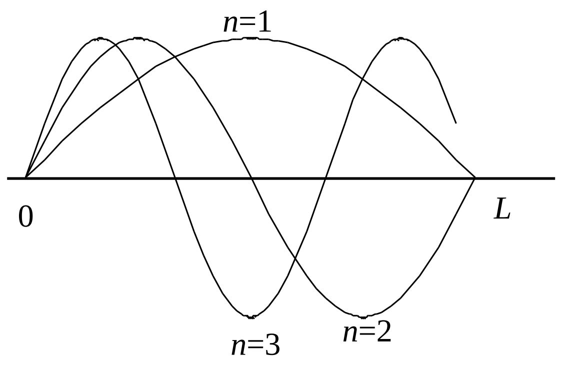
**1290：原子上の電子の分布の形状と原子軌道**

（原子軌道に電子の入ったときの電子分布は原子核からの距離 $r$ の関数で表されることに注意しましょう）

キーポイント：（電子の）分布関数；波動関数の 2 乗；同径分布；原子核からの，電子の最大分布と平均分布の距離は異なる

電子分布と原子軌道の形状とでは 2 つの点で異なります．電子の分布関数（$P(r)$, $r$ は位置）は波動関数（$\psi$）の 2 乗（$\psi^2$，$\psi$が複素関数の場合は$\psi^*\psi$）で表されます．“原子軌道の形”の項（**1280**）で引用した 1 次元の波動関数の場合は下図のようになります．波動関数の 2 乗ですので，電子の分布は波動関数の振幅強度より鋭くなります．$\psi^*\psi dx$ が，$x$ と $x+dx$ の間に見出される電子の確率です．

波動関数：$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$




分布関数：$P(x) = \psi(x)\psi(x) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

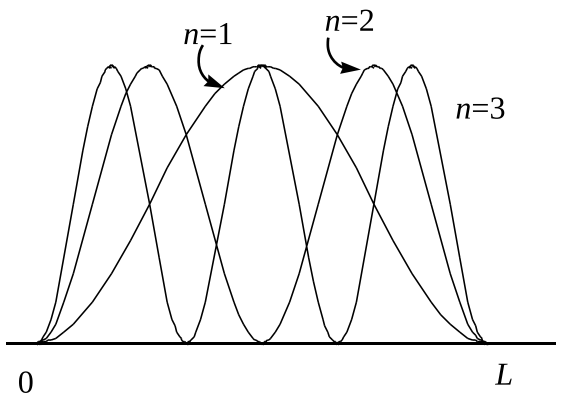



図 1．1 次元波動関数による電子分布

［同径分布］
もう一つの異なる点は，特に電子の**同径分布（radial distribution）**を考えるとき注意する必要があります．同径分布とは，原子核からの距離（$r$）の関数としての電子分布です．電子の存在確率は，$r$ での球の表面積は $4\pi r^2$ に d$r$ をかけた体積の中に電子を見出す確率をいいます．空間での電子分布確率$\psi^*\psi$をそれにかけた $4\pi r^2\psi^*\psi \mathrm{d}r$ がその確率であり，$4\pi r^2\psi^*\psi$ が同径分布関数ということになります．

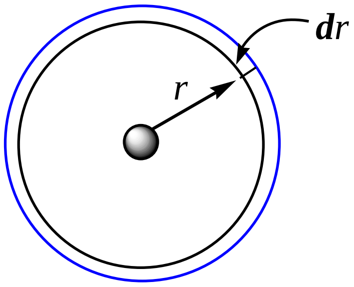



図 2．同径分布関数は，原子核からの距離 $r$ と $r$+d$r$ の隙間に電子が入る確率を表す関数．隙間の体積は $4\pi r^2\mathrm{d}r$ で電子の存在確率は $4\pi r^2\psi^*\psi\mathrm{d}r$ で表される．$4\pi r^2\psi^*\psi$ が同径分布関数

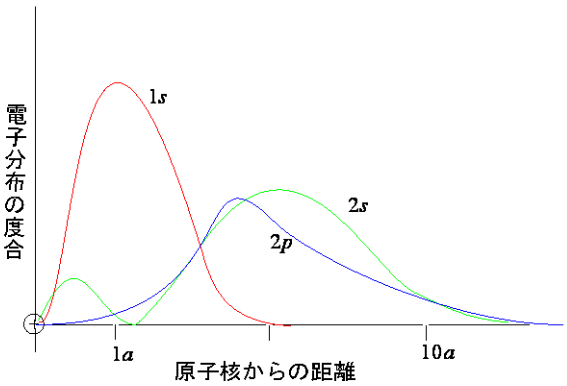



図 3．電子の同径分布．上の図で，$a$ はボーア半径（0.521947Å）．同径分布関数で示すと，電子は原子核上には存在しない．2$s$ 原子軌道に入る電子の一部は 1$s$ 原子軌道の内側にあることに注意

水素原子の 1s 原子軌道に入る電子の最大分布位置 $r$ を求めましょう．水素原子の 1s 軌道は（1280 を参照），

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-\rho} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{a}r}$$

で，分布関数は，

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi_{1s}\psi_{1s} = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2}{a}r}$$

これを，$r$ で微分すると $r$=0 と $r$=$a$ のところで極値が出ます.

［核から電子までの平均距離］

**1280** で述べたように，原子核から電子までの平均距離は次の式で与えられます.

$$\bar{r} = \frac{a\ n^2}{z}\left\{\frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{2n^2}\right\}$$

この式で 1$s$ 原子軌道に電子がある場合の，原子核から電子までの平均距離と求めると，$a$X1.5 となり，最大分布位置（$a$）とは異なります.