1260：原子軌道の種類

（原子軌道は電子の波動性から必然的に派生するものです．原子軌道の成り立ちの概観を説明します）

キーポイント：デカルト座標；極座標；量子数の種類は次元に対応する；主量子数；方位量子数；磁気量子数

［原子軌道の記号表記］

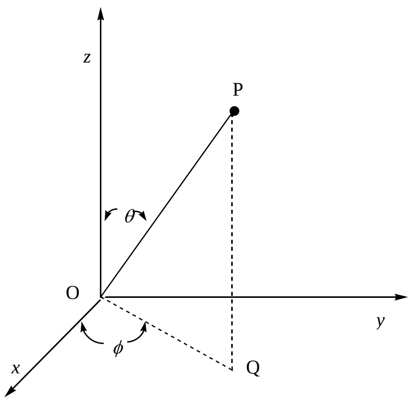
原子軌道には 1*s*，2*s*，2*p*，・・というように記号がつけられています．それだけの種類があることを示しています．原子軌道の記号は，<u>量子数の種類と量子数の数</u>を表しています．

［極座標］

1 次元の波動関数（例えば弦の振動）の形は 1 次元の座標軸（たとえば *x* 軸）に展開し，一種類の量子数とその値によって規定されます．2 次元の波動関数は座標の数（*x* 軸と *y* 軸），つまり 2 種類の量子数とそれらの値によって決まります．

原子核によって閉じ込められた電子の波動関数（原子軌道）は 3 次元です．3 次元空間を表す座標は，通常は（デカルト（直交）座標の）*x*，*y*，*z* 軸を用いて表しますが，この座標系で表した水素原子の Schrödinger 方程式を解くことができません．それで極座標系へ変換して解きます（このように量子力学では困難な数式を座標変換で解くという方法はたびたび用いられます）．

極座標系（polar coordinate）とは，空間の点 P を原点 O からの距離（*r*），OP と *z* 軸のなす角（θ），P から *xy* 平面へ位垂線を下ろしその足を Q とし，OQ と *y* 軸とのなす角（ϕ）でその位置を表す座標系です．



$$z = r\cos\theta$$
$$x = r\sin\theta\cos\phi$$
$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

図 1．空間の極座標表現．直交座標系（*x*，*y*，*z*）と r，θ，ϕ には上式の関係がある

［原子軌道の種類は極座標の座標に対応］

原子軌道の種類は以下に述べる主量子数，方位量子数および磁気量子数できまります．

座標 r に関する量子数を**主量子数（principal quantum number）**とよび，n で表します．n は 1，2,・・という自然数の値をとります．原子核は原点 O にあると考えてほぼ間違いありません[1]ので，主量子数は電子の原子核からの大体の距離を表す指標と考えられます．

座標 θ に関する量子数を**方位量子数（azimuthal quantum number）**とよび，l で表します．l は n の値に依存し，n に対し 1，2,・・n-1 までの値をとります．l は原子軌道の大体の形を表しますが，詳しい形は次の**磁気量子数（magnetic quantum number）**によってきまります．

座標 ϕ に関する量子数は磁気量子数で m の記号で表します．m は l の値に依存し，l の値が与えられると，$-l$，$-l+1$，$-l+2$，・・-1，0，1，・・l-2，l-1，l の合計 $2l+1$ 個の値をとります．たとえば l=2 の場合は，m は-2，-1，0，1，2 の 5 個の値をとるということです．

磁気量子数は z 軸に対し回る（ϕ座標）運動に関数する量子数です．電子は負の電荷を持つので運動によって磁場を発生します．外部磁場を与えると，電子の運動による磁場と相互作用し，l に従った異なったエネルギー状態を与えますのでこの名（磁気量子数）がつけられています．

---

1) 原点は重心ですが，原子核の質量は電子に比べてとても大きいですので，原子核の位置は重心と同じと考えて構いません．