

ナトリウム原子



LiCl NaCl KCl RbCl CsCl CaCl₂ SrCl₂ BaCl₂ CuSO₄

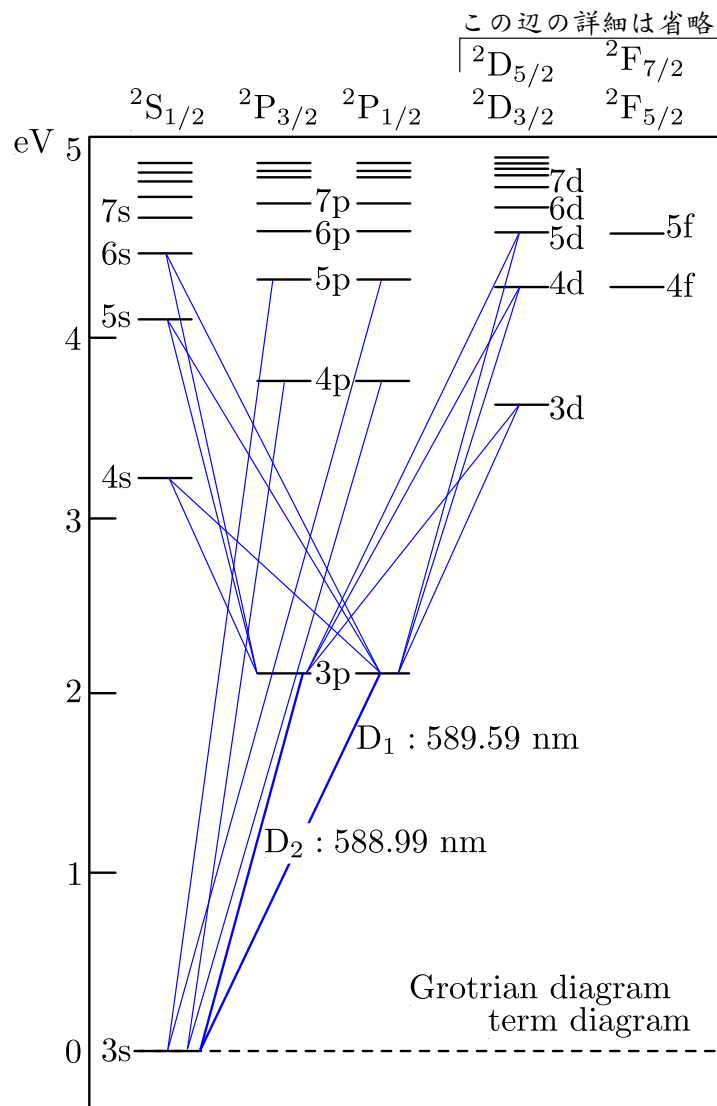


図 1: (上) アルカリ金属, アルカリ土類金属などの塩が示す炎色反応と (下) Na の Grotrian diagram (グロトリアン図)。グロトリアン図とは, スペクトル線を生じるエネルギー遷移の様子を図に示したものである。

水素原子

1つの電子配置でも2種類のエネルギーをとる。たとえば、 $(2p)^1$ が $2^2P_{1/2}$ と $2^2P_{3/2}$ に分裂している。

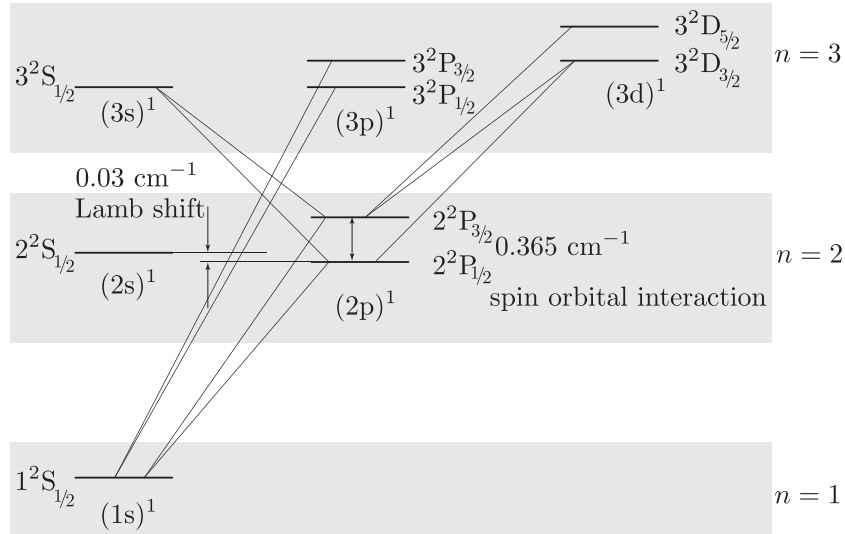


図 2: 水素原子のエネルギー準位の微細構造：図にはスペクトル項とそれに対応する電子配置を示した。

炭素原子

炭素原子の電子配置 $(2p)^2$ には、 3P , 1D , 1S の LS 項が対応する。Russell–Saunders 方式によれば、 3P は 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 に分離する (3P 項は $L = 1$, $S = 1$ より $J = 2, 1, 0$ の3通りが得られることによる)。この計5準位のエネルギーの実測値を図に示した。

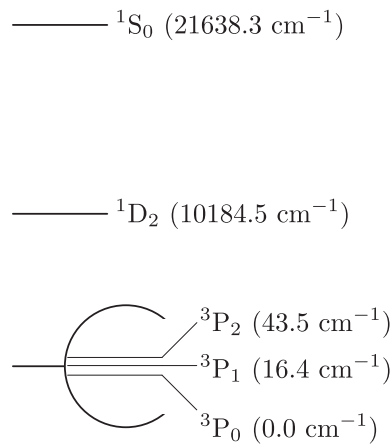


図 3: 炭素原子のエネルギー準位の微細構造

Hund の規則

0. Hund の規則は基底状態だけに適用できる。
1. スピン多重度が最大のスペクトル項のエネルギーがもっとも低い。
2. スピン多重度が等しいスペクトル項が複数あるときは、最大の L を持つスペクトル項のエネルギーが最小になる。

J による分裂則 $(np)^a$ または $(nd)^b$ の型の副殻が満ちていないとき、すなわち $a < 6$, $b < 10$ であるとき、収容電子数が最大値の半数以下ならば J が最小の項が最低のエネルギーをもち、半数以上ならば J が最大の項が最低のエネルギーを持つ。

$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ のスペクトル項 (LS 多重項) を求める

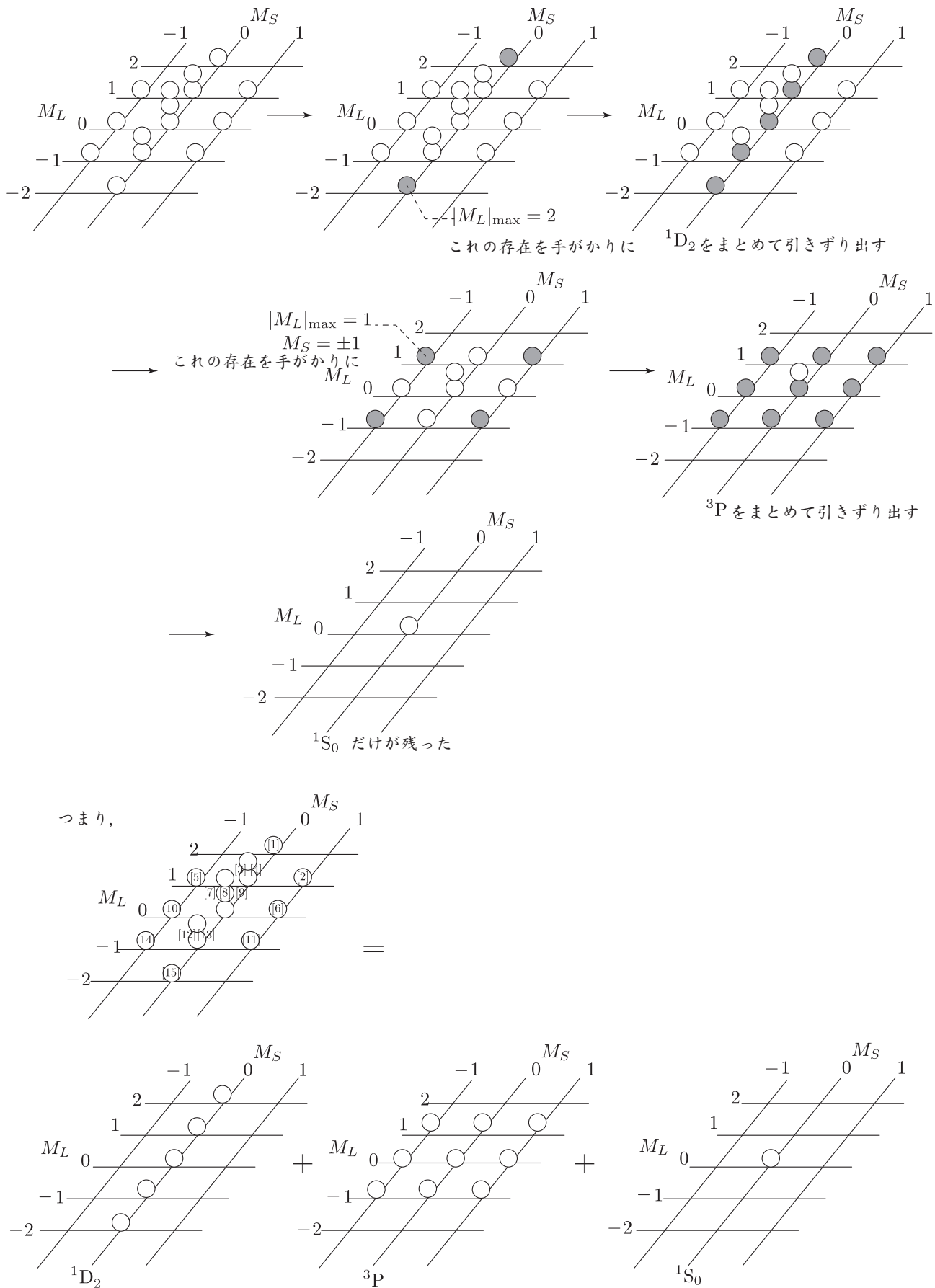


図 4: $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ のスペクトル項を求める作業のイメージ

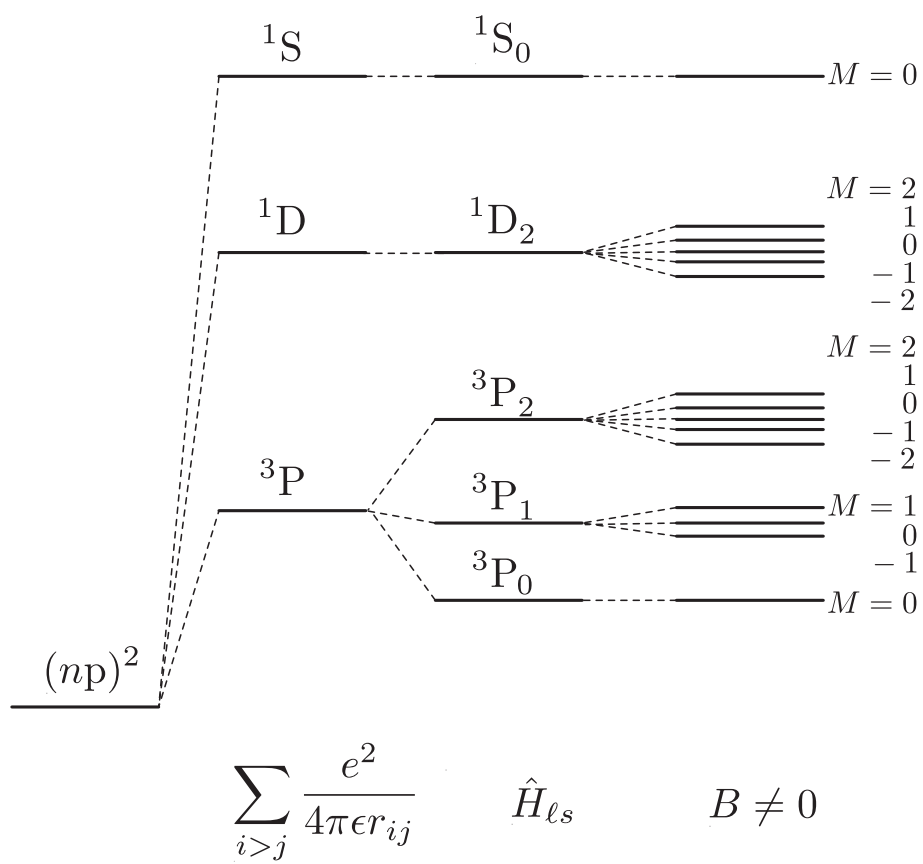


図 5: 電子配置 $(np)^2$ のエネルギー準位が分裂して行く様子。