

参考：原子の電子状態の呼び方

LS多重項（スピン軌道相互作用は考慮しない）

原子のエネルギー：L、Sで分類

L=0,1,2,3,... に対し、S,P,D,F,... という記号を用いる。

S=0,1/2,1,3/2,... に対し、一重項、二重項、三重項、四重項

例：L=0、S=1/2 → ²S L=3、S=1 → ³F

最も安定な状態の決定法

(a) 3重項(S=1)の方が安定

(b) Sが同じなら最大のL

例① 2p軌道、3p軌道に1個ずつ電子がある場合

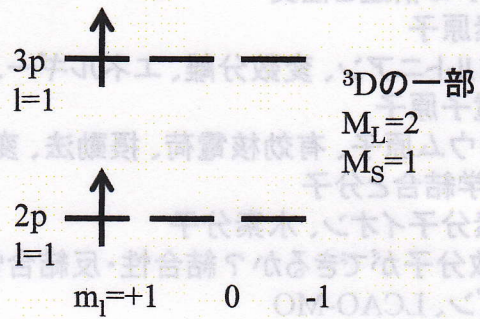
p軌道、方位量子数l=1 ⇔ 軌道角運動量

$l_1=1, s_1=1/2; l_2=1, s_2=1/2$

L=2,1,0 S=1,0

³D, ¹D, ³P, ¹P, ³S, ¹S

³Dが最も安定



例② 2p軌道に2個電子ある場合(炭素原子)

$l_1=1, s_1=1/2; l_2=1, s_2=1/2$

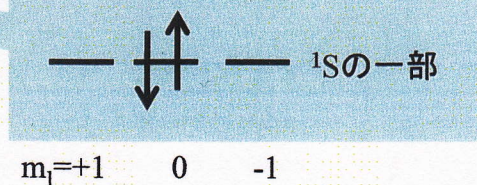
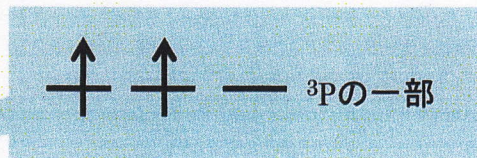
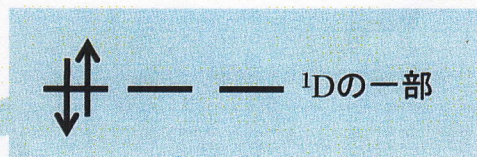
¹D, ³P, ¹S (³Dはとれない)

³Pが最も安定

$(m_{l1}^{ms1} m_{l2}^{ms2})$

例： (1^+0^+) , $m_{l1} = +1, m_{s1} = +1/2, m_{l2} = 0, m_{s2} = -1/2$

		M_S		
		1	0	-1
M_L	2		(1^+1^-)	
	1	(1^+0^+)	(1^+0^-) (1^-0^+)	(1^-0^-)
	0	$(1^+ -1^+)$	$(1^+ -1^-)$ (0^+0^-) (-1^+1^-)	$(1^- -1^-)$
	-1	(-1^+0^+)	(-1^+0^-) (-1^-0^+)	(-1^-0^-)
	-2		$(-1^+ -1^-)$	



授業の概要

1. 量子論の必要性

- ・原子中の電子のスペクトル
水素原子のBalmer系列など、ボーアモデル
- ・粒子性と波動性
光電効果、回折・干渉、de Broglie波

2. 量子論の基礎

- ・Schrödinger方程式
ハミルトニアン、エネルギー、波動関数、密度、不確定性原理、波動方程式
- ・1次元箱中の粒子
ハミルトニアン、エネルギー、存在確率、規格直交化、ポリエンのエネルギーと鎖長、縮退
- ・2原子分子の振動
ハミルトニアン、波動関数、存在確率、調和振動子

3. 原子の構造と性質

- ・水素原子
ハミルトニアン、変数分離、エネルギー、電子軌道の空間分布、極座標表現、
- ・多電子原子
ヘリウム原子、有効核電荷、摂動法、変分法、HF-SCF、構成原理

4. 化学結合と分子

- ・水素分子イオン、水素分子
何故分子ができるか？結合性・反結合性軌道、重なり積分、共鳴積分、クーロン積分、スピン、LCAO-MO
- ・等核、異核2原子分子
分子軌道の組み立て、極性

参考図書の例

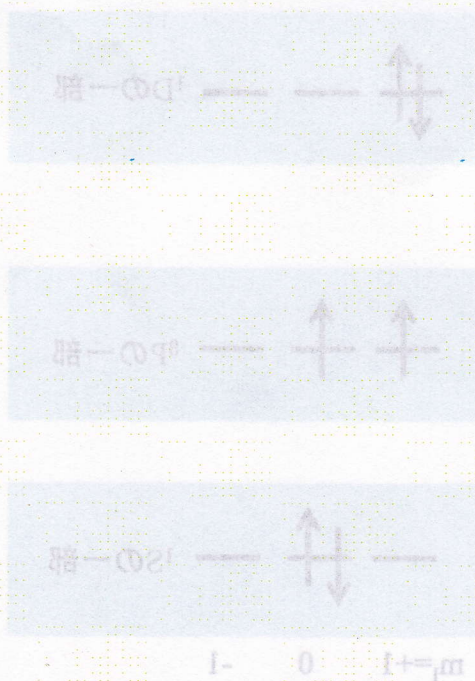
化学の基礎77講

(東京大学教養学部化学部会編)

量子化学 (原田義也著)

アトキンス 物理化学 → 章末問題

物理化学演習I (高橋博彰著)



	M		
	0	1	
1	(-1 ⁺) (1 ⁻)		2
(-0 ⁻) (0 ⁺)	(0 ⁺) (0 ⁻)	(0 ⁺) (0 ⁻)	1
(1 ⁻) (-1 ⁺)	(1 ⁻) (-1 ⁺)	(1 ⁻) (-1 ⁺)	0
(0 ⁺ 1 ⁻)	(0 ⁺ 1 ⁻) (0 ⁻ 1 ⁺)	(0 ⁺ 1 ⁻) (0 ⁻ 1 ⁺)	1
	(1 ⁻ 1 ⁻)		2