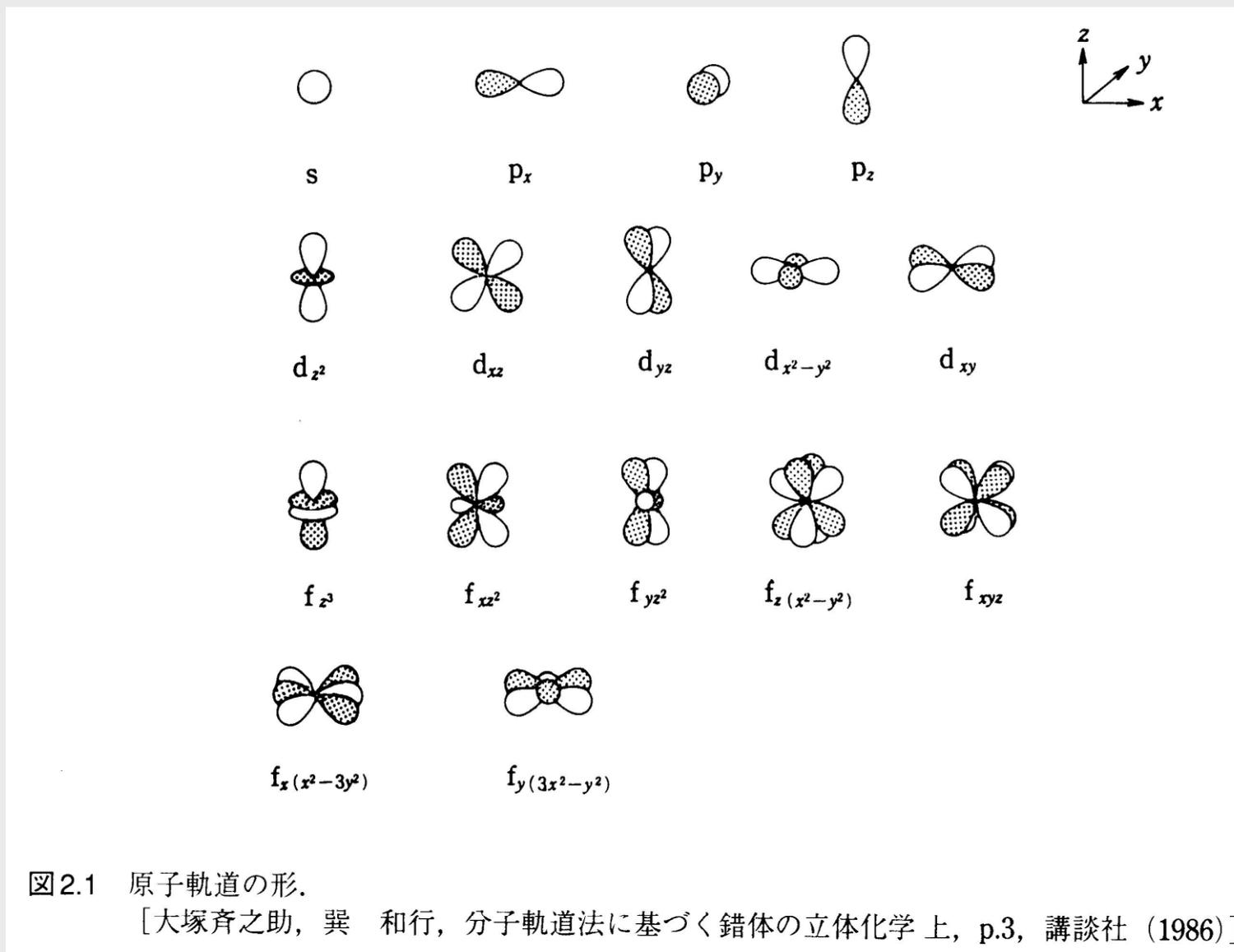


s, p, d, f 軌道の形



s, p, d, f 軌道

族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
周期																				
1	1 H 1s ¹																	2 He 1s ²		
2	3 Li 2s ¹		4 Be 2s ²												5 B 2p ¹	6 C 2p ²	7 N 2p ³	8 O 2p ⁴	9 F 2p ⁵	10 Ne 2p ⁶
3	11 Na 3s ¹		12 Mg 3s ²		← d遷移元素 →										13 Al 3p ¹	14 Si 3p ²	15 P 3p ³	16 S 3p ⁴	17 Cl 3p ⁵	18 Ar 3p ⁶
4	19 K 4s ¹	20 Ca 4s ²	21 Sc 4s ² 3d ¹	22 Ti 4s ² 3d ²	23 V 4s ² 3d ³	24 Cr 4s ¹ 3d ⁵	25 Mn 4s ² 3d ⁵	26 Fe 4s ² 3d ⁶	27 Co 4s ² 3d ⁷	28 Ni 4s ² 3d ⁸	29 Cu 4s ¹ 3d ¹⁰	30 Zn 4s ² 3d ¹⁰	31 Ga 4p ¹	32 Ge 4p ²	33 As 4p ³	34 Se 4p ⁴	35 Br 4p ⁵	36 Kr 4p ⁶		
5	37 Rb 5s ¹	38 Sr 5s ²	39 Y 5s ² 4d ¹	40 Zr 5s ² 4d ²	41 Nb 5s ¹ 4d ⁴	42 Mo 5s ¹ 4d ⁵	43 Tc 5s ² 4d ⁵	44 Ru 5s ¹ 4d ⁷	45 Rh 5s ¹ 4d ⁸	46 Pd 5s ⁰ 4d ¹⁰	47 Ag 5s ¹ 4d ¹⁰	48 Cd 5s ² 4d ¹⁰	49 In 5p ¹	50 Sn 5p ²	51 Sb 5p ³	52 Te 5p ⁴	53 I 5p ⁵	54 Xe 5p ⁶		
6	55 Cs 6s ¹	56 Ba 6s ²	57 La 6s ² 5d ¹	72 Hf 6s ² 5d ²	73 Ta 6s ² 5d ³	74 W 6s ² 5d ⁴	75 Re 6s ² 5d ⁵	76 Os 6s ² 5d ⁶	77 Ir 6s ² 5d ⁷	78 Pt 6s ¹ 5d ⁹	79 Au 6s ¹ 5d ¹⁰	80 Hg 6s ² 5d ¹⁰	81 Tl 6p ¹	82 Pb 6p ²	83 Bi 6p ³	84 Po 6p ⁴	85 At 6p ⁵	86 Rn 6p ⁶		
7	87 Fr 7s ¹	88 Ra 7s ²	89 Ac 7s ² 6d ¹	104	105	106	107	108	109											
					58 Ce 6s ²	59 Pr 6s ²	60 Nd 6s ²	61 Pm 6s ²	62 Sm 6s ²	63 Eu 6s ²	64 Gd 6s ²	65 Tb 6s ²	66 Dy 6s ²	67 Ho 6s ²	68 Er 6s ²	69 Tm 6s ²	70 Yb 6s ²	71 Lu 6s ²		
					5d ⁰ 4f ²	5d ⁰ 4f ³	5d ⁰ 4f ⁴	5d ⁰ 4f ⁵	5d ⁰ 4f ⁶	5d ⁰ 4f ⁷	5d ¹ 4f ⁷	5d ⁰ 4f ⁹	5d ⁰ 4f ¹⁰	5d ⁰ 4f ¹¹	5d ⁰ 4f ¹²	5d ⁰ 4f ¹³	5d ⁰ 4f ¹⁴	5d ¹ 4f ¹⁴		
					90 Th 7s ²	91 Pa 7s ²	92 U 7s ²	93 Np 7s ²	94 Pu 7s ²	95 Am 7s ²	96 Cm 7s ²	97 Bk 7s ²	98 Cf 7s ²	99 Es 7s ²	100 Fm 7s ²	101 Md 7s ²	102 No 7s ²	103 Lw 7s ²		
					6d ² 5f ⁰	6d ¹ 5f ²	6d ¹ 5f ³	6d ¹ 5f ⁴	6d ⁰ 5f ⁶	6d ⁰ 5f ⁷	6d ¹ 5f ⁷	6d ⁰ 5f ⁹	6d ⁰ 5f ¹⁰	6d ⁰ 5f ¹¹	6d ⁰ 5f ¹²	6d ⁰ 5f ¹³	6d ⁰ 5f ¹⁴	6d ¹ 5f ¹⁴		
	← f遷移元素 →																			

図2.5 原子の最外殻電子配置.

電子殻 と 原子軌道

電子殻	n	原子軌道
K殻	1	1s
L殻	2	2s 2p
M殻	3	3s 3p 3d
N殻	4	4s 4p 4d 4f
O殻	5	5s 5p 5d 5f 5g
P殻	6	6s 6p 6d 6f 6g 6h
Q殻	7	7s 7p 7d 7f 7g 7h 7i

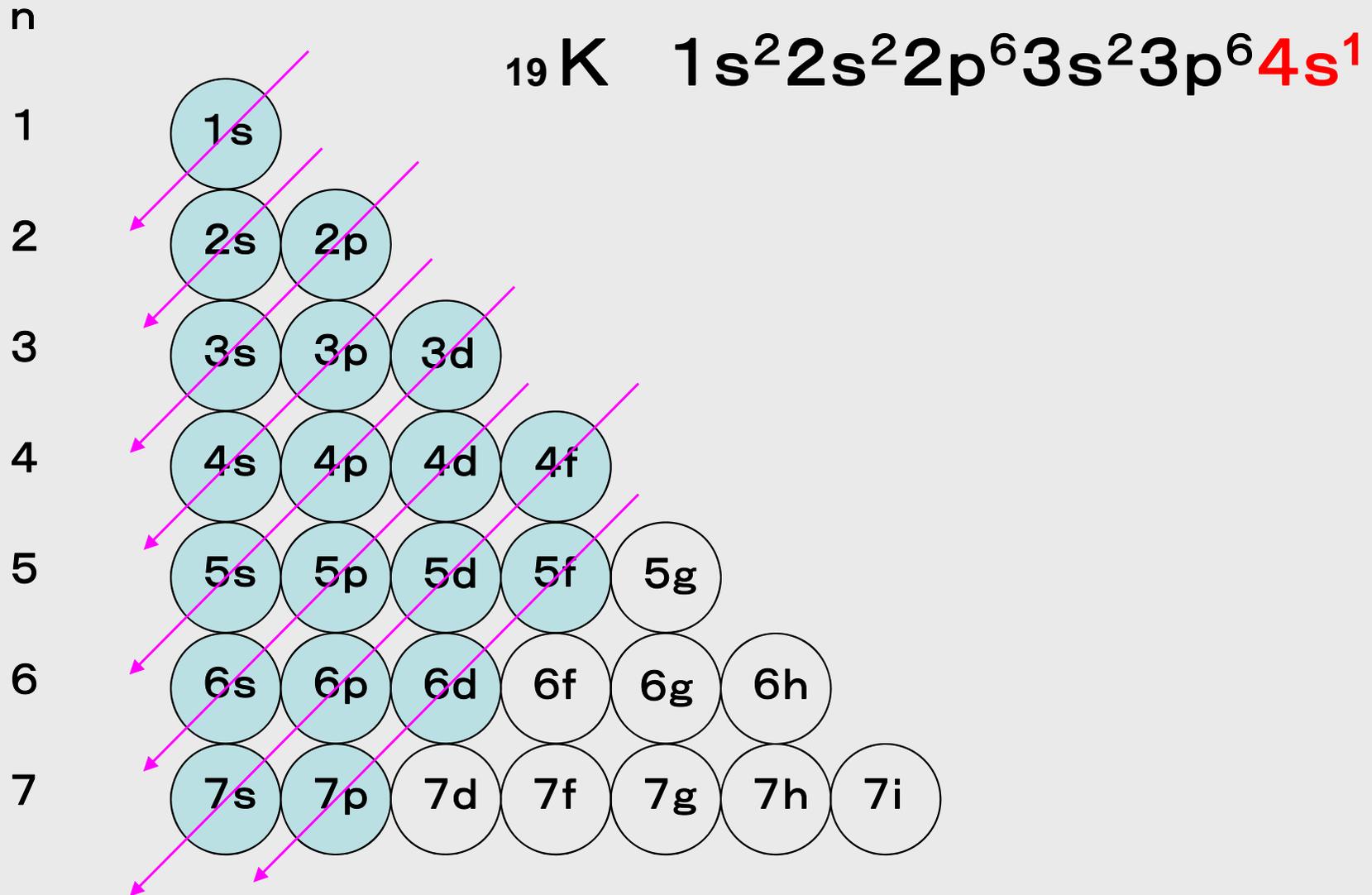
軌道 の 最大収容電子数

軌道の種類	方位量子数	軌道の数	最大収容電子数
	l	$2l+1$	$2(2l+1)$
s	0	1	2
p	1	3	6
d	2	5	10
f	3	7	14
g	4	9	18
h	5	11	22
i	6	13	26

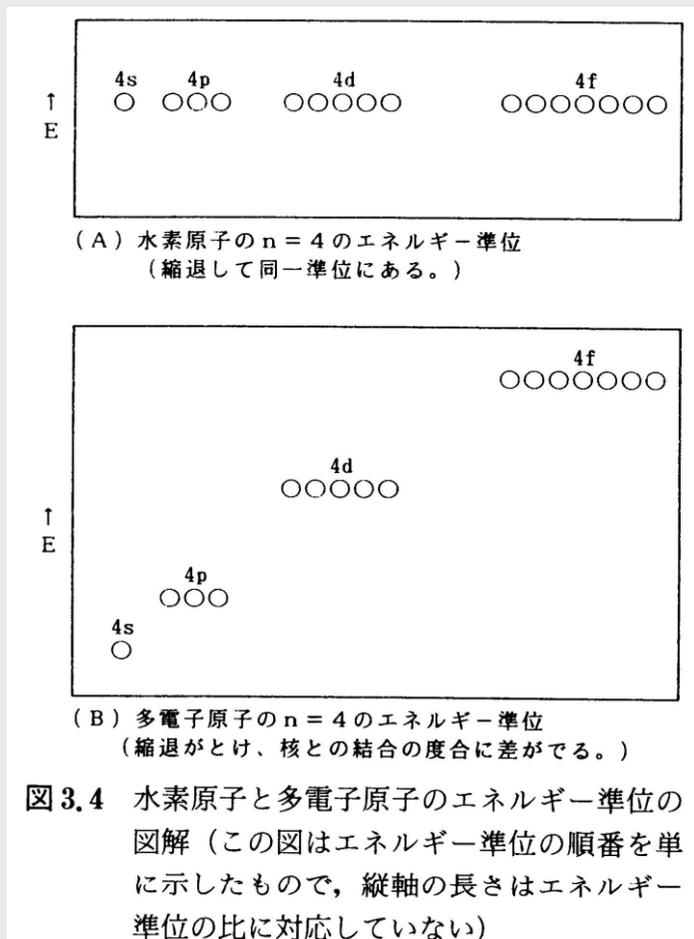
電子殻 の 最大収容電子数

電子殻	主量子数	軌道	最大収容電子数
	n		$2n^2$
K	1	s	$2 = 2 \cdot 1^2$
L	2	s, p	$2 + 6 = 8 = 2 \cdot 2^2$
M	3	s, p, d	$2 + 6 + 10 = 18 = 2 \cdot 3^2$
N	4	s, p, d, f	$2 + 6 + 10 + 14 = 32 = 2 \cdot 4^2$
O	5	s, p, d, f, g	$2 + 6 + 10 + 14 + 18 = 50 = 2 \cdot 5^2$
P	6	s, p, d, f, g, h	$2 + 6 + 10 + 14 + 18 + 22 = 72 = 2 \cdot 6^2$
Q	7	s, p, d, f, g, h, i	$2 + 6 + 10 + 14 + 18 + 22 + 26 = 98 = 2 \cdot 7^2$

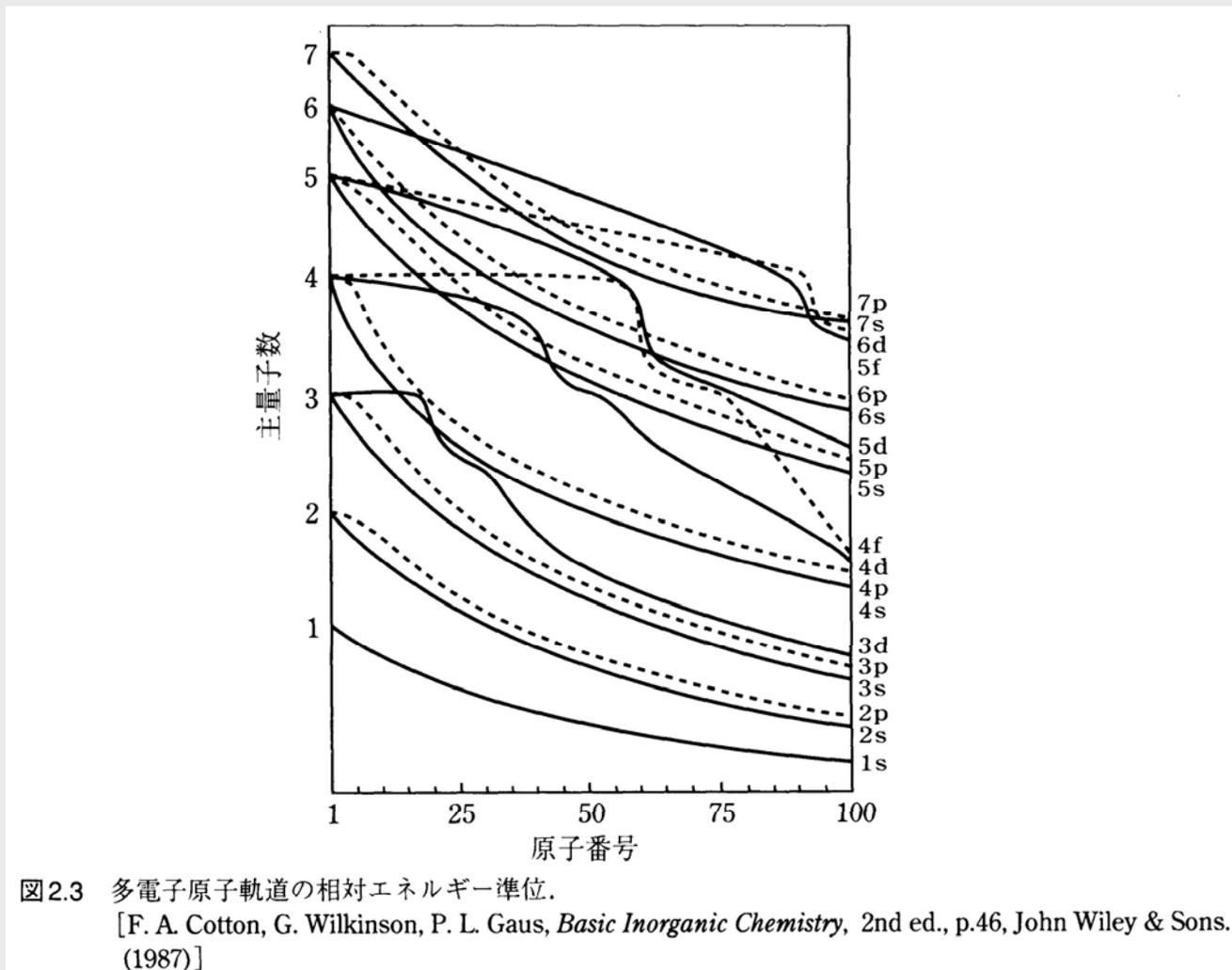
原子軌道への電子の詰まり方



原子軌道のエネルギー準位



佐々木義典・服部豪夫・小松優・掛川一幸・
岩館泰彦著『基本化学シリーズ9
基礎無機化学』1997, 朝倉書店, p.42.



福田豊・海崎純男・北川進・伊藤翼編『詳説 無機化学』
1996, 講談社サイエンティフィック, p.15.

電子配置図

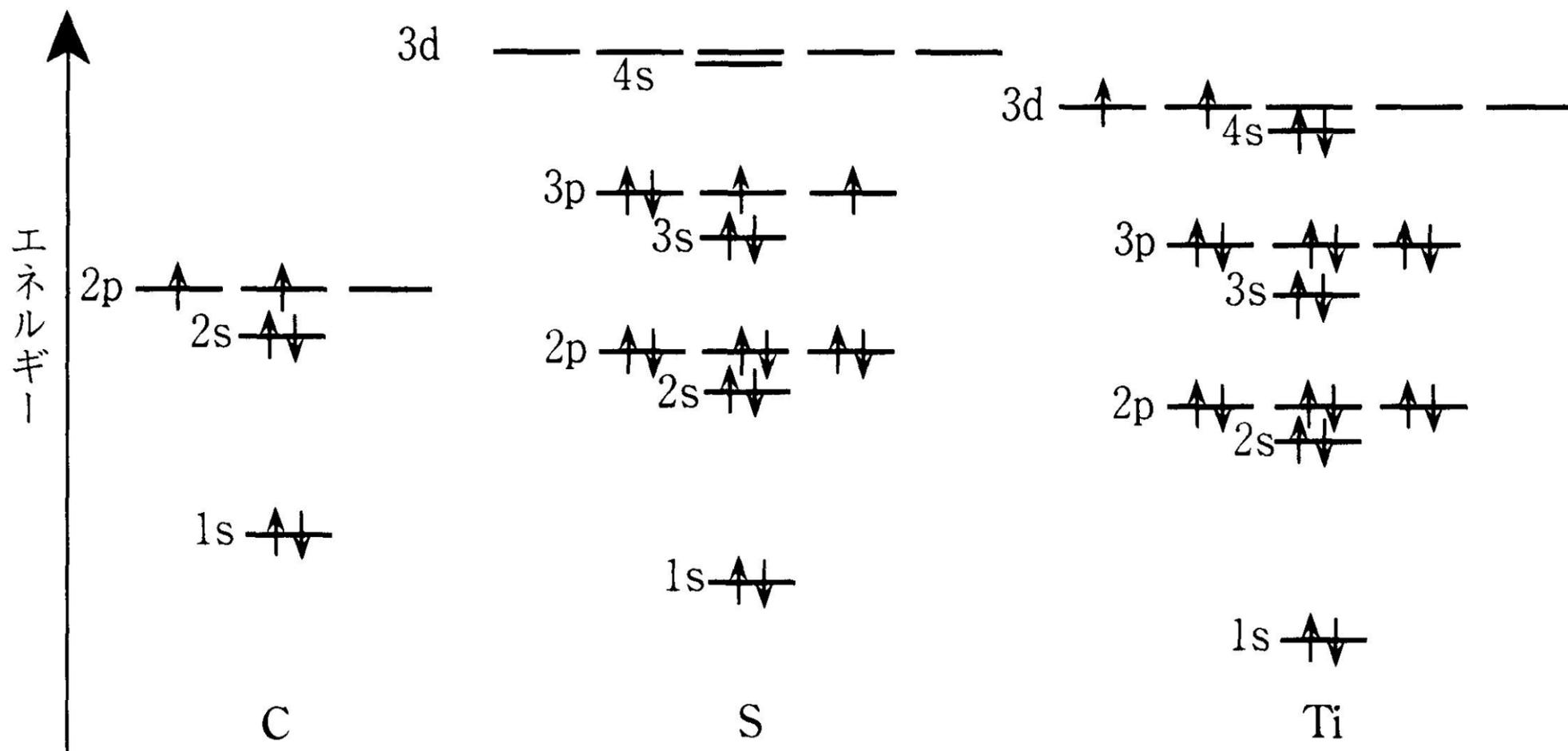
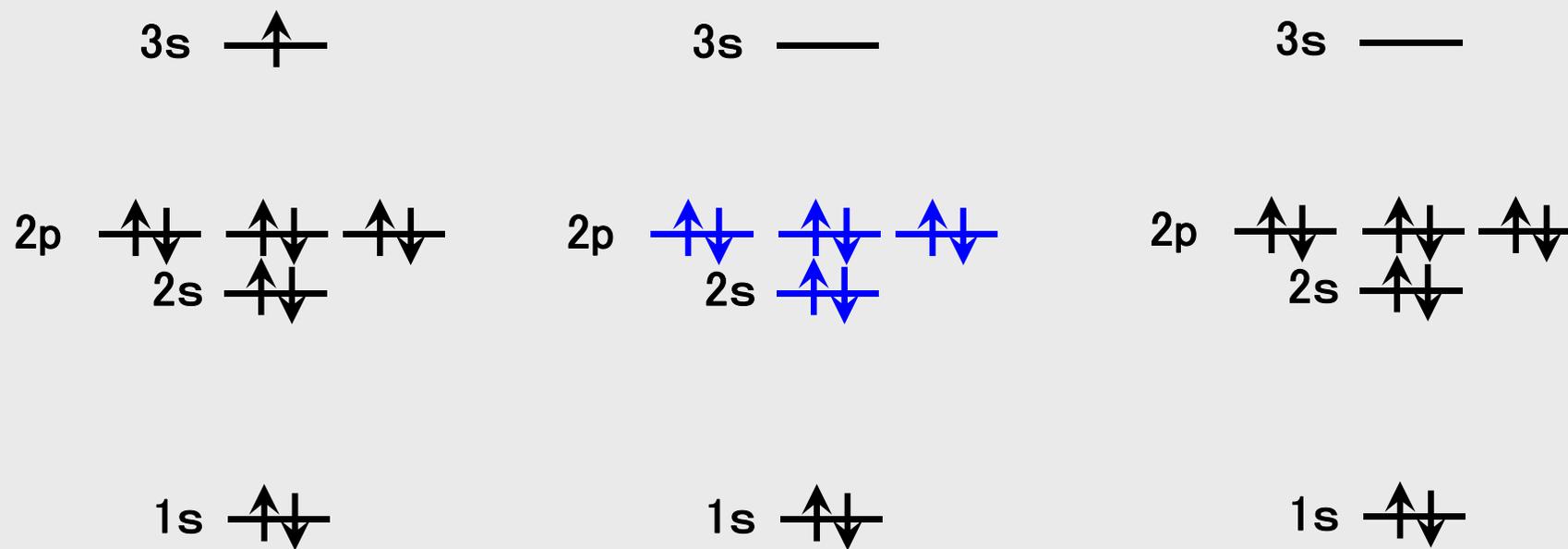


図2.4 炭素原子，硫黄原子，チタン原子の電子配置図.

原子 と イオン Na

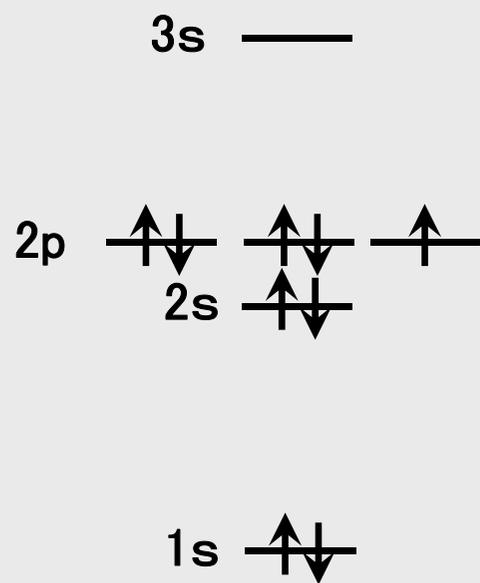


Na

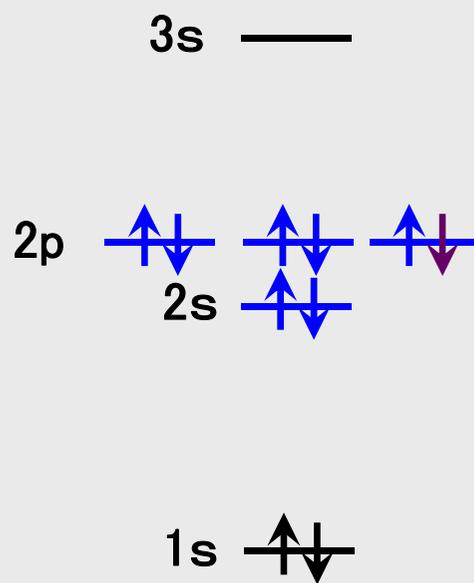
Na⁺

Ne

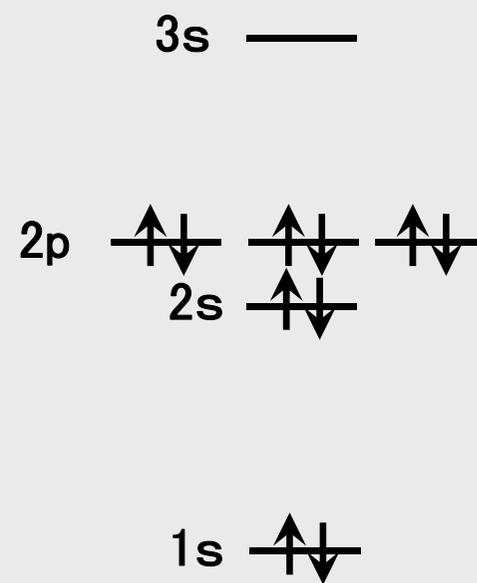
原子 と イオン F



F



F⁻



Ne

電子の粒子性と波動性

粒子

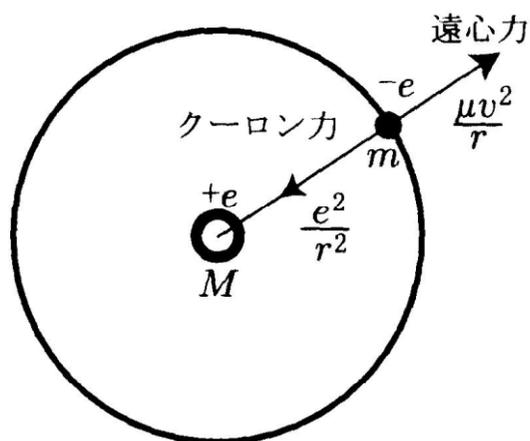
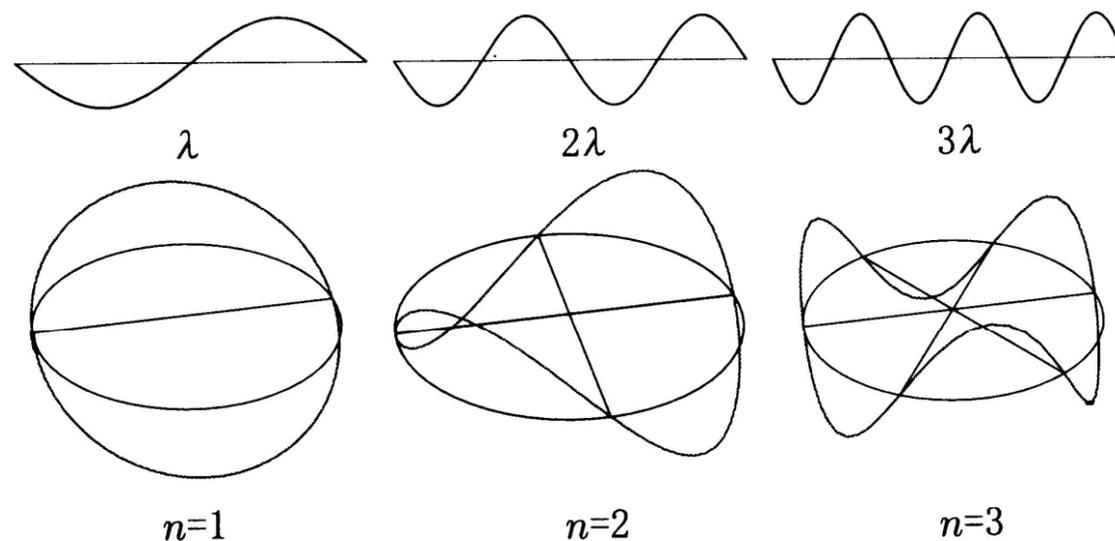


図 1.2 ボーアの水素原子モデル

ド・ブロイの物質波



$$2\pi r = n\lambda : \text{円周の長さ} = \text{波長の整数倍}$$

図 1.3 ボーアの量子条件の解釈

波動関数 と 量子数

$H\psi = E\psi$ シュレーディンガー方程式 H : ハミルトン演算子 (ハミルトニアン)
 E : エネルギー値

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot \chi_{l,m}(\theta, \phi)$$

波動関数 動径部分 ・ 角部分

量子数	名称	取り得る値	取り得る値の数
n	主量子数	$n = 1, 2, 3, \dots$	
l	方位量子数	$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$	n 個
m	磁気量子数	$m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$	$(2l+1)$ 個

量子数 と 軌道の波動関数

表 2.3 水素原子の波動関数

量子数			軌道	波動関数(ψ)
n	l	m		
1	0	0	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	0	2s	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
3	0	0	3s	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
2	1	0	2p _z	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta$
2	1	+1	2p _x	// $\sin\theta \cos\phi$
2	1	-1	2p _y	// $\sin\theta \sin\phi$
3	2	0	3d _{z²}	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} \left(\sqrt{3}\cos^2\theta - \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$
3	2	+1	3d _{xz}	// $\sin 2\theta \cos\phi$
3	2	-1	3d _{yz}	// $\sin 2\theta \sin\phi$
3	2	+2	3d _{x²-y²}	// $\sin^2\theta \cos 2\phi$
3	2	-2	3d _{xy}	// $\sin^2\theta \sin 2\phi$

a_0 : ボーア半径.

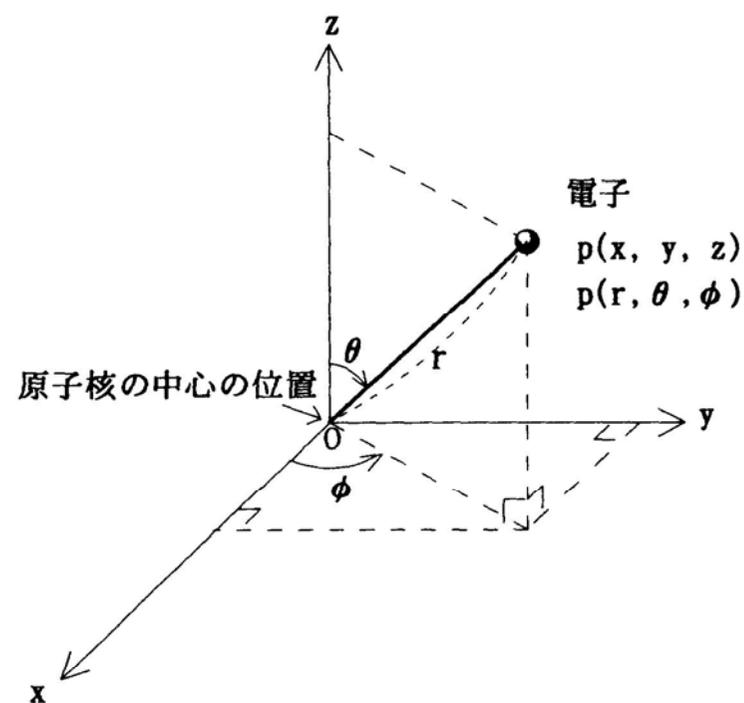


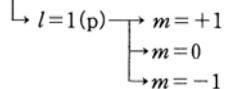
図 2.14 直交座標と極座標の表示

軌道と量子数の関係

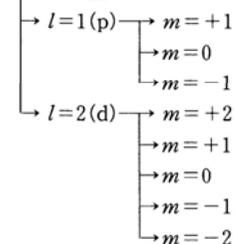
表 2.2 量子数の組み合わせと原子軌道の数

$n=1(K) \rightarrow l=0(s) \rightarrow m=0 \cdots n=1$ には、この組み合わせの軌道のみが存在。

$n=2(L) \rightarrow l=0(s) \rightarrow m=0 \cdots n=2$ には、4種類(=1+3=2²)の軌道が存在。



$n=3(M) \rightarrow l=0(s) \rightarrow m=0 \cdots n=3$ には、9種類(=1+3+5=3²)の軌道が存在。



一般形

$n(=n) \rightarrow l=0(s) \rightarrow m=0 \cdots n=n$ には、 n^2 種類の軌道が存在。

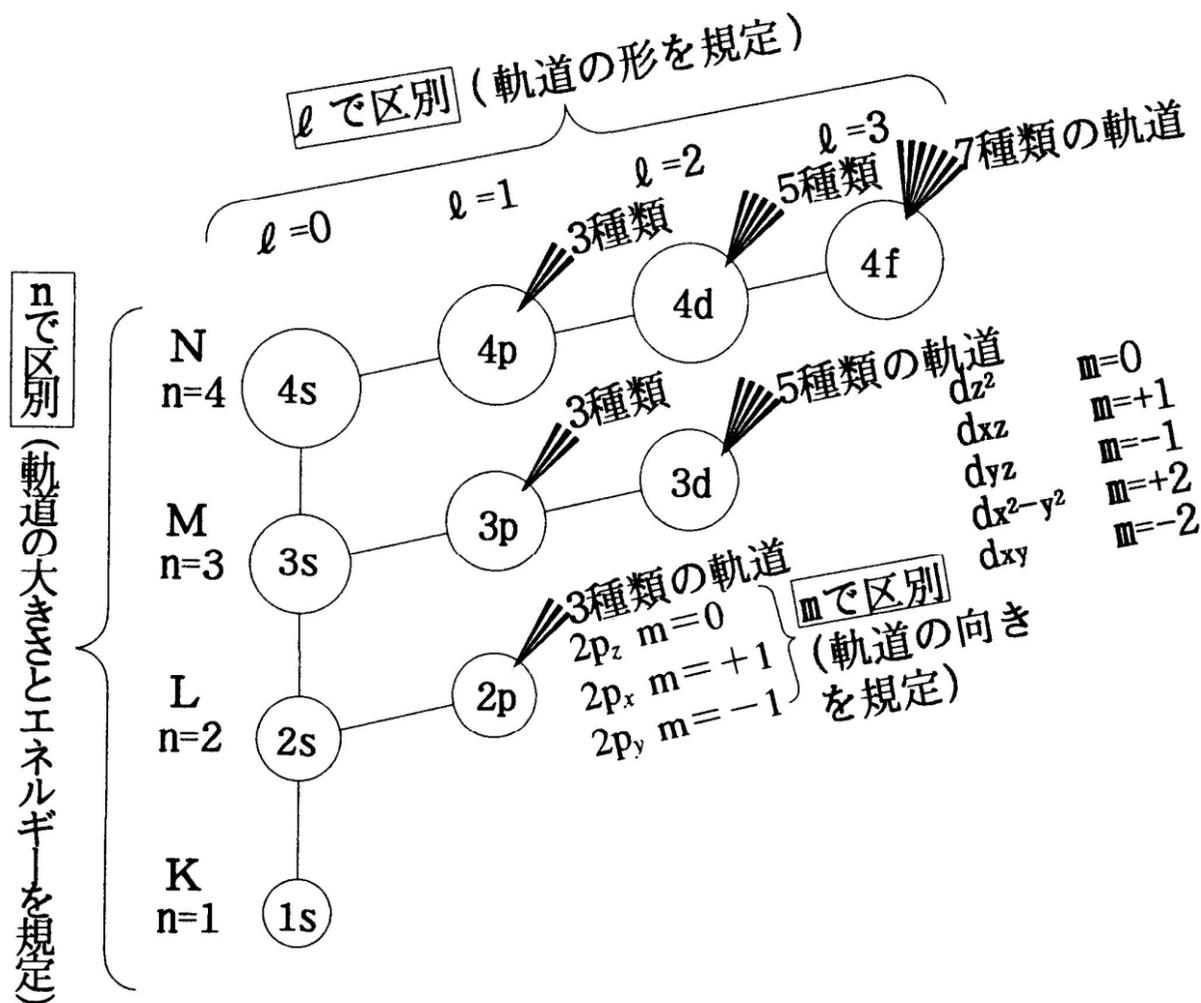
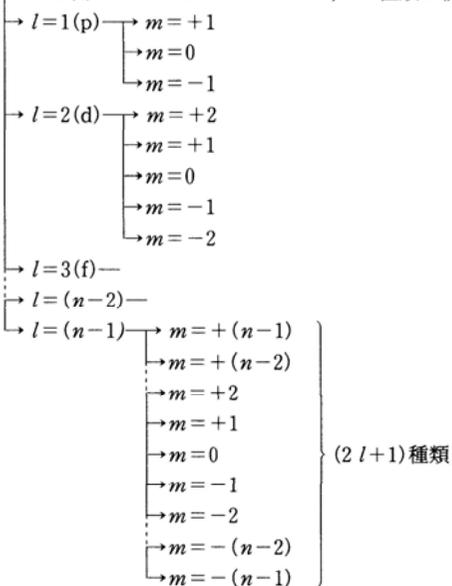


図 2.16 主・方位・磁気量子数の組み合わせによる軌道の表示

s, p, d, f 軌道の動径分布曲線

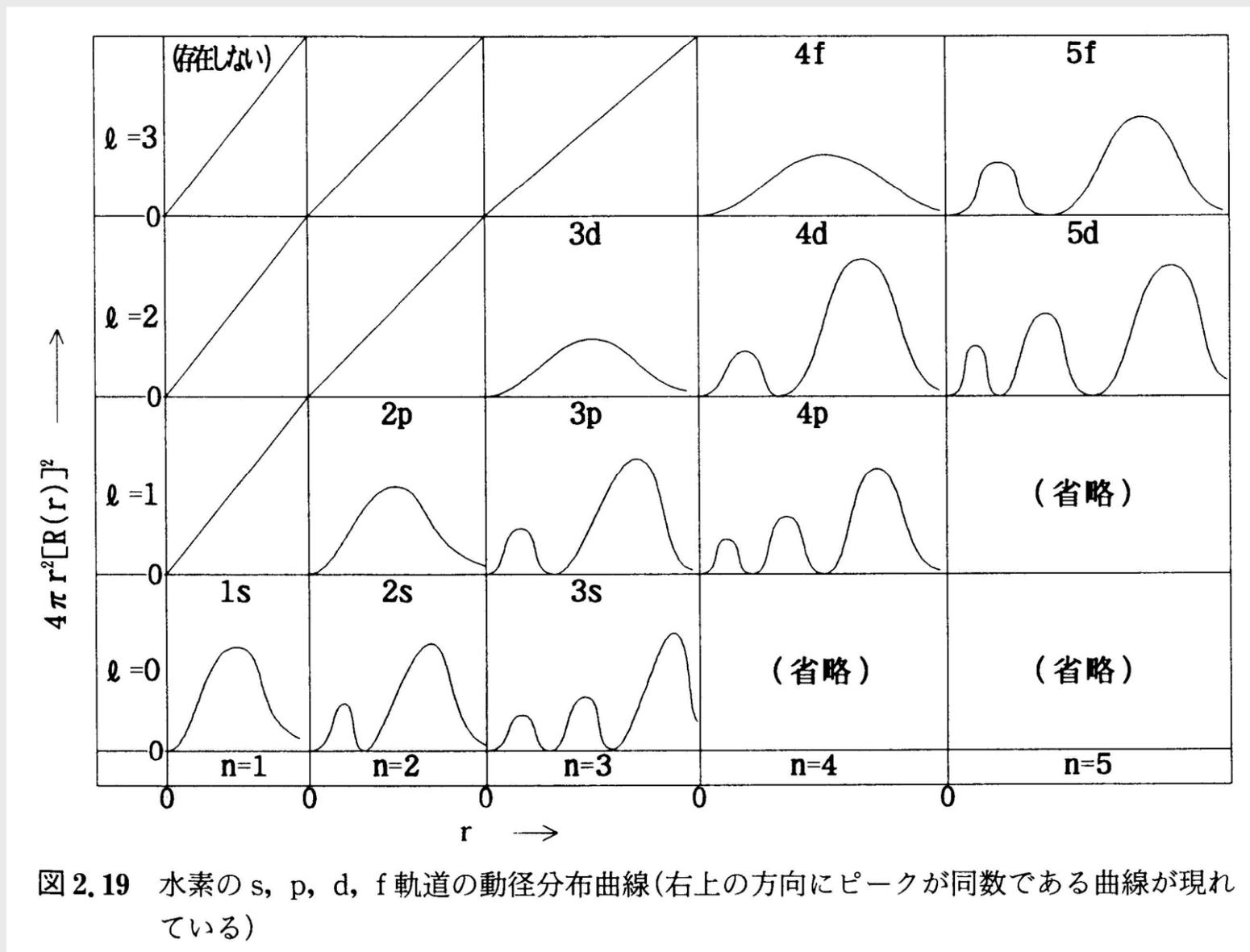


図 2.19 水素の s, p, d, f 軌道の動径分布曲線(右上の方向にピークが同数である曲線が現れている)

電子雲

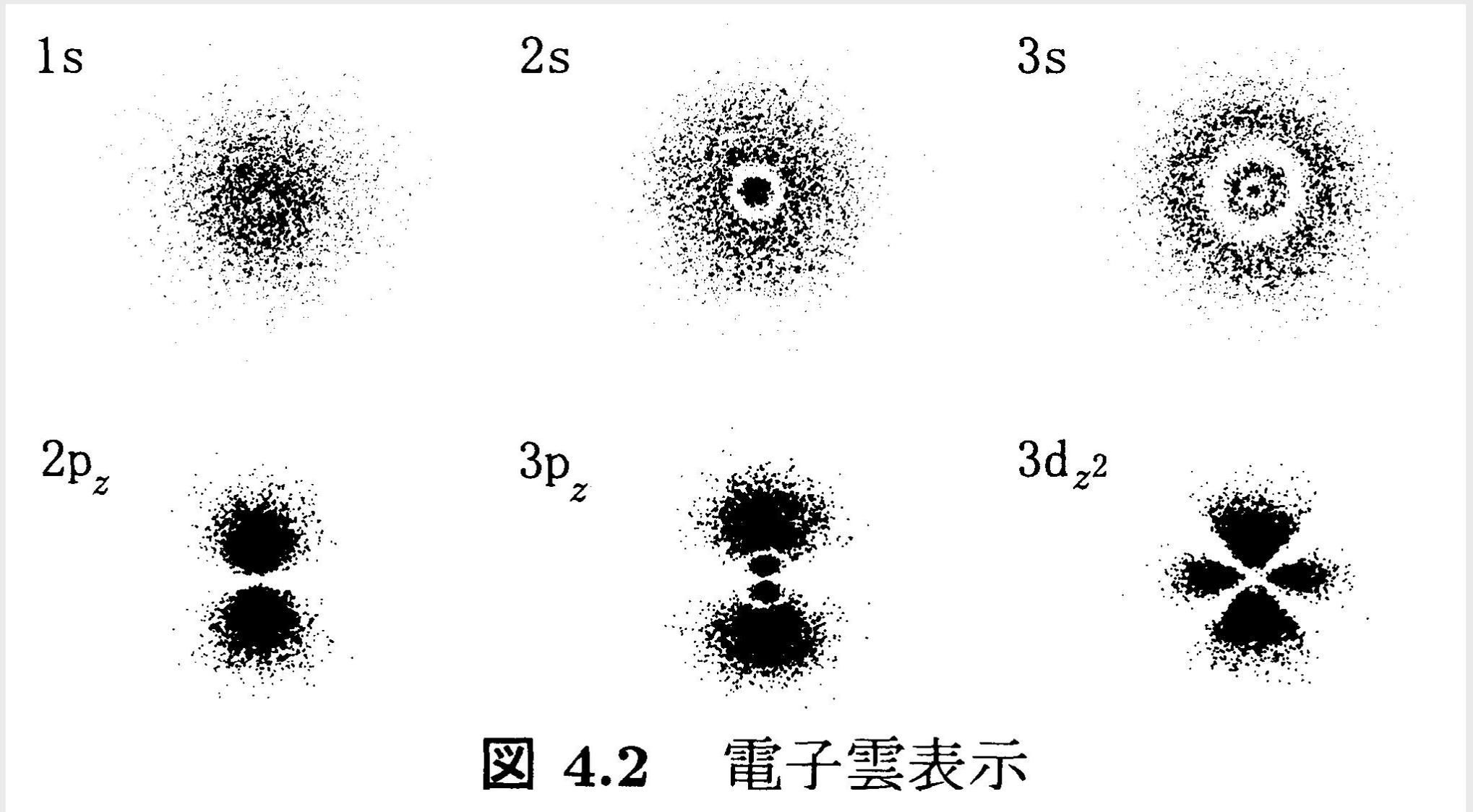


図 4.2 電子雲表示

化学結合 の 種類 1

共有結合

イオン結合

金属結合

配位結合

水素結合

双極子相互作用

ファンデルワールス結合

化学結合の種類 2

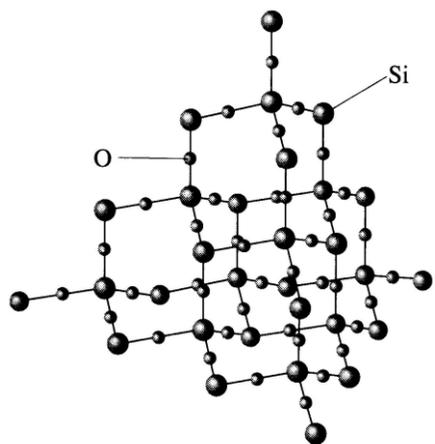


図4 共有結合

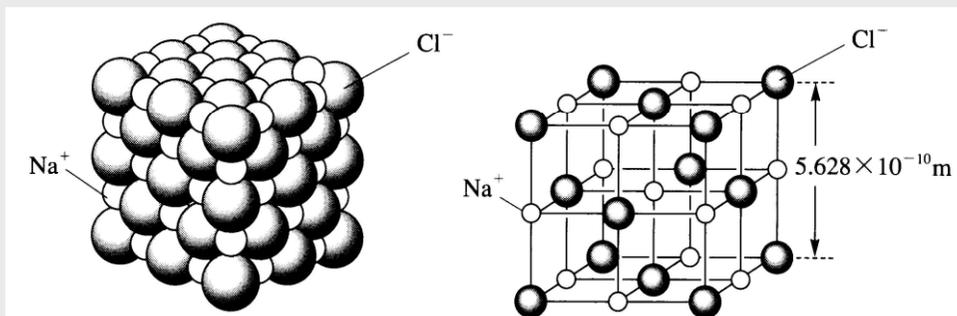


図3 イオン結合

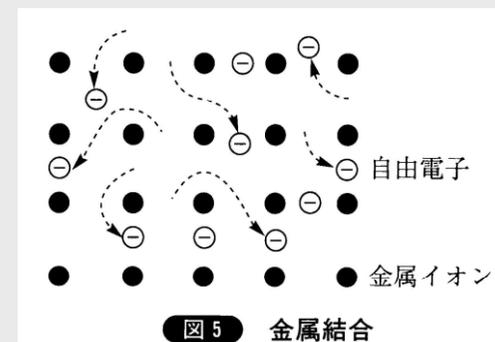


図5 金属結合

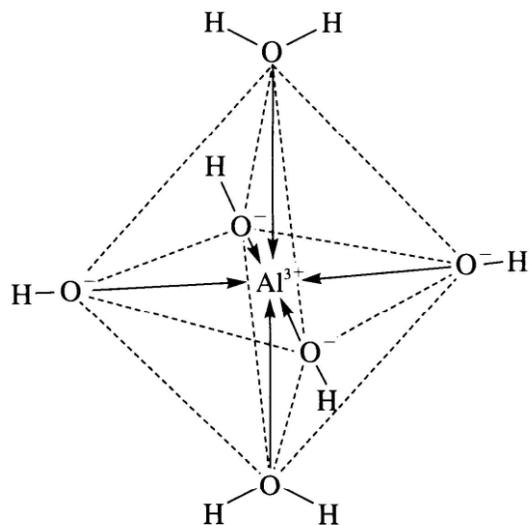


図7 配位結合

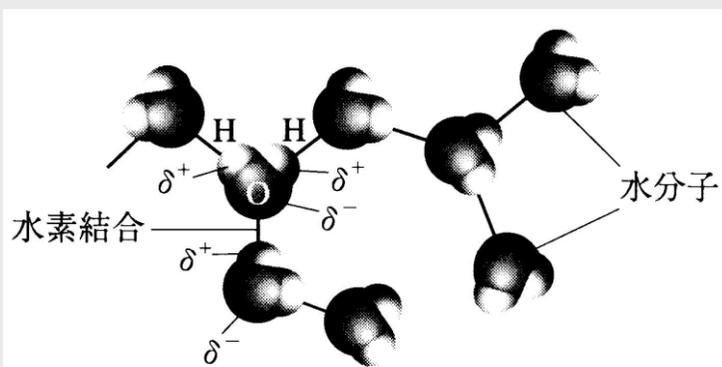
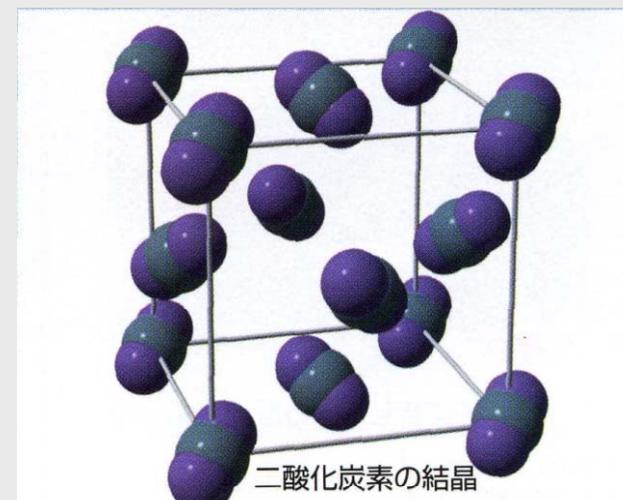


図6 水素結合



二酸化炭素の結晶

大城芳樹, 平嶋恒亮著『図表で学ぶ化学』1999, 化学同人, p. 21.

数研出版編集部編著『視覚でとらえるフォトサイエンス 化学図録』1998, 数研出版, p.34.

化合物の化学式

単原子

$\text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}, \text{Rn}$

単原子イオン

$\text{Na}^+, \text{Cl}^-, \text{Ca}^{2+}$

分子

$\text{N}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{HF}, \text{C}_6\text{H}_6$

多原子イオン

$\text{HCO}_3^-, \text{NO}_3^-, \text{NH}_4^+$

巨大分子

C (黒鉛, ダイヤモンド)

SiO_2 (石英)

金属結晶

$\text{Fe}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Pt}$

イオン結晶

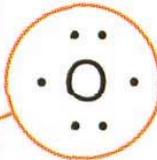
$\text{NaCl}, \text{CaF}_2, \text{ZnS}$

錯体 (錯イオン)

$\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}, \text{Zn}(\text{NH}_3)_4^{2+}$

価電子 と 電子式

価電子の数		1	2	3	4	5	6	7	0
最外殻電子の数		1	2	3	4	5	6	7	8*
電子式	周期 1	H·							He:
	2	Li·	Be·	·B·	·C·	·N:	表し方1 ·O:	:F:	:Ne:
	3	Na·	Mg·	·Al·	·Si·	·P:	·S:	:Cl:	:Ar:

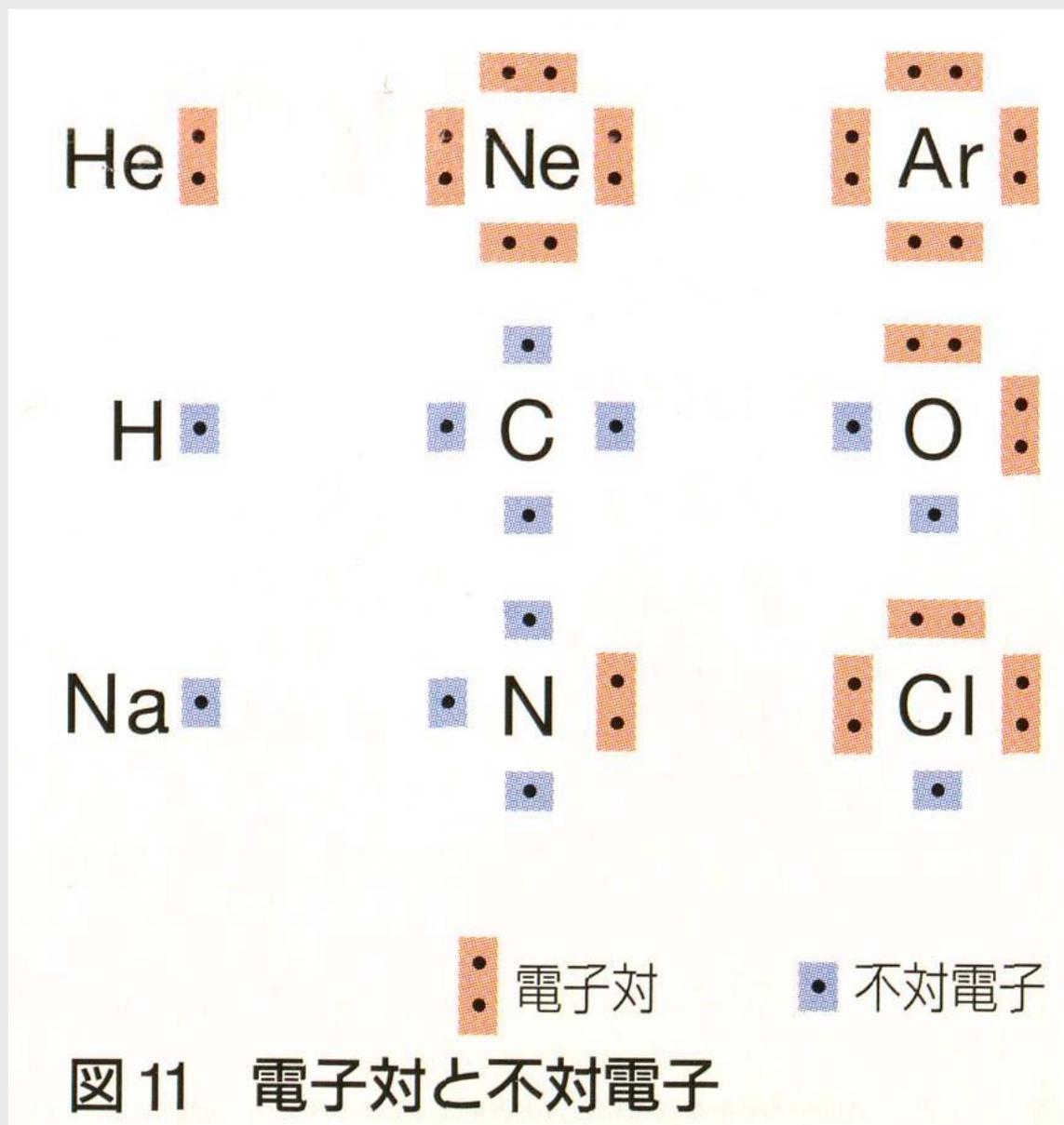
表し方2


電子式は、必要に応じて点の位置を変えて表してもよい。

図 10 電子式

* Heの最外殻電子の数は2個である。

電子対 と 不對電子



井口洋夫・木下實他著

『化学Ⅱ』2004,

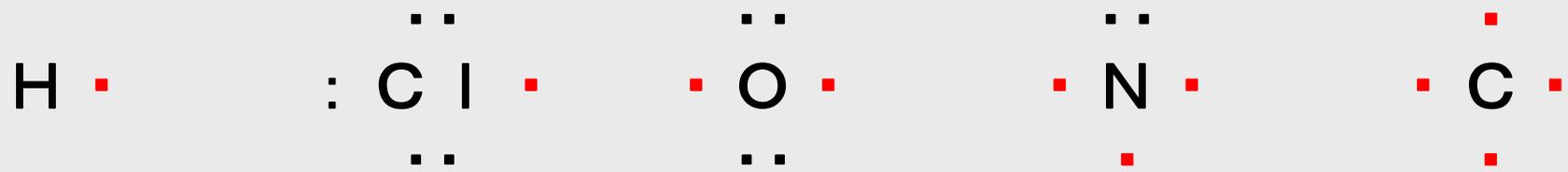
実教出版, p. 16.

原子価

表 3 原子価

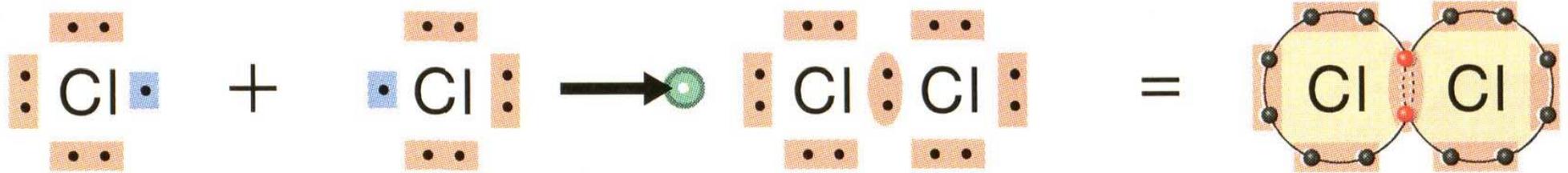
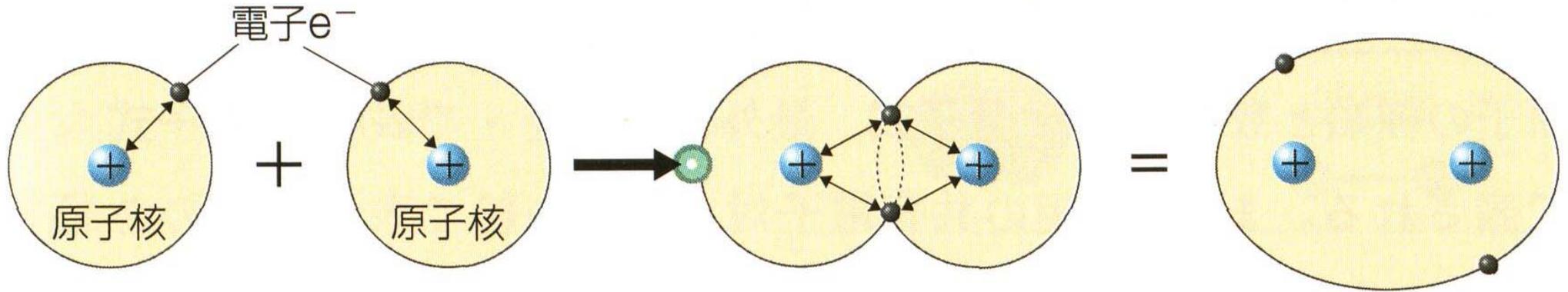
井口洋夫・木下實他著『化学Ⅱ』2004, 実教出版, p. 17.

水素	塩素	酸素	窒素	炭素
H—	Cl—	—O—	—N— 	—C—
1 価	1 価	2 価	3 価	4 価



・ 不對電子

共有結合

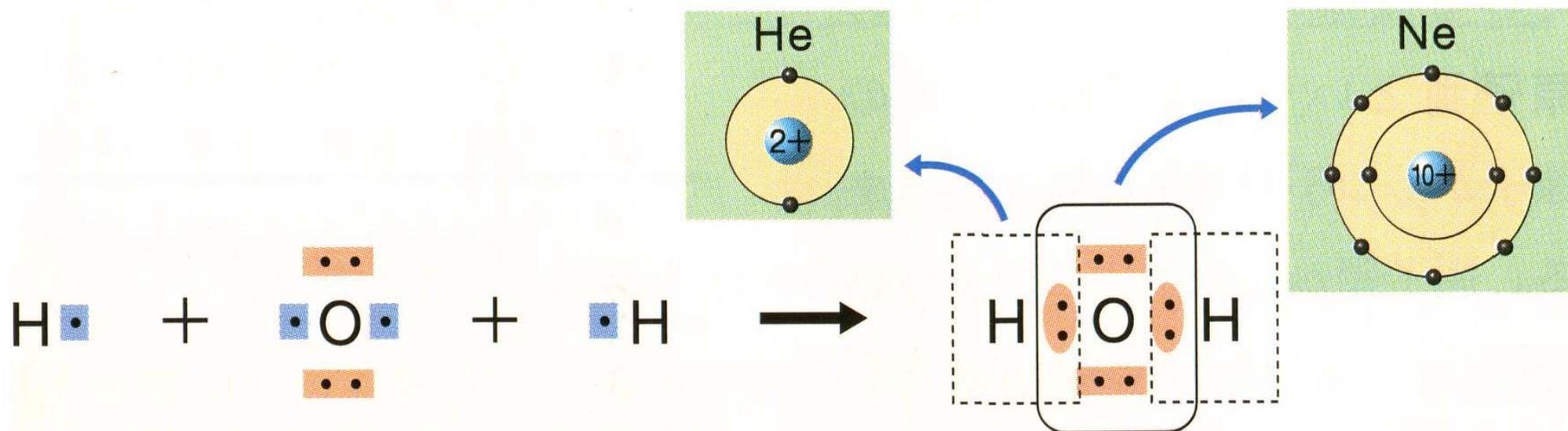


■ 不対電子
 ● 共有電子対
 ● 非共有電子対

不対電子1個ずつ出しあって、原子間に共有電子対ができ、結合する。

図 12 共有結合の形成

共有結合 H₂O分子の形成



水 H₂Oでは、H原子2個とO原子1個が共有結合して最外殻の不足している電子を補充しあい、H原子はHe、O原子はNeと同じ電子配置になっている。

図13 水分子の形成

電子式，構造式，価標，多重結合

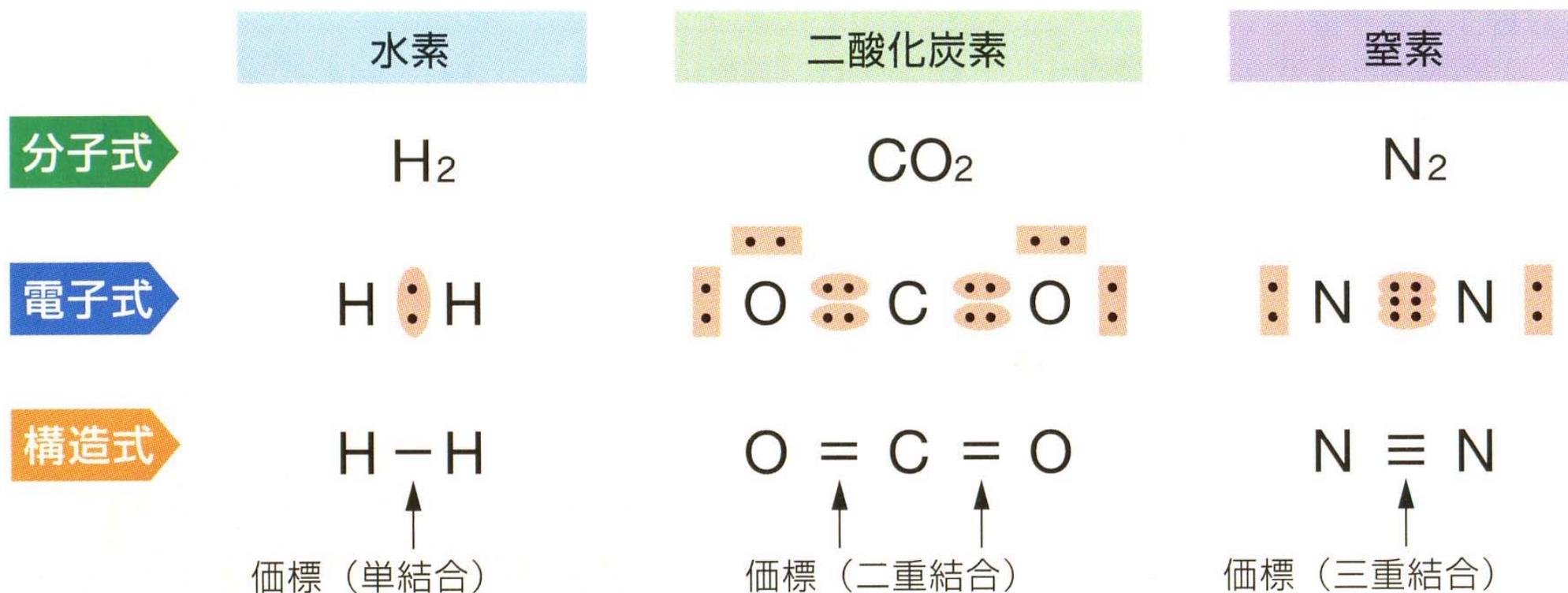


図 14 分子の表し方