

与えられた n の値をもつすべてのオービタルは、その原子の一つの殻を形成する。

$n=1 \quad 2 \quad 3 \quad 4$

K L M N

$l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4$

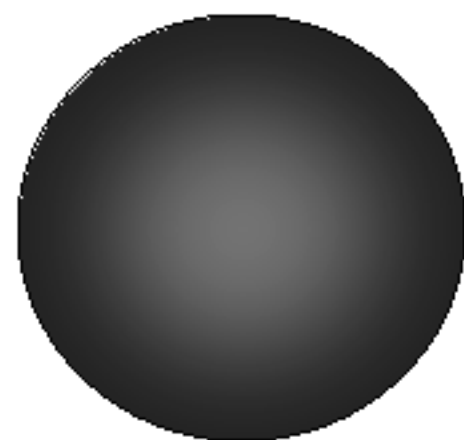
s p d f g

$n=1$ K殻 1s ($l=0$)

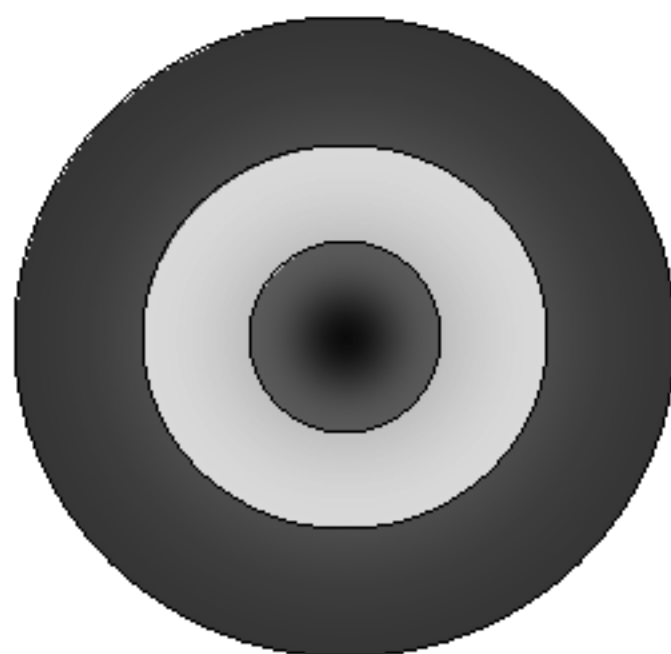
$n=2$ L殻 2s ($l=0$) 2p ($l=1, m_l = -1, 0, +1$)

s オービタル

球対称



2s



境界面

電子の確率密度

動径分布関数 $P(r) = r^2 R_{n,l}(r)$

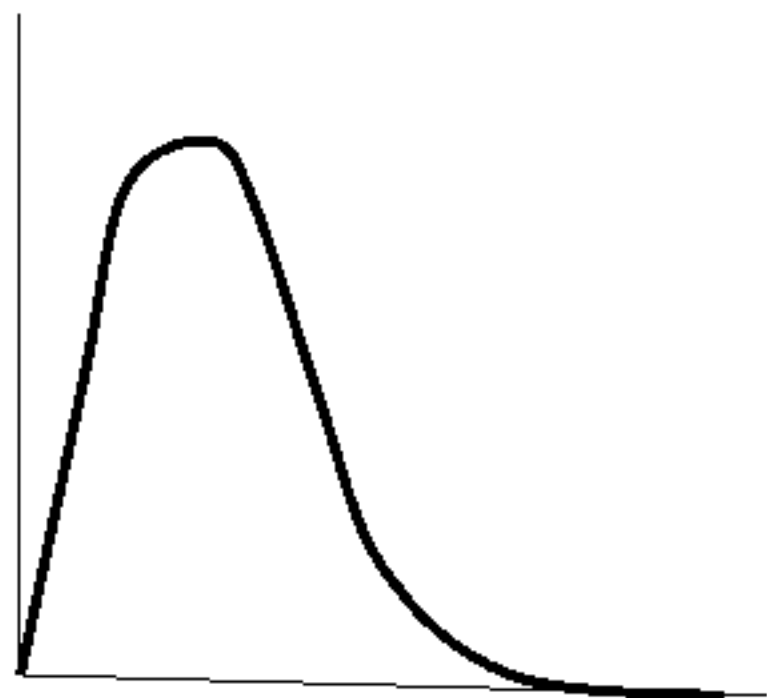
半径が r で厚さが dr の球殻中のどこかに電子を見出す確率

1sオービタル
$$P(r) = \frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-2Zr/a_0}$$

最大確率の半径 1sオービタル $r = a_0$

ボーア半径

2sオービタル $r = 5.2a_0$



pオービタル 角運動量 $\rightarrow 2^{1/2} \hbar$

$r=0$ 波動関数 0
rに比例

3つの2pオービタル

$l=1$ $m_l = 0$ z軸まわりの角運動量が0
cos θ に比例

$$p_0 = R_{2,1}(r)Y_{1,0}(\theta, \phi) = r \cos \theta f(r)$$

$$p_z = z f(r) \quad p_x = x f(r) \quad p_y = y f(r)$$

dオービタル

5つの3dオービタル

スペクトル遷移と選択律

$$n_1, l_1, m_1 \text{ オービタル} \xrightarrow[\text{遷移}]{\Delta E} n_2, l_2, m_2 \text{ オービタル}$$

許容、禁制

$$\text{選択律} \quad \Delta l = \pm 1 \quad \Delta m_l = 0, \pm 1$$

多電子原子の構造

オービタル近似 電子間相互作用がない

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)\dots$$