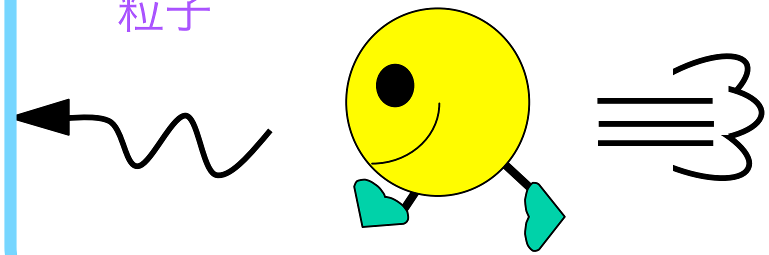
1-2.電子の運動（電子軌道）

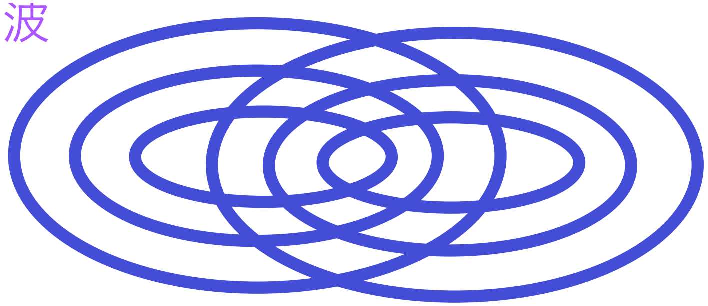
古典力学・・・粒子の運動

粒子



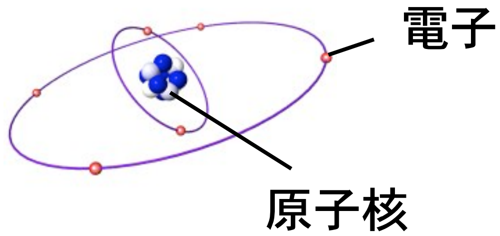
量子力学・・・波の運動

波



- 原子核に束縛された電子の波としての運動 ➡ 電子軌道

原子
10^{-10} m = 1 Å

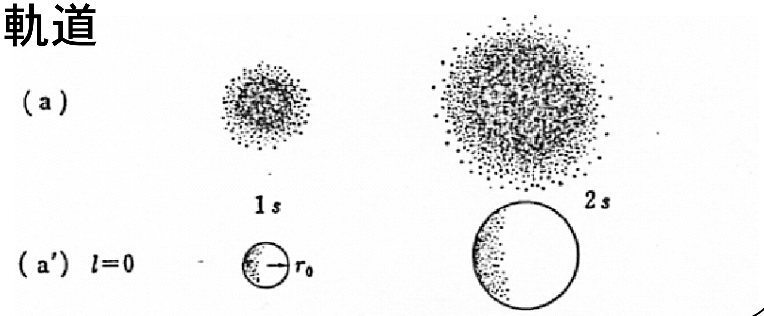


前に、
電子軌道をこう描いた！！

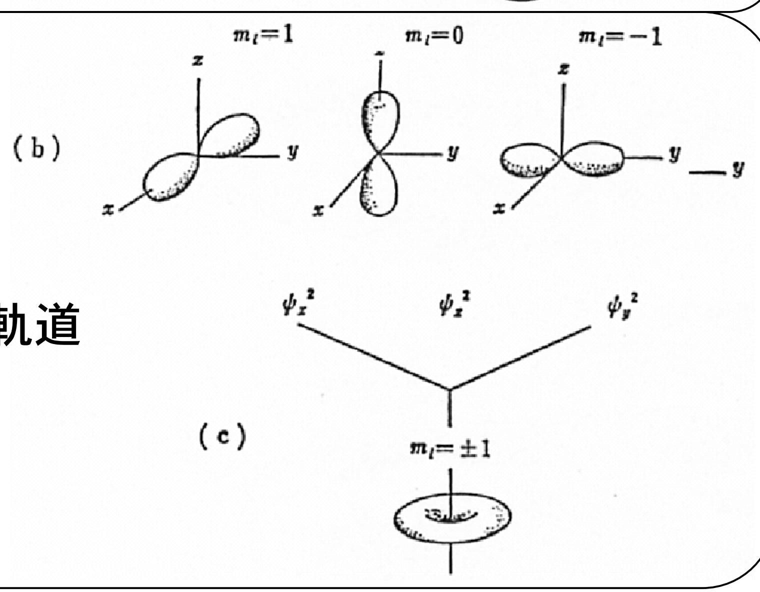
<u>実際の電子軌道</u>は、どんな形？

実は、、、、
こんなに色々な軌道
（電子の通り道）がある

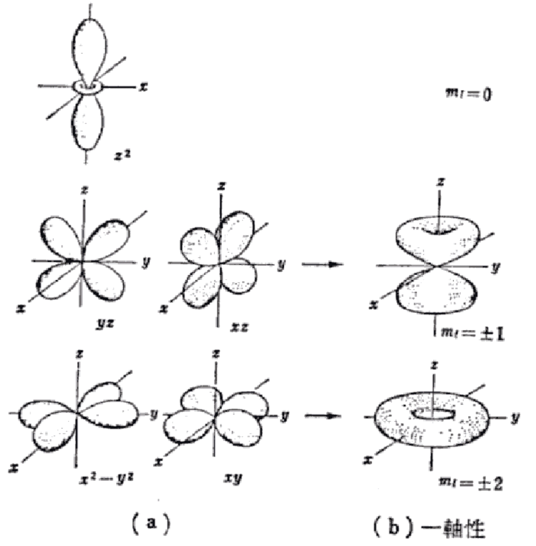
s 軌道



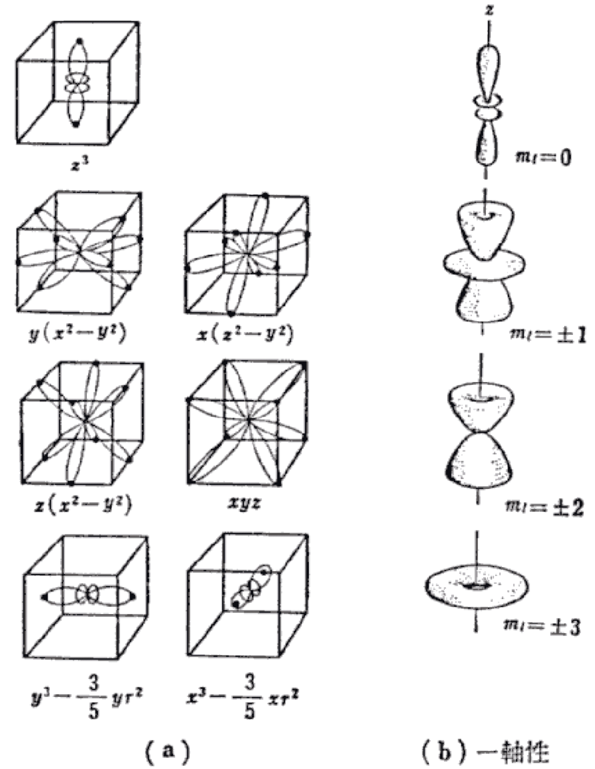
p 軌道



d 軌道



f 軌道



電子軌道を決める因子

電子軌道は、次の 3つの量子数 によって指定される。

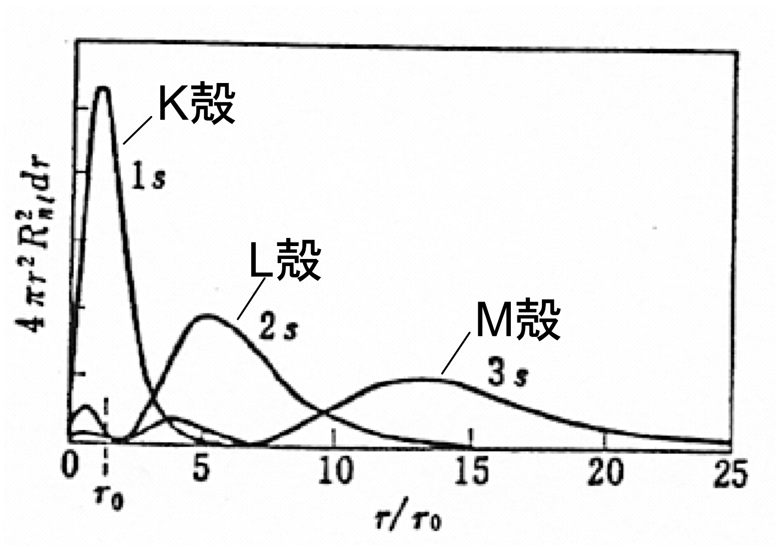
1.　主量子数　(principal quantum number)

軌道運動の空間的な広がりとエネルギー

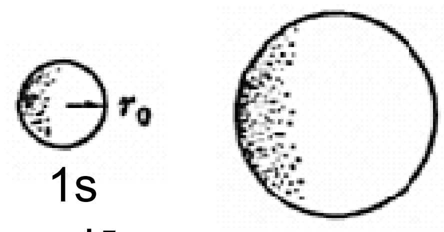
n　：n = 1，2，3・・・・・　　K，L，M，N殻

ex)　主量子数による電子軌道の広がりの違い　（s軌道の場合）

（1）



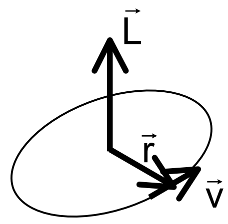
（2）



1s
K殻

2s
L殻

2. 方位量子数 (azimuthal quantum number)



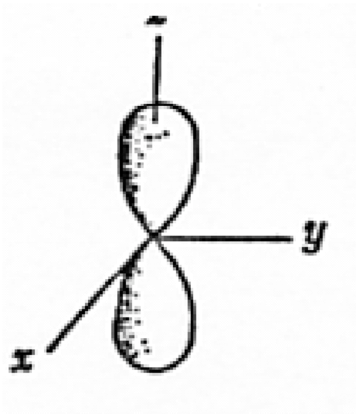
$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{v}$

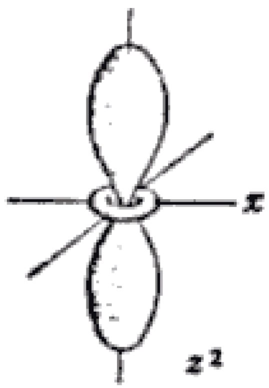
円運動に伴う
角運動量の定義

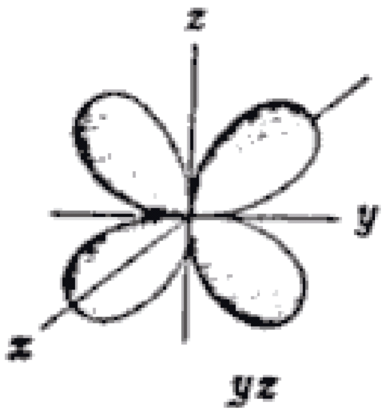
軌道運動の角運動量

$$\ell \quad : \quad \ell = 0\ ,\ 1\ ,\ 2\ , \cdots\cdots ,\ n\text{-}1$$

順番に、それぞれ、
s，p，d, f 軌道と呼ぶ







ℓ =0

s軌道

ℓ =1

p軌道

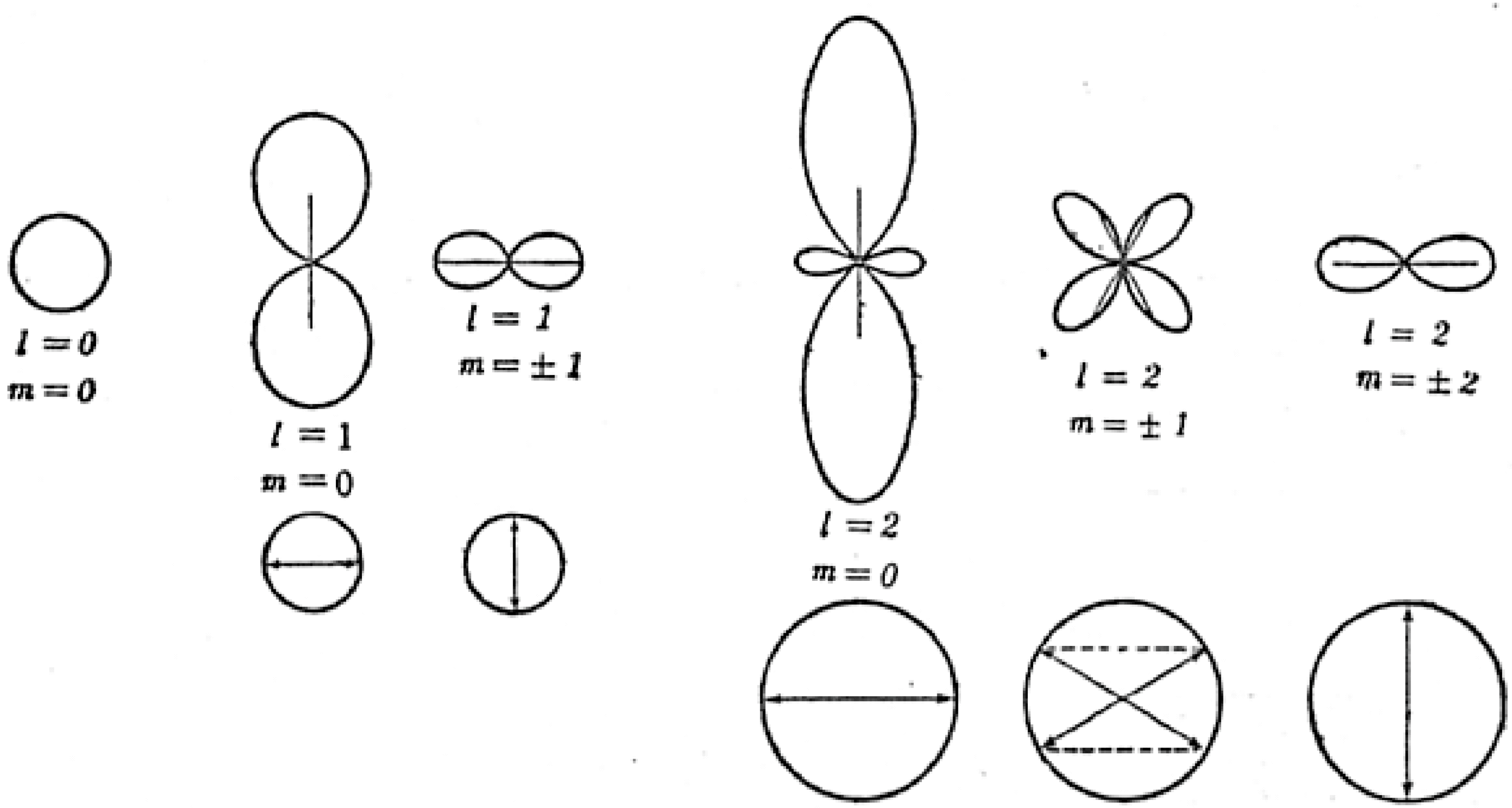
ℓ =2

d軌道

3. 磁気量子数　(magnetic quantum number)

外部から磁場をかけた時に、磁場方向に観測される軌道角運動量。

$$m:\ m = -\ell, -\ell+1, \cdots, 0, \cdots, \ell-1, \ell$$



軌道の数

1. 主量子数　n： n = 1 ， 2， 3・・・・・　　（エネルギーと広がり）
2. 方位量子数 ℓ： ℓ = 0， 1， 2，・・・・・， n-1　　（軌道運動の角運動量）
3. 磁気量子数 m： m = - ℓ ，- ℓ +1，・・・，0，・・・， ℓ -1， ℓ

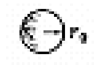
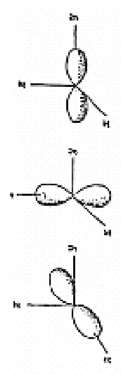
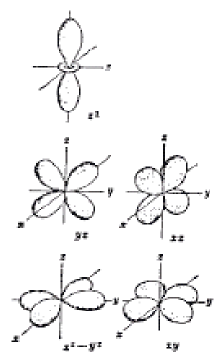
（磁場をかけた時に、磁場方向に観測される軌道角運動量）

n ＼ ℓ	0 (s)	1 (p)	2 (d)
1	m = 0		
2	m = 0	m = -1 , 0 , 1	
3	m = 0	m = -1 , 0 , 1	m = -2 , -1 , 0 , 1 , 2

したがって、軌道の数は、

1s　1個
2s　1個　　2p　3個
3s　1個　　3p　3個　　3d　5個となる。

ex)

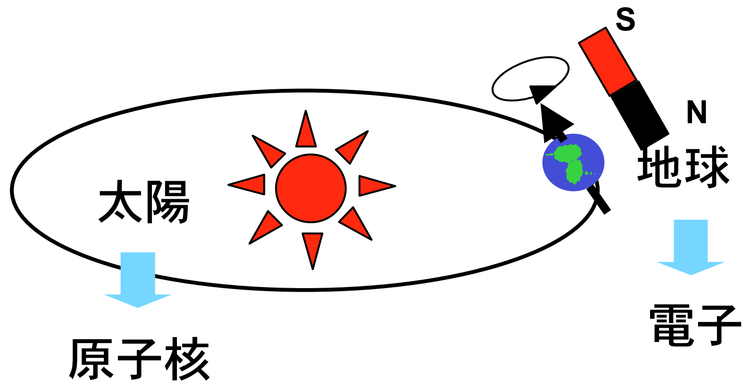




電子軌道については、以上に述べた３つの量子数で決まる。
物質の磁気的な性質を記述するために、もう一つ重要な量子数がある。

それは

4. スピン量子数 s $\left(= \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$

電子には惑星の自転に相当する運動があり、固有の角運動量 $\hbar s$ 、磁気モーメント μ_S を持つ



$$\mu_S = -g\mu_B s$$

g : g 値　（スピンについては、g = 2.0023 ）

μ_B: ボーア磁子という単位

$$= \frac{e\hbar}{2mc} = 0.927 \times 10^{-20} emu$$

e : 電荷 =電子素量 (1.602×10^{-19} C)
m: 質量 (9.109×10^{-31} kg)
c: 光速 (2.998×10^{8} m/s)
$\hbar$: プランク定数(1.055×10^{-34} Js)

ちなみに。。。。
核子もスピンを持っている。

核スピンを $\boldsymbol{I}$ として、核磁気モーメント μ_I は、（電子スピンと同様）

$$\mu_I = -g\mu_N \boldsymbol{I}$$

と書ける。

μ_N : 核磁子と呼ばれる磁気量の単位

$$= \frac{e\hbar}{2Mc} = \underbrace{\boxed{\frac{e\hbar}{2mc}}}_{\mu_B} \cdot \boxed{\frac{m}{M}} = \frac{1}{1836}\mu_B$$

M : 陽子の質量
（1.673×10^{-27} kg）
m : 電子の質量
（9.109×10^{-31} kg）

∴ μ_N は μ_B に比べて無視できるほど小さい。

⇨ 固体中の磁気的性質は、ほとんどの場合電子系よって決まる。

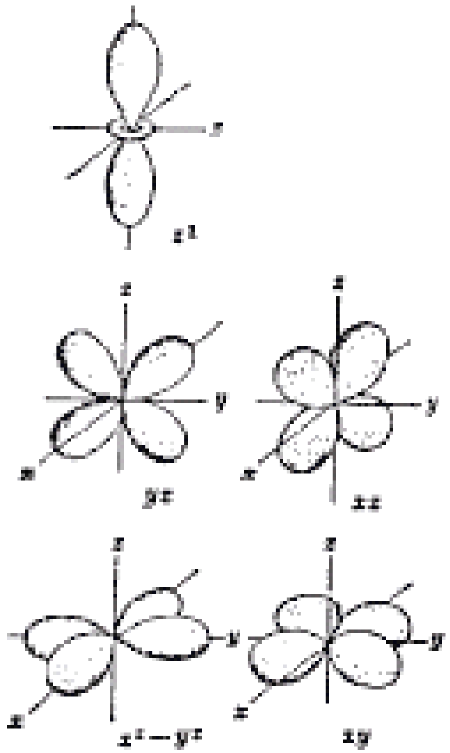
・各軌道への電子の詰め方

各軌道には、↑(up)　↓(down)　のスピンを持った２つの電子を詰めることができる

⇩

パウリの原理

(ex)　n=3, ℓ =2 の3d 軌道には
5つの電子軌道があり、
↑5個、↓5個の合計10個の電子を
入れることができる。



それじゃぁ～

Q.　n と ℓ が決まった場合、スピンを含めて

$2\times(2\ell+1)$ の状態にどのように電子を詰めていくか？

↑↓　軌道の数

n

$\ell = 0, \cdots\cdots, n-1$

$m = \underbrace{-\ell, -\ell+1, \cdots\cdots, 0, \cdots\cdots, \ell-1, l}_{2\ell+1\text{個}}$

電子の詰め方のルール

★ フントの規則

静電的なポテンシャルを下げるため、
波動関数の重なりが少なくなるように

① 電子スピンがパウリの排他律に反しない限り、
全スピン**S**($\mathbf{S}=\sum_i s_i$)が最大になるように

② ①を満たした上で、さらに**L** ($\mathbf{L}=\sum_i m_i$)が最大

直感的解釈

(1)スピンによる電子磁石間の静磁的エネルギーを低くするため、
Sが大きくなるとフント結合 $\left(J\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\right)$ が大きくなる。

(2)**L**が大きくなる波動関数（電子軌道）の組み合わせの方が
波動関数の重なりが少なく、エネルギーが低い。

フントの規則の続き…

原子の磁気モーメント

全角運動量 = 軌道磁気モーメント + スピンによる磁気モーメント

$\mathbf{J}$ $\qquad\qquad$ $\mathbf{L} = \sum_i m_i$ $\qquad\qquad$ $\mathbf{S} = \sum_i s_i$

③ 全角運動量 $\mathbf{J}$ は

詰め込む電子の数が、軌道数より少ない場合 (less than half) $\mathbf{J} = |\mathbf{L} - \mathbf{S}|$

多い場合 (more than half) $\mathbf{J} = |\mathbf{L} + \mathbf{S}|$

ex $\quad$ 3d $\quad$ 軌道数 5個

- e 3個・・・$\mathbf{J} = |\mathbf{L} - \mathbf{S}|$
- e 8個・・・$\mathbf{J} = |\mathbf{L} + \mathbf{S}|$

宿題

Cr^{3+} ($3d^3$)
Fe^{3+} ($3d^5$)
Ni^{3+} ($3d^7$) について、**L** , **S** , **J** の大きさを求める。

求め方　　1sに電子2個入っている

$$Cr^{3+}\,(\underline{1s^2}\ \underline{2s^2}\ \underline{2p^6}\ \underline{3s^2}\ \underline{3p^6}\ 3d^3) = Cr^{3+}\,(3d^3)$$

閉殻は無視

なぜなら・・・

3 p　　1　0　-1　ℓ

S = 0
L = 0

閉殻の電子は
磁性に寄与しないので無視!!

3d³ だけ考えればO.K.

3d　軌道5個
電子3個

パウリの原理と、フントの規則を用いて
3個の電子を軌道に入れてゆく。