

1240：原子の電子は原子軌道にはいる

(原子・分子は定常状態にあります。定常状態ではビリアル定理が成立しています。反応過程の系は非定常状態でビリアル定理は成立していません)

キーワード：定在波 (定常波)；波動関数；原子軌道；定常状態；位置エネルギー；運動エネルギー；ビリアル定理

電子は波の性質を持ちます。波には時間とともに位置や形を変える進行波と時間によって形を変えない定在波 (**standing wave**：定常波 (**stationary wave**) ともいいます) があります。原子は時間によって変わらない系ですので、その中にある電子の波は定在波である必要があります。その定在波およびそれを表す波動関数を**原子軌道 (atomic orbital)** といいます。原子核と電子によってはじめて原子軌道ができますが、習慣的にあたかも原子軌道があって電子がその軌道に入るという表現が用いられます。

[定常状態の重要な定理]

時間不変な系の状態を**定常状態 (stationary state)** とよびます。定常状態のエネルギーに関する重要な定理があります。系の位置エネルギーを V 、運動エネルギーを T としますと、 $V = -2T$ の関係が成立します。これを**ビリアル定理 (virial theorem)** といいます。

ビリアル定理は原子でも分子でもさらには古典力学系たとえば太陽を回る地球の運動エネルギーとポテンシャル (位置) エネルギーの間でも成立する非常に重要な定理です。