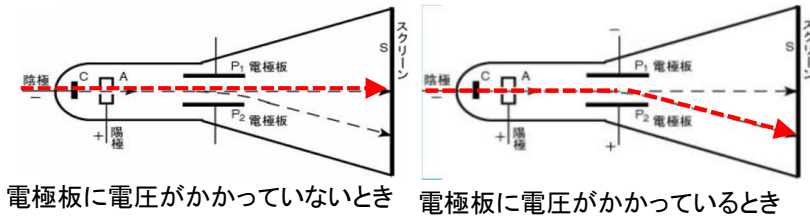
「陰極線の正体」

陰極線の正体が何であるか、J.J. トムソン (イギリス: 1856 ~ 1940) によって研究された(1897). J.J. トムソンが用いた実験装置の概要は下図のように、基本的にはクルックス管と同じ原理である。トムソンは、陰極から発射される陰極線はマイナスの電荷を帯びた同一粒子の集まり (粒子の束) ではないか、と推定した。



陰極から出たこの「粒子」は陽極に引っ張られて加速し、陽極の中央に開けられた孔を通して直進し、1対の電極板 (P1とP2) の間を通る。

電極板P1とP2に間に電圧がかかっていなければ、「粒子」はそのまま直進し、蛍光物質を塗布したスクリーンSにあたって中心点に小さなスポットを作る。上側の電極板P1がマイナス、下側の電極板P2がプラスになるように電圧をかけると、「粒子」は下に曲げられて、スポットは下方へ動く。しかし、スポットは大きく広がったり、ボケたりはしない。陰極線がマイナスの電荷を持ち、同一粒子からなるというトムソンの推定は正しかった。



「陰極線の比電荷」

トムソンは陰極線の実験装置で、陰極線の中の「粒子」の比電荷 e/m を測定した (e は「粒子」の電荷, m は質量). 電極板間に電場を加えることによって陰極線は下に曲がる (図A). そこで、図Bのように、さらに磁場を加えることによって、陰極線を上方に曲げて、電場がかかっていないときにスポットができる中心点に到達するようにした。

図 (A) 電場の効果

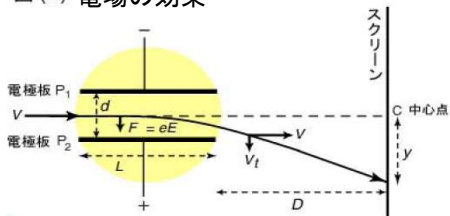
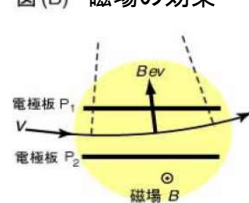


図 (B) 磁場の効果



電場と磁場の効果が相殺する条件から比電荷 e/m を求めることができる。トムソンは、陰極線中の「粒子」の比電荷を測定し、 $e/m = 1.76 \times 10^{11} \text{ C/kg}$ という値を得た。さまざまな条件のもとで、いつもほぼ一定の比電荷が得られることから、陰極線は同一粒子の集まりであることが分かった。

「陰極線の本性、電子の発見」

上で得られた陰極線中の「粒子」の比電荷の測定値を、ファラデーの電気分解の法則から求められた水素イオンの比電荷と比べてみる。水素イオンの比電荷は約 $9.65 \times 10^7 \text{ C/kg}$ である。

$$(\text{陰極線の比電荷}(e/m)) \div (\text{水素イオンの比電荷}) \\ = (1.76 \times 10^{11}) \div (9.65 \times 10^7) \doteq 1800$$

となる。水素イオンの原子量はほぼ1であるから、陰極線中の

「粒子」の質量が極めて軽く水素原子に比べて約 1/1800 であるか、あるいは陰極線の「粒子」が水素イオンより1800 倍も多くの荷電を運ぶことができることを意味する。J.J. トムソンは、後者はありそうにもないので、前者の考えを取り、陰極線の「粒子」は 最も軽い元素である水素より、さらに約 1/1800 軽い微小な粒子であると考え、これを電子 (electron) と名付けた。

「電子は原子の共通の構成要素」

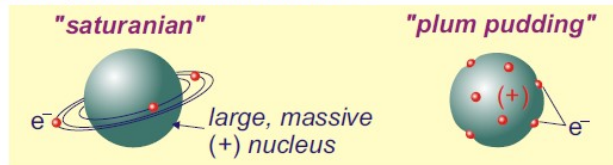
さまざまな実験の結果、陰極線の性質は放電管の中のガスの種類によらないことが分かった。また、金属を2000°C近くまで熱すると、おびただしい数の電子が放出されることも分かった。これは熱電子と呼ばれている。リチャードソン (イギリス: 1879-1959) はこの熱電子の詳しい研究をして、原子の中の電子が高熱によって激しく運動して原子から飛び出してくるのだと考え、電子が全ての原子に共通の構成要素の1つであることを確かめた。

「ミクロの世界」-その1, その2-

<http://www2.kutl.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld/MicroWorld.html>

(九州大学名誉教授 高田健次郎)

Two models had been put forth prior to Rutherford's experiments.
Which do you now think is "correct"?

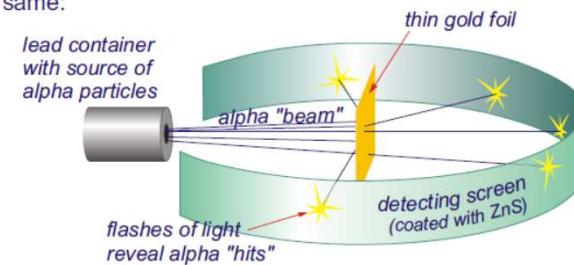


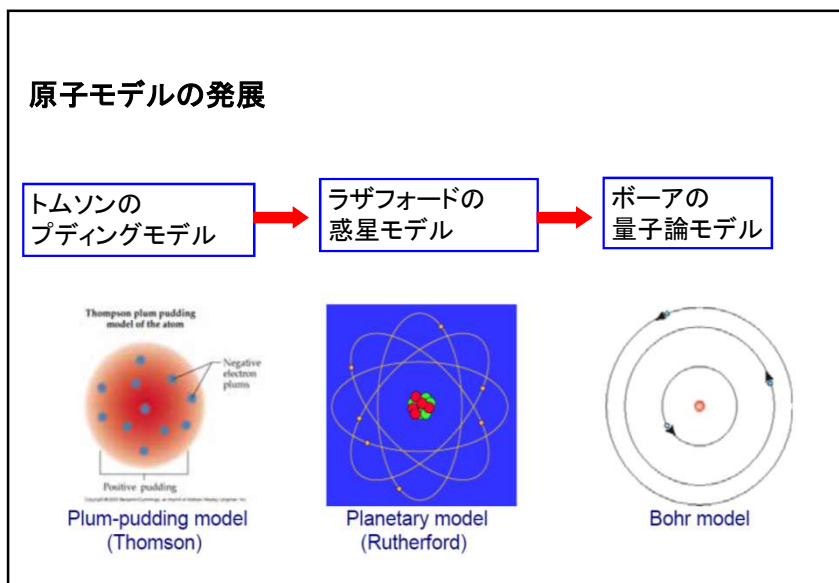
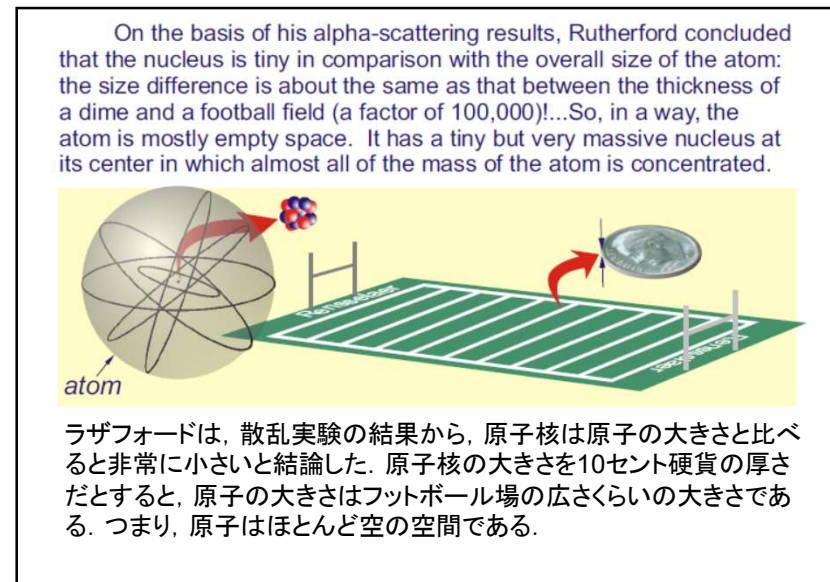
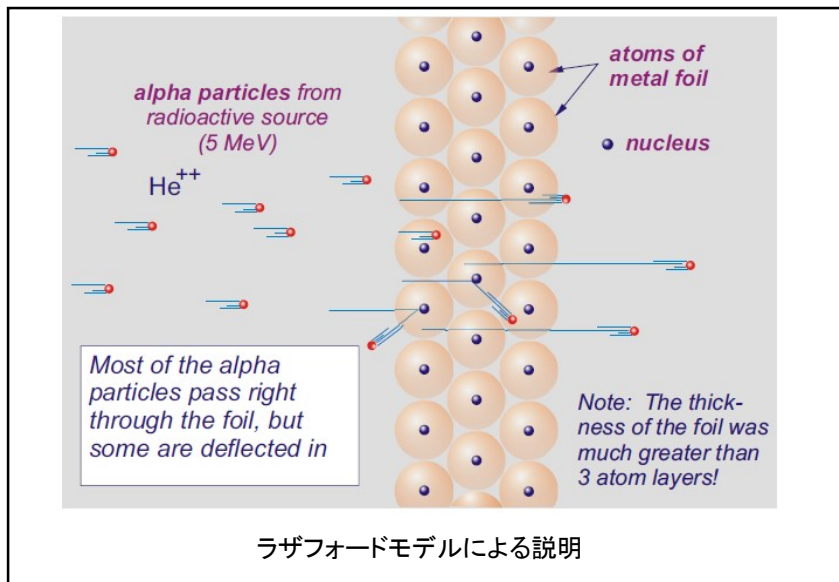
原子の中に電子が存在することが分かった。しかし、原子の構造については、トムソンらのプディングモデルか、ラザフォード・長岡半太郎らの惑星モデルのどちらが正しいのかという議論があったが、ラザフォードの散乱実験の結果、惑星モデルが正しいことが証明された。

ラザフォードの実験

α 粒子(ヘリウム原子核 He^{2+})を薄い金箔に照射すると、ほとんどは真っ直ぐ進むが、直角あるいはそれ以上の角度に散乱される α 粒子もあることが分かった。

Rutherford's experiment a little more sophisticated, but the principle is the same:





Na原子のボーアモデル

ラザフォードの惑星型モデルとボーアモデルは同じように見えるが、どこが違うのか。

- (1)ラザフォードモデルでは、原子核からの半径 r の値を規定する条件がないので任意の値を取ることができる。
- (2)古典電磁気学にしたがうと電子は電磁波を放射しながらエネルギーを失って行き原子核に落ち込んでしまうはずである。原子が安定に存在できることを保証していない。

ボーアは、プランクの量子仮説にしたがって、次の(1)量子条件、(2)振動数条件、(3)定常状態の仮定、を取り入れた。

- (1)電子の角運動量 $L = mvr$ はプランク定数 h の $n/2\pi$ 倍でなければならない。

$$mvr = nh/2\pi$$
- (2)エネルギー E_m の軌道から E_n の軌道($E_m > E_n$)へ遷移する際にエネルギー差と同じエネルギー $h\nu$ を持つ振動数 ν の電磁波を放出する。

$$h\nu = E_m - E_n$$

1・2 核種と同位体

原子核中の陽子数と中性子数で原子核の種類が決定され、これを**核種**という。

同じ数の陽子を持つ複数の核種をまとめて**元素**という。原子核の陽子数を**原子番号Z**という。陽子数Zと中性子数Nの和で核種の質量を指定でき、これを**質量数A**という。

$$A=Z+N$$

核種 ${}^A_Z E$ 水素の同位体: ${}^1H, {}^2H, {}^3H$

同一の元素で異なる質量数を持つ核種を**同位体**という。元素の同位体は、**安定同位体**と**放射性同位体**に分類できる。

原子量

元素の相対的質量を用いて原子量を定義する。 ${}^{12}C$ の原子1個の質量の1/12を原子質量単位(atomic mass unit, $1.660\,538\,86 \times 10^{-27}kg$, u)という。

$$\begin{array}{ll} {}^{12}C & 12\text{ u} \\ {}^{13}C & 13.003\,35\text{ u} \end{array}$$

天然の炭素は ${}^{12}C$ と ${}^{13}C$ の混合物であるため、その同位体比によって炭素の平均相対質量は12.011となる。これを炭素の原子量という。

質量欠損

原子の質量は、構成する中性子、陽子、電子の質量の和よりも小さい。この質量差を質量欠損 Δm という。

2個の陽子、2個の中性子、2個の電子の質量の和
 $6.697 \times 10^{-27}kg$

4He の質量
 $6.646 \times 10^{-27}kg$

質量欠損 Δm
 $0.051 \times 10^{-27}kg$

質量欠損は核を形成する際の結合エネルギーとして放出される。

質量Mの原子核がZ個の陽子とN個の中性子から成っていると
する。陽子と中性子の質量を M_p 、 M_n 、原子核の質量をMとすると、
質量欠損 Δm は常に正である($\Delta m > 0$)。

$$\Delta m = Z \cdot M_p + N \cdot M_n - M$$

質量mとエネルギー ΔE の間には

$$E = mc^2 \quad c \text{は光速}$$

の関係がある。すなわち、ばらばらに存在する陽子と中性子が原子核になるとき Δm に相当する $E = \Delta mc^2$ のエネルギーを放出し、核子はこのエネルギーによって結合し原子核を形成する。これを原子核の結合エネルギーという。Eを質量数Aで除した E/A は核子一個当りの平均結合エネルギーとなる。

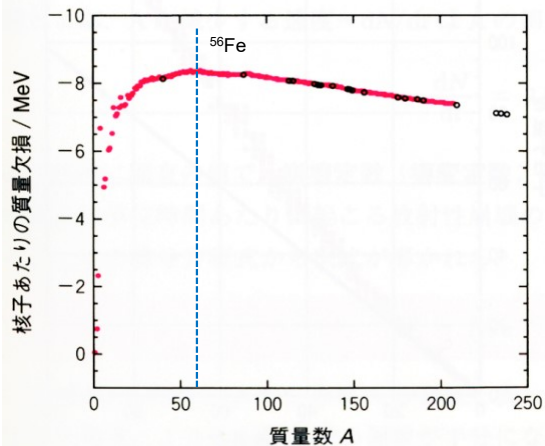
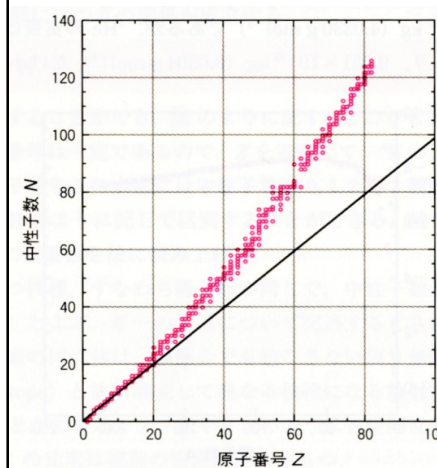


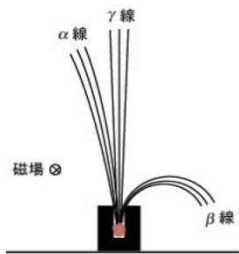
図1・1 核子あたりの質量欠損(●は安定核種、○は放射性核種を示す) 核子1つ当たりの質量欠損は ^{56}Fe が最大であり、最も安定な核種である。



- ①原子番号が大きくなると、中性子数が陽子数より多くなる。
 - ②原子番号が偶数のものは多くの同位体を持つが、奇数のものは同位体の数が少ない。
 - ③中性子数が偶数の核種の方が奇数の核種より多い。
- 原子核を形成する力は核力とよばれるが、原子核の安定化に中性子が欠かせないことが分かる。

図1・2 安定核種の陽子数Zと中性子数Nの関係。直線はZ=Nを表す。

1.3 放射性核種と放射性壊変(崩壊)



放射性壊変には、 α 壊変、 β 壊変、 γ 壊変の3種類があり、それぞれ α 線(α 粒子)、 β 線(電子線)、 γ 線(波長の短い電磁波)を放出する。

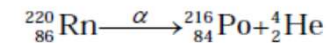
α 粒子は、ヘリウムの原子核であり、陽子2つと中性子2つとからなる重粒子である。

[高田健次郎九大名誉教授 ミクロの世界 - その1 - (原子の世界の謎)]

http://www2.kutl.kyushu-u.ac.jp/seminar/MicroWorld2/2Part1/2P17/alpha_decay.htm

(1) α 壊変(崩壊)

質量数Aが大きい核種の多くのものは過剰の質量を α 粒子の形で放射しようとする傾向がある。

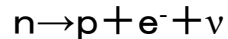


親核種	Z	N	A
娘核種	Z - 2	N - 2	A - 4
α 粒子	2	2	4

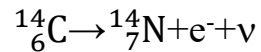
放射性核種Aが放射性壊変をして核種Bに変化したとき、Aを親核種、Bを娘核種という。

(2) β壊変

陽子数Zに比べて中性子数Nが過大な核では、原子核内で中性子nが陽子pに変わり、それに伴い電子e⁻とニュートリノνが核外に放射される。



例: ³H、¹⁴C、³²P、⁴⁰K



(3) γ壊変

原子核が励起状態から基底状態へ遷移するときに、エネルギーをγ粒子(光子)として放射する。α壊変、β壊変においても、多くの場合親核種からの遷移は娘核種の基底状態とともに励起状態へも起こる。したがってαおよびβ壊変でも同時にγ粒子の放射があることが普通である。

励起状態がしばらく存続し核異性体として分離できることがある。核異性体がより安定な状態へ変わることを核異性体転移(IT)という。

核異性体がγ粒子放射の代わりに壊変のエネルギーを軌道電子に与えてこの電子が放射されることがある。このことを内部転換といい、放射される電子を内部転換電子という。

壊変	放出されるもの	Z	N	A
α壊変	α粒子	Z-2	N-2	A-4
β壊変	電子	Z+1	N-1	A
γ壊変	電磁波	Z	N	A

放射性壊変の速度

放射性壊変はランダムに起こる現象であって、特定の原子に注目するときそれがいつ壊変するかは予言できず、ただある時間間隔Δtに壊変する確率pを知り得るのみである。多数(N個)の原子があった場合にはΔtに壊変する原子数-ΔNは、

$$-\Delta N = Np$$

と期待できる。Δtが小であればpはΔtに比例すると考えられる。比例定数をλとして、

$$p = \lambda \Delta t.$$

したがって、

$$-\Delta N = Np = N\lambda \Delta t$$

$$\Delta N / \Delta t = -\lambda N.$$

Δtを十分小さいとすると、

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta t} = \frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

放射性壊変の速度は存在する原子の数のみに比例する。比例定数λを壊変定数という。

減少の速度が、常にそのときの量に比例する場合、減少の過程は必ず指数関数となる。放射壊変はランダムに起こる現象であって、放射壊変の速度は存在する原子数のみに比例するから、比例定数を λ として、
$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

となる。 λ を壊変定数という。積分すると、

$$\log N = -\lambda t + C.$$

初期条件を $t=0$ のとき $N = N_0$ とすると

$$\log N_0 = C.$$

$$\log (N/N_0) = -\lambda t$$

$$N = N_0 \exp(-\lambda t)$$

指数関数の性質として、ある時間に N だったのが N/n に減少するのに要する時間間隔は N によらず常に等しい。特に半分になるのに要する時間 T を半減期という。

$$\text{半減期 } T = \frac{\log 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}$$

放射性壊変系列

放射性壊変して生成した核種が不安定な核種で、さらに壊変する場合がある。

天然に存在する ^{232}Th 、 ^{235}U 、 ^{238}U は α 壊変と β 壊変を繰り返して、最終的にそれぞれ、 ^{208}Pb 、 ^{207}Pb 、 ^{206}Pb になる。それぞれの壊変でできる核種の質量数は $4n$ 、 $4n+3$ 、 $4n+2$ になり、それぞれ、トリウム系列、アクチニウム系列、ウラン系列と呼ばれる。

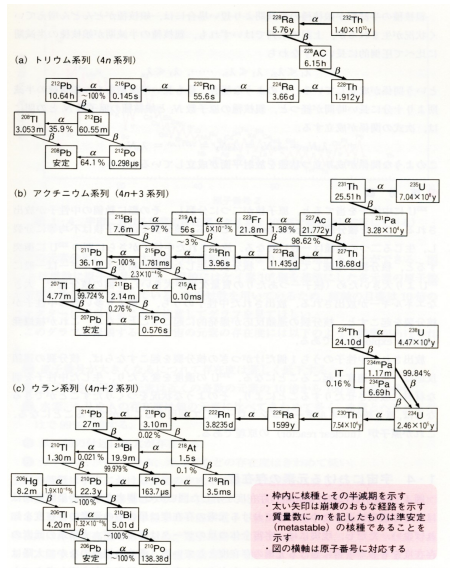
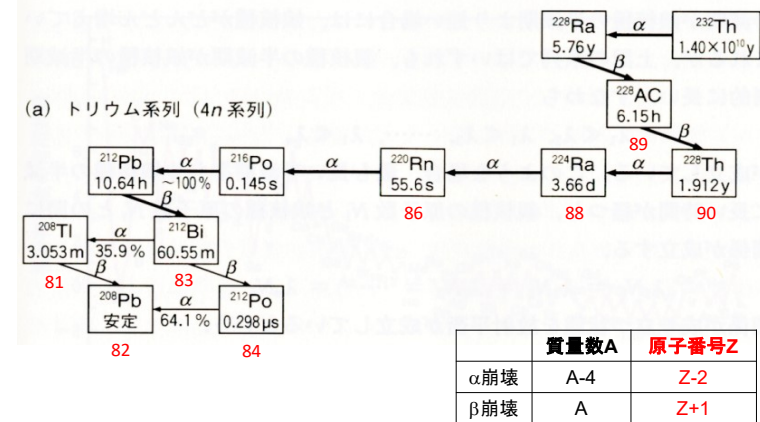
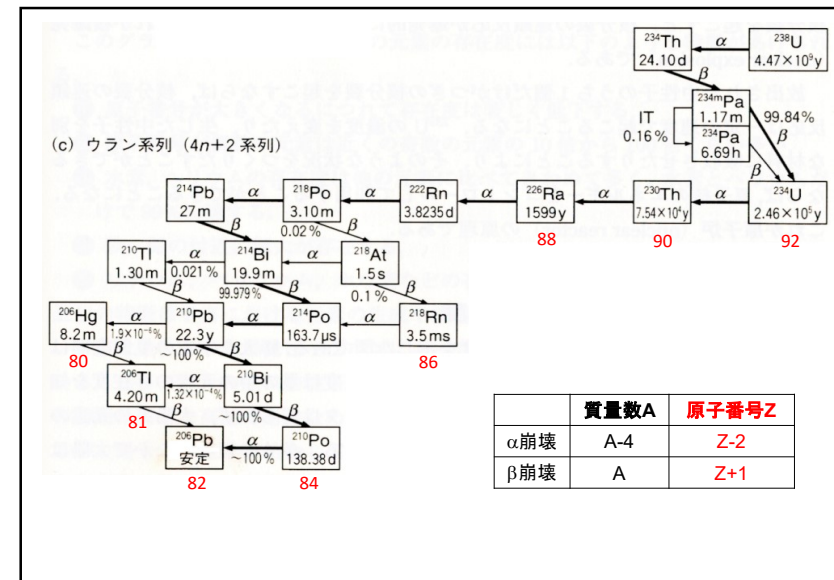
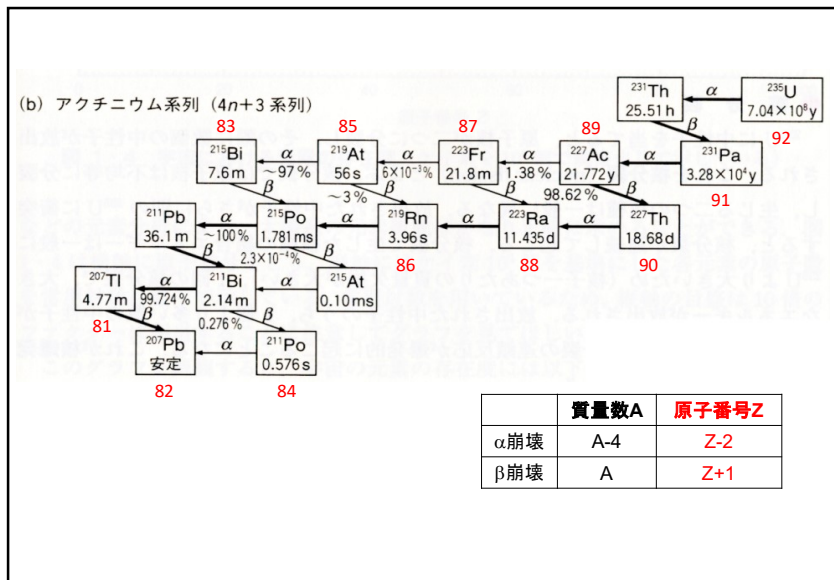


図 1.3 放射性壊変系列





原子核反応

原子核とほかの粒子との衝突によって起こる現象を核反応という。
特に、原子核の転換を伴う場合をいう。

A: 標的核
B: 生成核
a: 入射粒子
b: 放出粒子

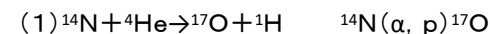
$A + a \rightarrow B + b$

$A(a, b)B$

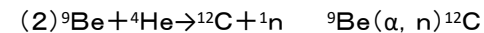
反応の前後では、

- (1) 電荷の和は一定。
- (2) 粒子の総数は一定。ただし、陽子、中性子のそれぞれの数は、その核反応に中間子が関与している場合は変わることもある。

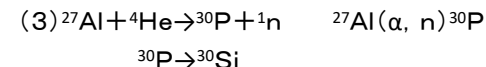
核反応の例



1919年ラザフォードが発見した反応で、初めて元素を人工変換した。



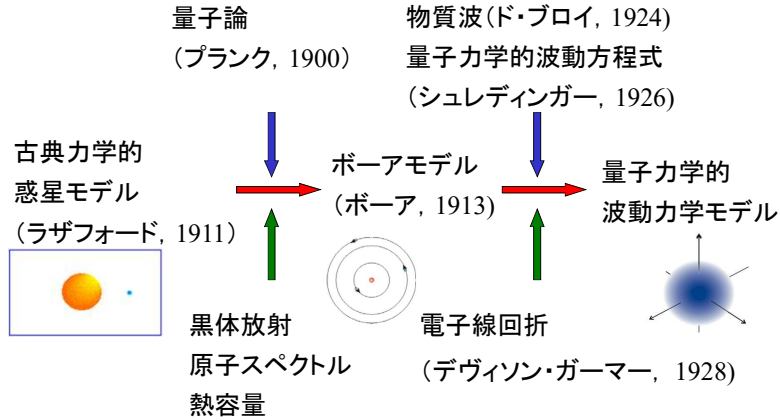
1932年チャドウィックが中性子を発見した反応である。



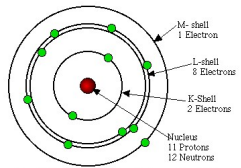
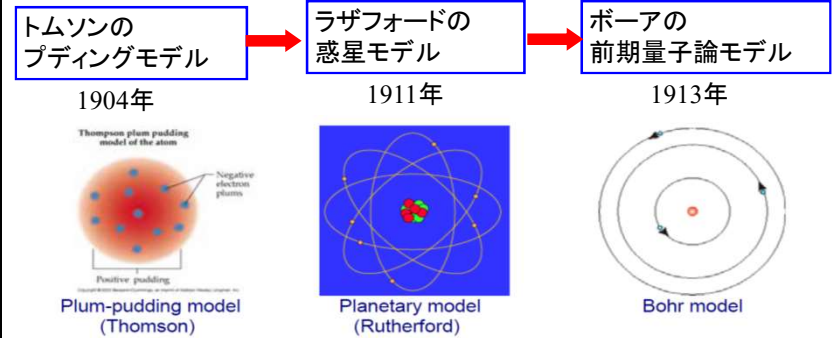
1934年F. ジョリオとI. ジョリオ＝キュリーが発見した反応であり、初めて人工放射性核種をつかった。

1・5 ボーアの水素原子モデル

量子力学的原子モデルへの発展



原子モデルの発展



Na原子のボーアモデル

ラザフォードの惑星型モデルとボーアモデルは同じように見えるが、どこが違うのか。

- (1)ラザフォードモデルでは、原子核からの半径 r の値を規定する条件がないので任意の値を取ることができる。
- (2)古典電磁気学にしたがうと電子は電磁波を放射しながらエネルギーを失って行き原子核に落ち込んでしまうはずである。原子が安定に存在できることを保証していない。

ボーアは、プランクの量子仮説にしたがって、2つの条件、(1)量子条件、(2)振動数条件、(3)定常状態の仮定、を取り入れた。

(1)電子の角運動量 $L = mvr$ はプランク定数 h の $n/2\pi$ 倍でなければならない。

$$L = mvr = nh/2\pi \quad n=1,2,3,\dots$$

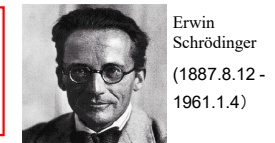
(2)エネルギー E_m の軌道から E_n の軌道($E_m > E_n$)へ遷移する際にエネルギー差と同じエネルギー $h\nu$ を持つ振動数 ν の電磁波を放出する。

$$h\nu = E_m - E_n$$

1・6 水素の波動関数

1926年に、オーストリアの物理学者シュレディンガーは、任意の系の波動関数を求めるための方程式を提出した。エネルギー E を持って、1次元で運動している質量 m の粒子に対する、時間に依存しないシュレディンガー方程式は次のとおりである。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$



Erwin Schrödinger (1887.8.12 - 1961.1.4)

ここで、 $V(x)$ はポテンシャルエネルギーである。はエイチバーあるいはエイチクロスと読み、プランク定数を 2π で割ったものである。物理学では振動数 ν ではなく、角振動数 ω (オメガ)を良く用いるが、 $\omega = 2\pi\nu$ であるから、 $E = h\nu = \hbar\omega$ である。

一般的な波動の式(1)は古典的波動方程式(2)を満たす。

$$\Psi(x, t) = A \sin \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right\} = A \sin \left\{ 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - vt \right) \right\} \quad (1)$$

波動方程式
$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} \quad (2)$$

(1)式を, (2)式の左右両辺に代入して等しいことを示せば良い。

$$\Psi(x, t) = A \sin \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right\} = A \sin \{ a(x - vt) \} \quad (3) \quad \text{とする.}$$

$$\text{(左辺)} = \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -a^2 A \sin \{ a(x - vt) \}$$

$$\text{(右辺)} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = -\frac{1}{v^2} (-av)^2 A \sin \{ a(x - vt) \} = -a^2 A \sin \{ a(x - vt) \}$$

∴ (左辺) = (右辺) 式(1)は古典的波動方程式(2)を満たす。

シュレディンガーは、古典力学の波動方程式に、ド・ブロイの物質波の概念を持ち込んで量子力学的波動方程式であるシュレディンガー方程式を導いた。

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

古典力学的
波動方程式

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

ド・ブロイの式

量子力学的
シュレディンガー波動方程式

(簡単のために1次元の波動方程式を示してある)

一般的な波動関数

$$\Psi(x, t) = A \sin \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right\}$$

xで2回微分する

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 A \sin \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right\} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \Psi(x, t)$$

ド・ブロイの式 $\lambda = \frac{h}{p}$
を代入する

$$= -\left(\frac{2\pi p}{h} \right)^2 \Psi(x, t) = -\left(\frac{p}{\hbar} \right)^2 \Psi(x, t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \Psi(x, t)$$

$$= \{E - V(x)\} \Psi(x, t)$$

$$\text{全エネルギー} E \text{は}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$$

$$\hat{H}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t)$$

時間に依存しない
シュレディンガー方程式

原子オービタルとそのエネルギー

(a) エネルギー準位

原子オービタルは原子内の電子に対する1電子波動関数である。
水素型原子オービタルは, n, l, m_l という3つの量子数で定義される。

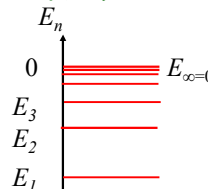
主量子数: $n = 1, 2, 3$

角運動量子数 (方位量子数): $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

磁気量子数: $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

エネルギー:

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$



エネルギーは主量子数 n だけで決まっている。
2sと2pオービタルのエネルギーは同じである。
3s, 3p, 3dオービタルでも同様である(多電子原子ではこれらのエネルギーは同じではない)。

水素型原子オービタルの1電子波動関数は、

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

(1) 角度部分
 θ と ϕ の関数

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = N e^{\pm i m_l \phi} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) \quad \text{: 球面調和関数}$$

$$P_l^{|m_l|}(\cos \theta) \quad \text{: ルジャンドル陪多項式}$$

(2) 動径部分
 r の関数

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l} \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^l L_{n-l}^l \left(\frac{\rho}{a_0}\right) e^{-\frac{\rho}{2a_0}} \quad \text{: 動径波動関数}$$

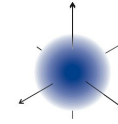
$$\rho = \frac{2Zr}{a_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

$$L_{n,l} \quad \text{: ラゲール陪多項式}$$

45

球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$

l	m_l	Y_{lm}	
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	s オービタル
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$	p オービタル
1	± 1	$\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	p オービタル
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	球面調和関数の規格化と直交性 $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$ ここで、クロネッカーの δ 関数は、 $\delta_{l'l} = \begin{cases} 0 & l' \neq l \\ 1 & l' = l \end{cases}$
2	± 1	$\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$	
2	± 2	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$	



46

第4の量子数であるスピン量子数 m_s は $\pm \frac{1}{2}$ である。

水素型原子の中の電子の状態を指定するためには、4つの量子数、つまり、 n, l, m_l, m_s の値を与えることが必要である。

また、電子のオービタル角運動量の大きさは $\sqrt{l(l+1)}$ であり、その任意の軸上の成分は m_l である。すなわち、 m_l は角運動量の z 成分の値を決める量子数である。座標軸は空間に固定されていない。電場や磁場をかけたときに自動的に空間軸が決まり、それを z 軸とする。つまり、 m_l は電場や磁場が原子にかかったときに重要な働きをする量子数である。

47

338

イオン化エネルギー

元素のイオン化エネルギー I は、その元素の原子の基底状態、すなわち最低エネルギー状態から電子を1個取り除くのに必要な最小のエネルギーである。

水素型原子のエネルギーは、量子数 n だけに依存し、次式で表される。

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} hcR_H \quad R_H: \text{リュードベリ定数}$$

水素原子では、 $Z = 1$ であるから、 $n = 1$ のときの最低エネルギーは、

$$E_1 = -hcR_H$$

したがって、電子を取り除くのに必要なイオン化エネルギー I は、

$$I = hcR_H$$

48

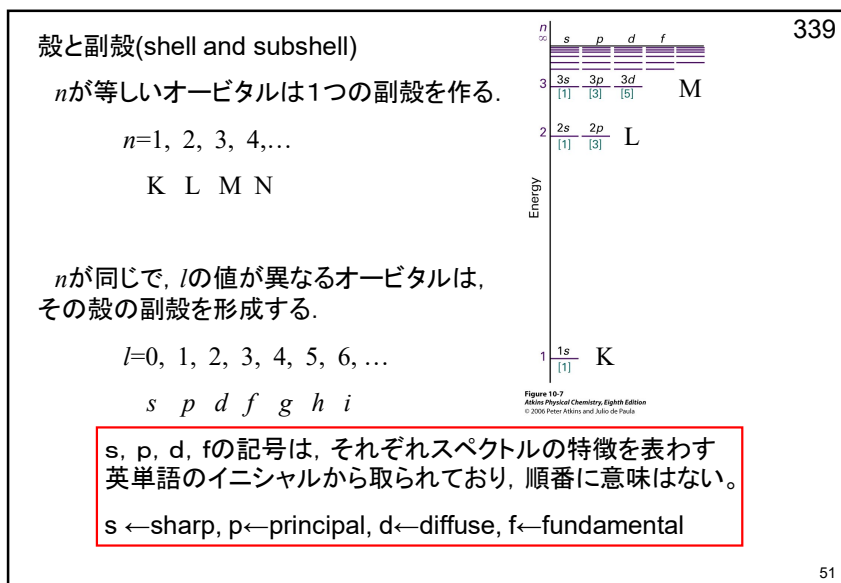
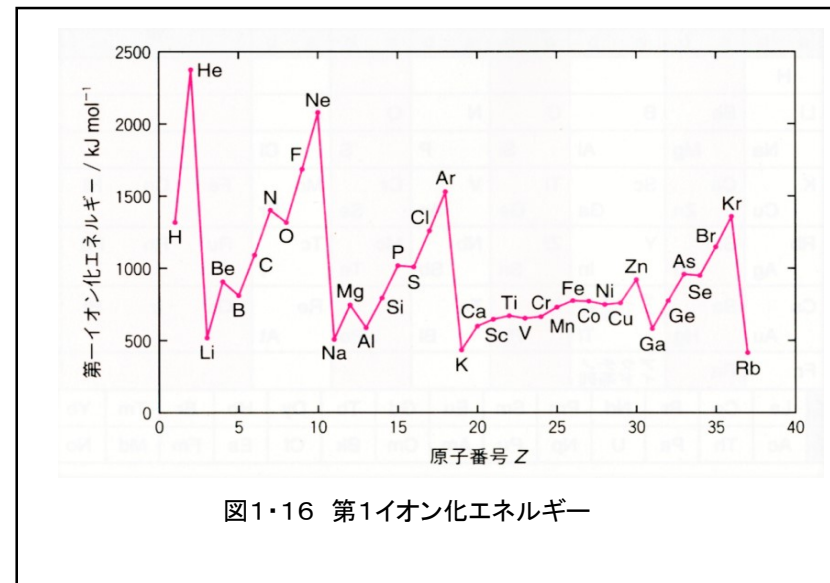
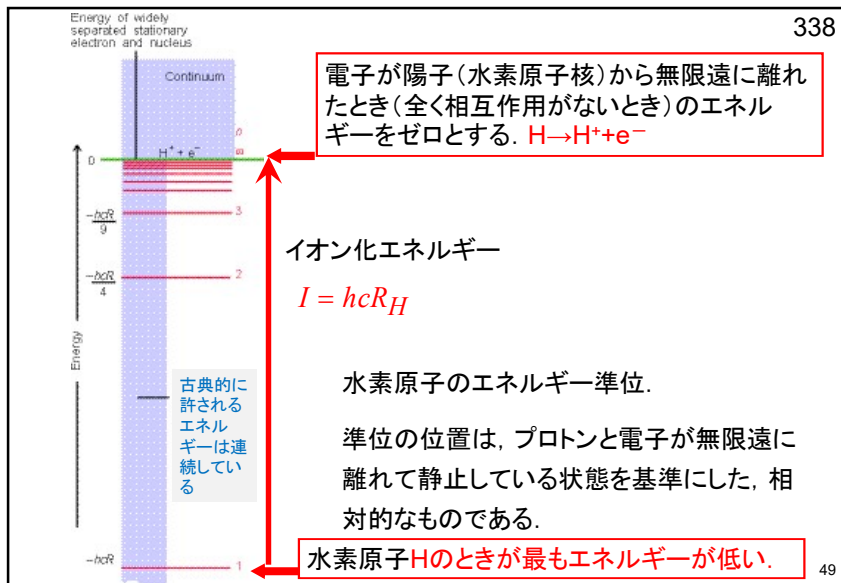
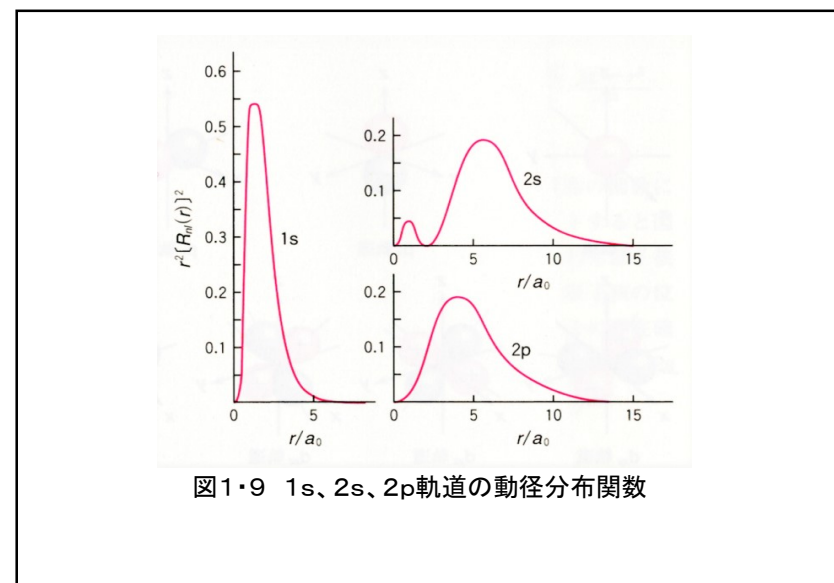
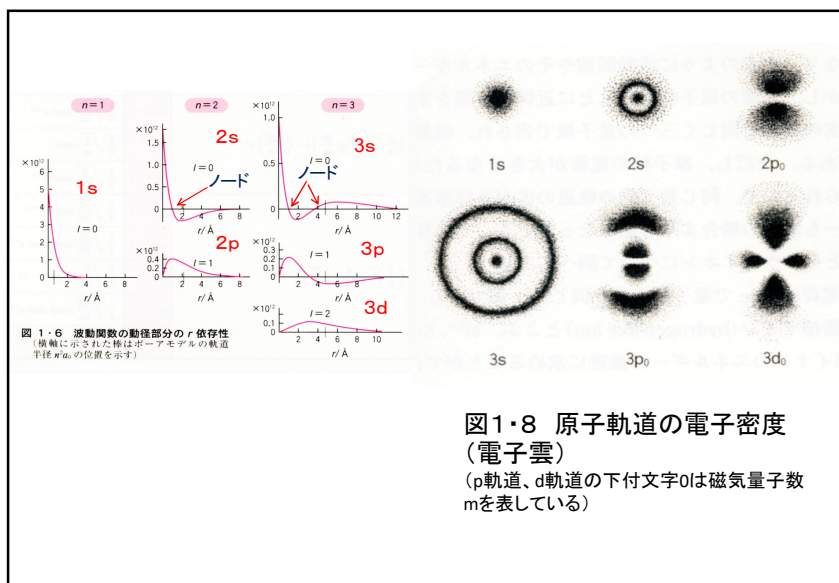
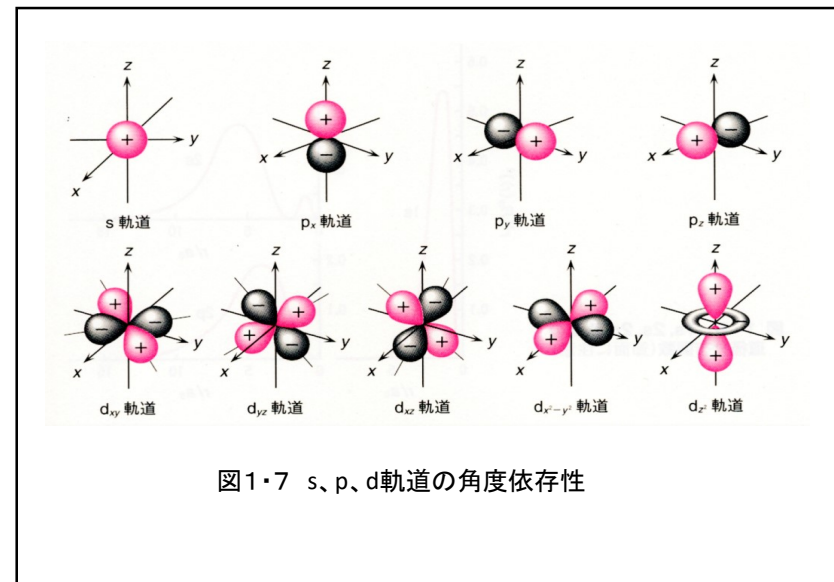
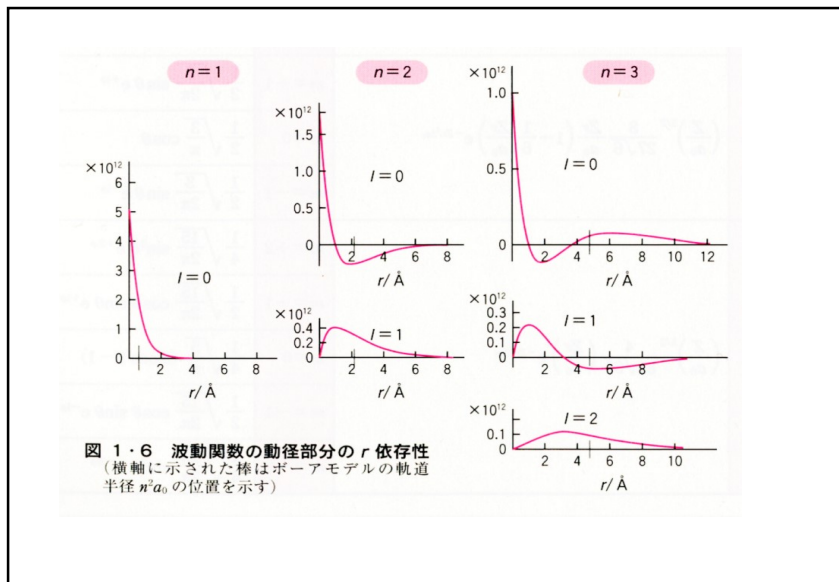


表 1・2 水素の原子軌道の動径部分と角度部分

	$R_{nl}(r)$	$Y_{lm}(\theta, \phi)$
1s	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$	$m=0$ $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$
2s	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$m=0$ $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$
		$m=+1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{+i\phi}$
2p	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}$	$m=0$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
		$m=-1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$
3s	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{3\sqrt{3}} \left\{1 - \frac{2}{3} \frac{Zr}{a_0} + \frac{2}{27} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right\} e^{-Zr/3a_0}$	$m=0$ $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$
		$m=+1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{+i\phi}$
3p	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{8}{27\sqrt{6}} \frac{Zr}{a_0} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/3a_0}$	$m=0$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
		$m=-1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$
3d	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$	$m=+2$ $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{+2i\phi}$
		$m=+1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{+i\phi}$
		$m=0$ $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
		$m=-1$ $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{-i\phi}$
		$m=-2$ $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$



10月13日 学生番号 氏名

(1)原子が、質量が小さく負電荷をもつ電子と、小さくて質量の大きな正電荷をもつ原子核から構成されることがどのような実験結果から導かれたか説明しなさい。

(2)本日の授業について、疑問、質問、意見等を書いてください。