

# 原子の形に関する理論的考察

SATテクノロジー・ショーケース2024

## ■ はじめに

私たちが使用している化学基礎の教科書や資料において、原子の形は球形として描かれている。電子配置や電子殻、そして原子の球殻モデルと学習するにつれ原子の形はより球形に近づいていくため、原子の形は球形であると理解することになる。しかしながら、その次に学習する原子軌道では、電子殻は原子軌道から構成され、図1に示したようにs軌道であれば球形であるが、図1に示したp軌道、図

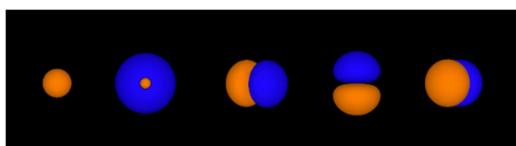


図1 原子軌道の形状を示す概略図 右2つがs軌道(1sと2s)で、左3つがp軌道(2p<sub>x</sub>、2p<sub>y</sub>、2p<sub>z</sub>)<sup>1)</sup>

1には無いがd軌道やf軌道とエネルギーが大きくなるにつれてアレイ型からはじまりより複雑な形をした複数の軌道に変化していく。したがって、これまで球形であると考えていた原子の形は、原子番号が大きくなるとともに球形から離れた形になり、これまで目にしてきた原子の形が球形というのは単なる思い込みであるという疑問が生じた。

そこで本研究では、波動関数と分子軌道法を用い、原子の形について理論的に考察した。

## ■ 活動内容

### 文献調査

文献調査の結果、原子の形を表現するものは原子軌道であり、その形を決定しているのは、電子に関する波動関数であることが分かった。波動関数はベクトルであるので、わかりやすくするためにそれを変数分離し、動径波動関数と球面調和関数とに分離できる。動径波動関数が原子核からの距離 $r$ に依存し、球面調和関数は角度 $\theta$ 、 $\varphi$ に依存するというものである。電子は、エネルギー順位の低い軌道から順に収容されていく。通常、p軌道やd軌道はs軌道よりエネルギー準位が高いのでs軌道よりも体積が大きくなる印象を受けてしまう。図2に、動径波動関数を二乗して得られる確率分布と原子核からの距離との関係を示した。図2より、L殻を構成する2つの軌道である、2s軌道と2p軌道を比較すると、電子の存在確率のピークの位置は、p軌道より

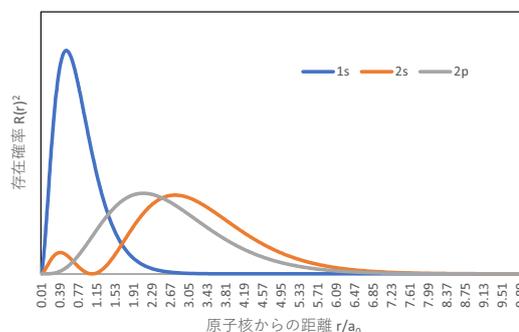


図2 1s、2s、および2p軌道の動径分布関数

もs軌道の方が原子核からの距離が遠いところに現れることがわかった。この傾向は、M殻やN殻でも同様で、エネルギーの高い軌道になるにつれて、存在確率のピークは小さい値になることがわかった。したがって、電子の存在確率のピークから考えると、原子の形は球形になること考えられる。

しかしながら、実際には球面調和関数を考慮する必要がある。さらに、分子の場合、その形には異方性があり、向きによる反応性の違いから、分子の向きを推測できる。一方、原子の場合は基準にするものが無いため、分子のように向きを推測することができない。これは、原子は異方性を持たない(等方性を持つ)といえるので、消去法により、どの方向からでも形が変わらないため、球形と考えるしかない。そこで、球面調和関数と動径波動関数の両方を考慮した電子軌道を描画するプログラムを作製し、球面調和関数を考慮した電子軌道を算出することで、原子の形は本当に球形であるのかどうかの真偽を詳細に評価した。

## ■ 参考文献

- 1) wikipedia <https://ja.wikipedia.org/> キーワード:原子軌道

代表発表者 **榎本 慧(えのもと けい)**  
 所属 **茨城県立日立第一高等学校 化学部**  
 問合せ先 **〒317-0063**  
**茨城県日立市若葉町3丁目 15 番1号**  
**TEL:0294-22-6488 FAX:0294-21-4490**  
**e-mail:yamaguti-satoru@mail.libk.ed.jp**

■キーワード: (1) 原子軌道  
(2) 原子  
(3) 波動関数  
 ■共同研究者: 野内 日向  
 同 化学部  
 鈴木 絢也  
 同 化学部