

1270：原子軌道の種類と表記記号

(原子軌道の記号表示の意味をおぼえましょう)

キーポイント：主量子数；方位量子数；磁気量子数

方位量子数 l は、主量子数 n に対し、 $0, 1, 2, \dots, n-1$ の値をとります。たとえば、 $n=1$ なら l は 0 のみ、 $n=2$ なら l は $0, 1$ の2つの値、 $n=3$ なら l は $0, 1, 2$ の3つの値をとります。また、 $l=0, 1, 2, 3, 4, \dots$ の値にそれぞれ s, p, d, f, g, \dots の記号が割り当てられています。 $1s$ は $n=1, l=0$, $2s$ は $n=2, l=0$, $2p$ は $n=2, l=1$, 同様にして $3d$ は $n=3, l=2$ を表します。(これらの記号の意味は原子スペクトルの観測から意味づけられていました (*simple, principle, diffuse, fundamental* これ以降はアルファベット順)。現在はその意味は無視されています。

p 軌道には、磁気量子数 $-1, 0, 1$ の値に従って3種、 p_{-1}, p_0, p_1 があります。 p_0 を直交座標系の z 軸に当てはめると p_{-1}, p_1 はそれぞれ y 軸と x 軸に対応させることができますので、有機化学では p_z, p_y, p_x と表記しています。また、 d 軌道には、磁気量子数が $-2, -1, 0, 1, 2$ の5個がありそれぞれ、直交座標系に変換して、 $m=0$ は d_{z^2} , $m=\pm 1$ は d_{xz}, d_{yz} , $m=\pm 2$ は

$d_{x^2-y^2}, d_{xy}$ と表記します。

要するに、 $2p_x$ 原子軌道とは、主量子数が 2 , 方位量子数が 1 , 磁気量子数が 1 の原子軌道のことです。