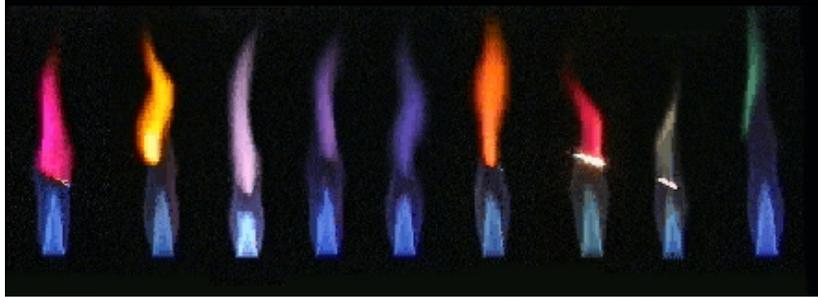


ナトリウム原子



LiCl NaCl KCl RbCl CsCl CaCl<sub>2</sub> SrCl<sub>2</sub> BaCl<sub>2</sub> CuSO<sub>4</sub>

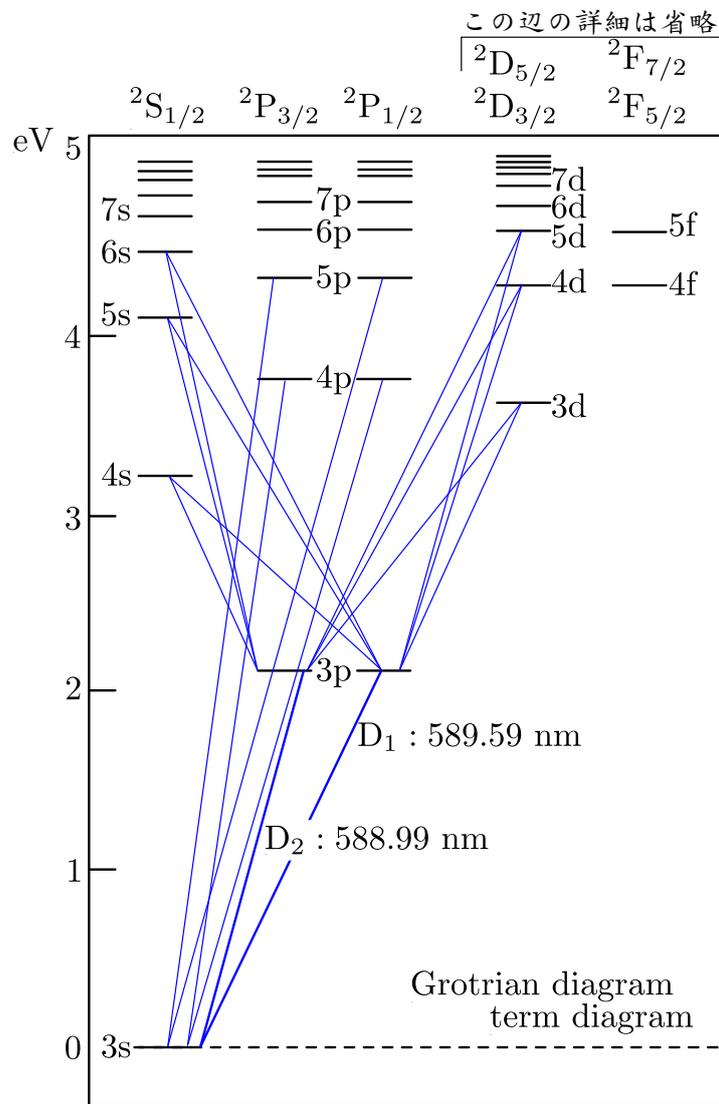


図 1: (上) アルカリ金属, アルカリ土類金属などの塩が示す炎色反応と (下) Na の Grotrian diagram (グロトリアン図)。グロトリアン図とは, スペクトル線を生じるエネルギー遷移の様子を図に示したものである。

## 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。

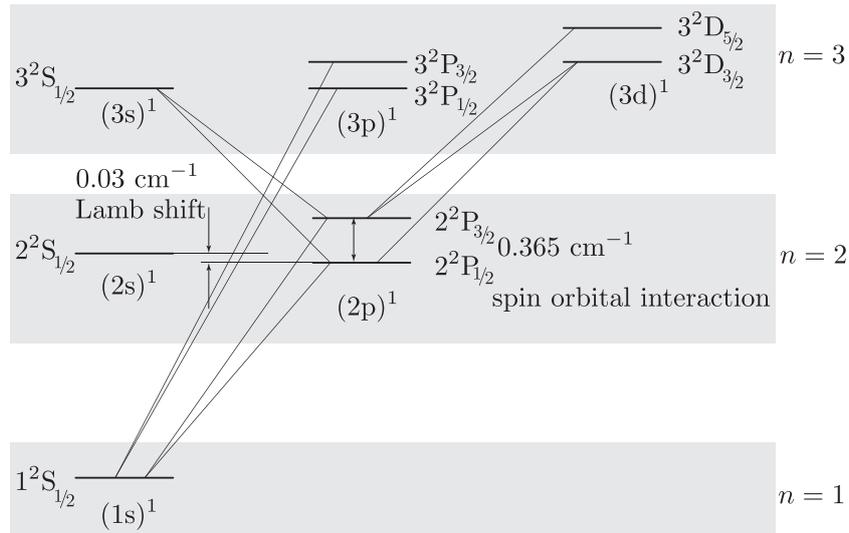


図 2: 水素原子のエネルギー準位の微細構造：図にはスペクトル項とそれに対応する電子配置を示した。

## 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。

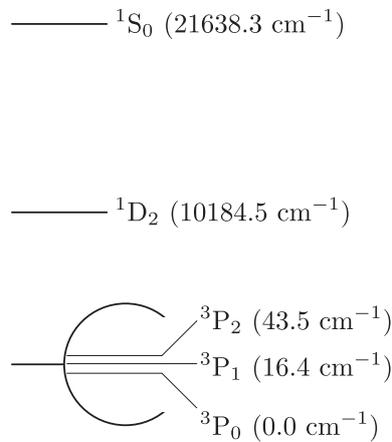


図 3: 炭素原子のエネルギー準位の微細構造

## 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

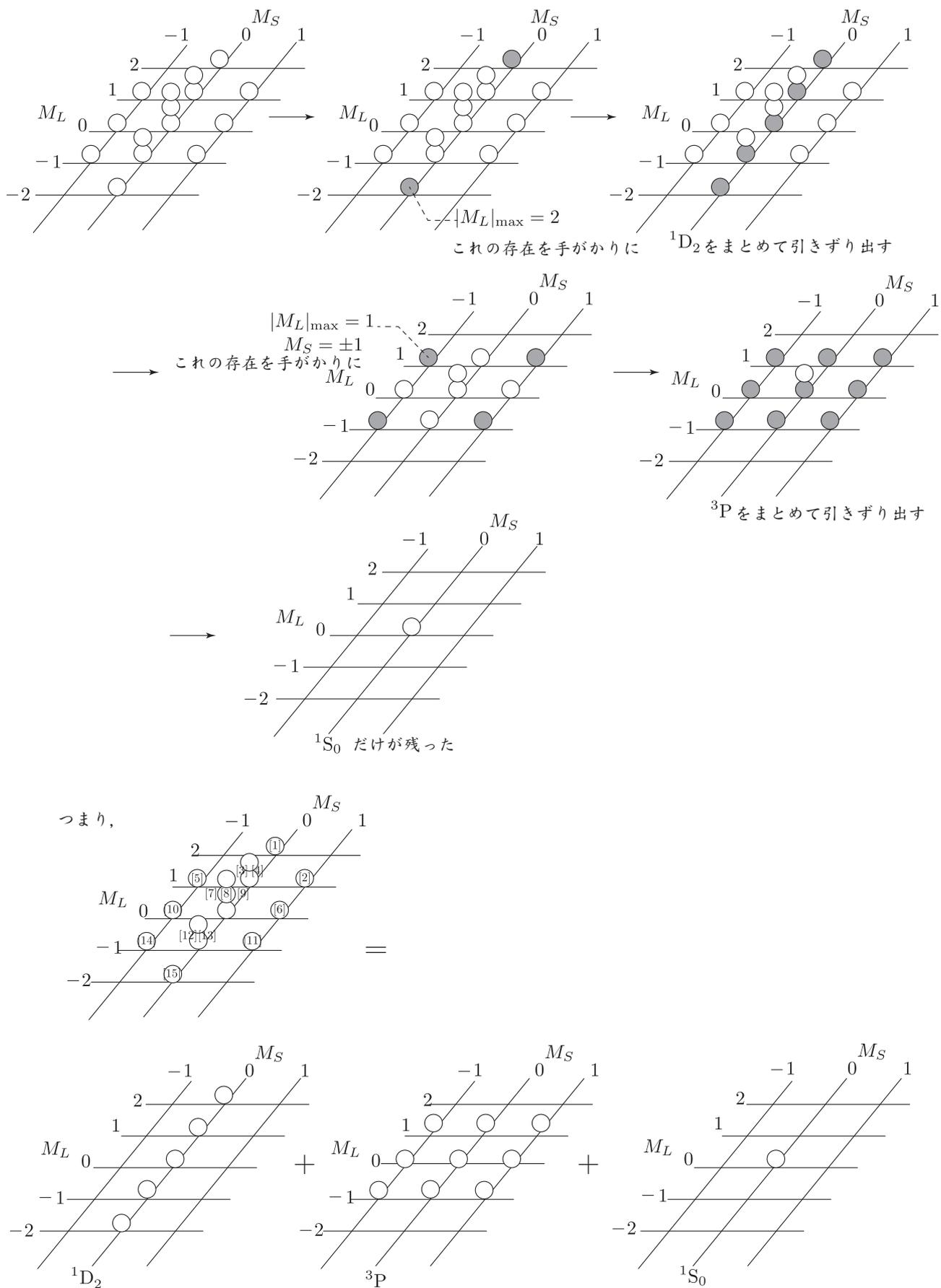


図 4:  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$  のスペクトル項を求める作業のイメージ

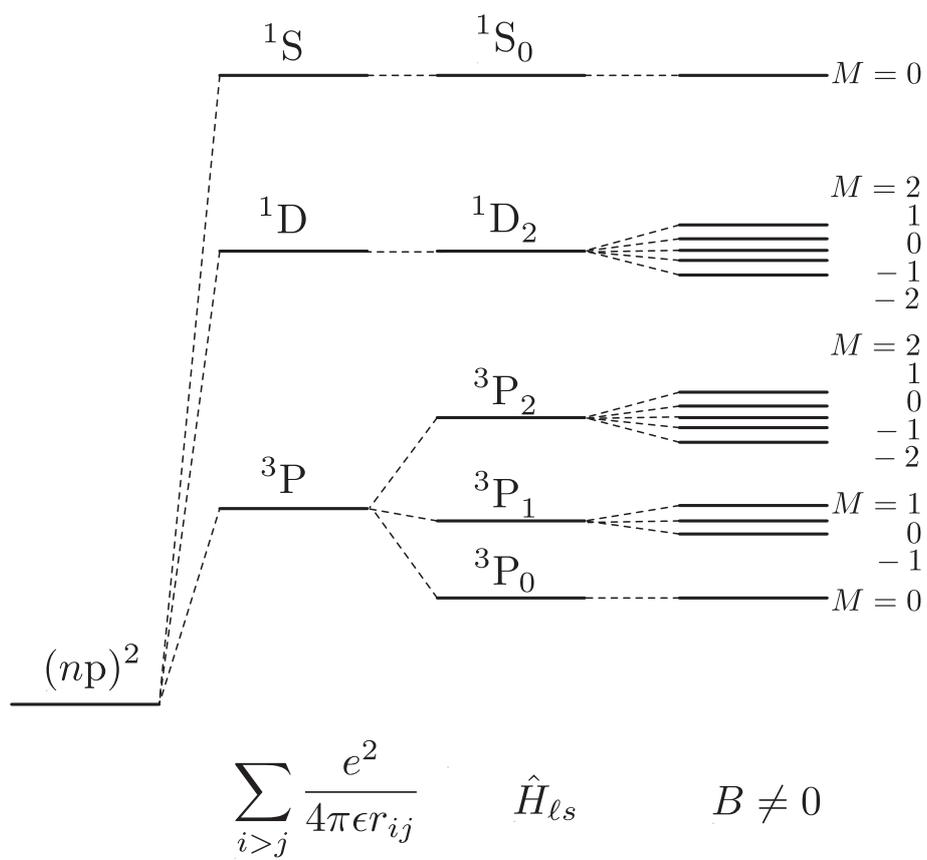


図 5: 電子配置  $(np)^2$  のエネルギー準位が分裂して行く様子。