余談 その2

- “スペクトルは分子からの手紙“
  - 分子はスペクトルという形で、我々に向けて情報を発信しています。スペクトルは、いわば分子からの手紙ということができます。このスペクトルを解読すれば、分子の世界の様子が手にとるようにわかるのです。

分子の不思議 -Wonder World of Molecules-
http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/struct/invitation/wonderworld.html

3.4. 水素様原子のオービタル

- 水素様原子の波動関数ψは、
  “軌道（orbit）上を運動する電子の量子状態を定めるもの”(Bohr)
  →軌道関数、またはorbital（オービタル）
- オービタル：$\psi(r,\theta,\phi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)$
  - 確率解釈に従う
  - $|\psi|^2$ は電子の存在確率に比例
    電子は、空間的な広がりを持って分布する
    ぼんやりしている

3.4.水素様原子のオービタル

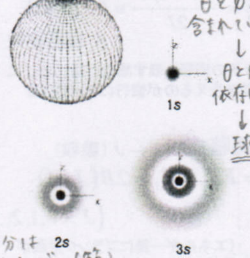
水素原子の軌道 1

a. s軌道

ミクロの世界では電子はまるで「雲」のように分布する。これを電子密度分布、電子雲あるいは電子軌道という。方位量子数 $l=0$ の場合の軌道はs軌道と呼ばれる。
この時の波動関数ψを図式化すると球である。x-z平面での電子密度分布を見ると量子数(1, 0, 0)1sでは円形状に、2s, 3sではリンク状に拡がる分布となっている。
2s以上の軌道では電子の存在が許されない領域が途中にある。

$$\psi_{1s}=R_{10}\times Y_{00}\propto e^{-Zr/a_B}$$

θとφが含まれていない
↓
θとφに依存しない
↓
球状



白い部分は確率ゼロ（節）

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

3.4.水素様原子のオービタル

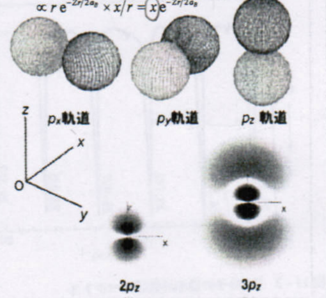
水素原子の軌道 3

c. p軌道

方位量子数 l =1 の場合の軌道をp軌道という。方位量子数l=1では磁気量子数m=−1, 0, 1であるからp軌道には3つの軌道がある。
p軌道にはx, y, z それぞれの軸に沿って2つの球を串刺しにした形をしている。それぞれp_x, p_y, p_z軌道という。

$$\psi_{2p_x}=R_{2,1}\times Y'_{1,1}$$
$$\propto r\,e^{-Zr/2a_B}\times x/r=x\,e^{-Zr/2a_B}$$

正：赤（うすい）
負：青（こい）



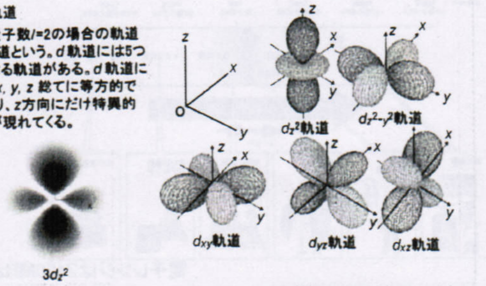
図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

3.4. 水素様原子のオービタル

水素原子の軌道 4

d. d軌道

方位量子数l=2の場合の軌道をd軌道という。d軌道には5つの異なる軌道がある。d軌道になるとx, y, z 総てに等方的でなくなり、z方向にだけ特異的軌道が現れてくる。



図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

3.4. 水素様原子のオービタル

- まとめ

n l m	波動関数	n l m	波動関数
1 0 0	$\psi_{1s}=(\pi a_0^3)^{-1/2}e^{-r/a_0}$	3 1 ±1	$\psi_{3px}=\frac{1}{81}(2/\pi a_0^3)^{1/2}(6-r/a_0)(r/a_0)e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\phi$
2 0 0	$\psi_{2s}=(32\pi a_0^3)^{-1/2}(2-r/a_0)e^{-r/2a_0}$		$\psi_{3py}=\frac{1}{81}(2/\pi a_0^3)^{1/2}(6-r/a_0)(r/a_0)e^{-r/3a_0}\sin\theta\sin\phi$
2 1 0	$\psi_{2pz}=(32\pi a_0^3)^{-1/2}(r/a_0)e^{-r/2a_0}\cos\theta$	3 2 0	$\psi_{3dz^2}=\frac{1}{81}(6\pi a_0^3)^{-1/2}(r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}(3\cos\theta-1)$
2 1 ±1	$\psi_{2px}=(32\pi a_0^3)^{-1/2}(r/a_0)e^{-r/2a_0}\sin\theta\cos\phi$	3 2 ±1	$\psi_{3dxz}=\frac{1}{81}(2/\pi a_0^3)^{1/2}(r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\theta\cos\phi$
	$\psi_{2py}=(32\pi a_0^3)^{-1/2}(r/a_0)e^{-r/2a_0}\sin\theta\sin\phi$		$\psi_{3dyz}=\frac{1}{81}(2/\pi a_0^3)^{1/2}(r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\theta\sin\phi$
3 0 0	$\psi_{3s}=\frac{1}{81}(3\pi a_0^3)^{-1/2}(27-18r/a_0+2r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}$	3 2 ±2	$\psi_{3dx^2-y^2}=\frac{1}{81}(2\pi a_0^3)^{-1/2}(r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}\sin^2\theta\cos2\phi$
3 1 0	$\psi_{3pz}=\frac{1}{81}(2/\pi a_0^3)^{1/2}(6-r/a_0)(r/a_0)e^{-r/3a_0}\cos\theta$		$\psi_{3dxy}=\frac{1}{81}(2\pi a_0^3)^{-1/2}(r^2/a_0^2)e^{-r/3a_0}\sin^2\theta\sin2\phi$

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

$\cos\theta=\frac{z}{r}$ などを用いてもう一度デカルト座標に変換することで、オービタルの形が見えてくる。