

無機化学Ⅰ

後期 木曜日2限目 10時半～12時

理学研究科6号館401講義室

理学研究科 化学専攻
固体物性化学分科

北川 宏

IUPAC Periodic Table of the Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen 1.007 94(7)																	2 He helium 4.002 602(2)
3 Li lithium 6.941(2)	4 Be beryllium 9.012 182(3)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.0067(2)	8 O oxygen 15.9994(3)	9 F fluorine 18.998 4032(5)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.989 770(2)	12 Mg magnesium 24.3050(6)											13 Al aluminium 26.981 538(2)	14 Si silicon 28.0855(3)	15 P phosphorus 30.973 761(2)	16 S sulfur 32.065(5)	17 Cl chlorine 35.453(2)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955 910(8)	22 Ti titanium 47.867(1)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938 049(9)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 200(9)	28 Ni nickel 58.6934(2)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.409(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.64(1)	33 As arsenic 74.921 60(2)	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(1)	39 Y yttrium 88.905 85(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 38(2)	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium [97.9072]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.905 50(2)	46 Pd palladium 106.42(1)	47 Ag silver 107.8682(2)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(3)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.760(1)	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.904 47(3)	54 Xe xenon 131.293(6)
55 Cs caesium 132.905 45(2)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.9479(1)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.217(3)	78 Pt platinum 195.078(2)	79 Au gold 196.966 55(2)	80 Hg mercury 200.59(2)	81 Tl thallium 204.3833(2)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.980 38(2)	84 Po polonium [209.9824]	85 At astatine [209.9871]	86 Rn radon [222.0176]
87 Fr francium [223.0197]	88 Ra radium [226.0254]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [261.1088]	105 Db dubnium [262.1141]	106 Sg seaborgium [266.1219]	107 Bh bohrium [264.12]	108 Hs hassium [277]	109 Mt meitnerium [268.1388]	110 Ds darmstadtium [269]	111 Uuu unununium [272]	112 Uub ununbium [285]	114 Uuq ununquadium [289]		116 Uuh ununhexium [289]			
			57 La lanthanum 138.9055(2)	58 Ce cerium 140.116(1)	59 Pr praseodymium 140.907 65(2)	60 Nd neodymium 144.24(3)	61 Pm promethium [144.9127]	62 Sm samarium 150.36(3)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925 34(2)	66 Dy dysprosium 162.500(1)	67 Ho holmium 164.930 32(2)	68 Er erbium 167.259(3)	69 Tm thulium 168.934 21(2)	70 Yb ytterbium 173.04(3)	71 Lu lutetium 174.967(1)
			89 Ac actinium [227.0277]	90 Th thorium 232.0381(1)	91 Pa protactinium 231.036 88(2)	92 U uranium 238.028 91(3)	93 Np neptunium [237.0482]	94 Pu plutonium [244.0642]	95 Am americium [243.0614]	96 Cm curium [247.0704]	97 Bk berkelium [247.0703]	98 Cf californium [251.0796]	99 Es einsteinium [252.0830]	100 Fm fermium [257.0951]	101 Md mendelevium [258.0984]	102 No nobelium [259.1010]	103 Lr lawrencium [262.1097]

Notes

- IUPAC alternative names or spelling exist for the elements aluminium (aluminum) and caesium (cesium) and, in special circumstances, sodium (natrium), potassium (kalium), iron (ferrum), copper (cuprum), silver (argentum), tin (stannum), antimony (stibium), tungsten (wolfram), gold (aurum), mercury (hydrargyrum), and lead (plumbum).
- Relative atomic masses ('atomic weights') of elements with no IUPAC assigned standard values are listed between square brackets. IUPAC 2001 standard values are given for other elements, with uncertainties in the last figure in parentheses [R. Loss, Pure Appl. Chem. 75, 1107-1122 (2003)].
- Element with atomic number 111 has not yet been named. The IUPAC provisional name is shown.
- Claims for the existence of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have not been recognized by IUPAC as of August 2003.

2003年 IUPAC 無機化学部会
110番元素Ds(ダームスタチウムが承認)

元素の周期表 The Periodic Table

周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H 水素 Hydrogen 1.00798																	2 He ヘリウム Helium 4.0026
2	3 Li リチウム Lithium 6.968	4 Be ベリリウム Beryllium 9.01218											5 B 硼(ホウ)素 Boron 10.814	6 C 炭素 Carbon 12.0106	7 N 窒素 Nitrogen 14.0069	8 O 酸素 Oxygen 15.9994	9 F 弗(フッ)素 Fluorine 18.9984	10 Ne ネオン Neon 20.1797
3	11 Na ナトリウム Sodium 22.9898	12 Mg マグネシウム Magnesium 24.306											13 Al アルミニウム Aluminum 26.9815	14 Si 珪(ケイ)素 Silicon 28.085	15 P 燐(リン) Phosphorus 30.9738	16 S 硫黄 Sulfur 32.068	17 Cl 塩素 Chlorine 35.452	18 Ar アルゴン Argon 39.948
4	19 K カリウム Potassium 39.0983	20 Ca カルシウム Calcium 40.078	21 Sc スカンジウム Scandium 44.9559	22 Ti チタン Titanium 47.867	23 V バナジウム Vanadium 50.9415	24 Cr クロム Chromium 51.9961	25 Mn マンガン Manganese 54.938	26 Fe 鉄 Iron 55.845	27 Co コバルト Cobalt 58.9332	28 Ni ニッケル Nickel 58.6934	29 Cu 銅 Copper 63.546	30 Zn 亜鉛 Zinc 65.38	31 Ga ガリウム Gallium 69.723	32 Ge ゲルマニウム Germanium 72.630	33 As 砒(ヒ)素 Arsenic 74.9216	34 Se セレン Selenium 78.971	35 Br 臭素 Bromine 79.904	36 Kr クリプトン Krypton 83.798
5	37 Rb ルビジウム Rubidium 85.4678	38 Sr ストロンチウム Strontium 87.62	39 Y イットリウム Yttrium 88.9058	40 Zr ジルコニウム Zirconium 91.224	41 Nb ニオブ Niobium 92.9064	42 Mo モリブデン Molybdenum 95.95	43 Tc テクネチウム Technetium [99]	44 Ru ルテニウム Ruthenium 101.07	45 Rh ロジウム Rhodium 102.906	46 Pd パラジウム Palladium 106.42	47 Ag 銀 Silver 107.868	48 Cd カドミウム Cadmium 112.414	49 In インジウム Indium 114.818	50 Sn 錫(スズ) Tin 118.710	51 Sb アンチモン Antimony 121.760	52 Te テルル Tellurium 127.60	53 I 沃(ヨウ)素 Iodine 126.904	54 Xe キセノン Xenon 131.293
6	55 Cs セシウム Cesium 132.905	56 Ba バリウム Barium 137.327	※1	72 Hf ハフニウム Hafnium 178.49	73 Ta タンタル Tantalum 180.948	74 W タングステン Tungsten 183.84	75 Re レニウム Rhenium 186.207	76 Os オスミウム Osmium 190.23	77 Ir イリジウム Iridium 192.217	78 Pt 白金(プラチナ) Platinum 195.084	79 Au 金 Gold 196.967	80 Hg 水銀 Mercury 200.592	81 Tl タリウム Thallium 204.384	82 Pb 鉛 Lead 207.2	83 Bi ビスマス Bismuth 208.980	84 Po ポロニウム Polonium [210]	85 At アスタチン Astatine [210]	86 Rn ラドン Radon [222]
7	87 Fr フランシウム Francium [223]	88 Ra ラジウム Radium [226]	※2	104 Rf ラザホーギウム Rutherfordium [267]	105 Db ドブニウム Dubnium [268]	106 Sg シーボーギウム Seaborgium [271]	107 Bh ボーリウム Bohrium [272]	108 Hs ハッシウム Hassium [277]	109 Mt マイトネリウム Meitnerium [276]	110 Ds ダームスタチウム Darmstadtium [281]	111 Rg レントゲニウム Roentgenium [280]	112 Cn コペルニシウム Copernicium [285]	113 Nh ニホニウム Nihonium [278]	114 Fl フレロビウム Flerovium [289]	115 Mc モスコビウム Moscovium [289]	116 Lv リバモリウム Livermorium [293]	117 Ts テネシン Tennessine [293]	118 Og オガネソン Oganesson [294]

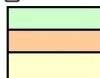
※1 ランタノイド系	57 La ランタン Lanthanum 138.905	58 Ce セリウム Cerium 140.116	59 Pr プラセオジウム Praseodymium 140.908	60 Nd ネオジウム Neodymium 144.242	61 Pm プロメチウム Promethium [145]	62 Sm サマリウム Samarium 150.36	63 Eu ユウロピウム Europium 151.964	64 Gd ガドリニウム Gadolinium 157.25	65 Tb テルビウム Terbium 158.925	66 Dy ジスプロシウム Dysprosium 162.500	67 Ho ホルミウム Holmium 164.930	68 Er エルビウム Erbium 167.259	69 Tm ツリウム Thulium 168.934	70 Yb イットルビウム Ytterbium 173.045	71 Lu ルテチウム Lutetium 174.967
※2 アクチノイド系	89 Ac アクチニウム Actinium [227]	90 Th トリウム Thorium 232.038	91 Pa プロトアクチニウム Protactinium 231.036	92 U ウラン Uranium 238.029	93 Np ネプツニウム Neptunium [237]	94 Pu プルトニウム Plutonium [239]	95 Am アメリシウム Americium [243]	96 Cm キュリウム Curium [247]	97 Bk バーケリウム Berkelium [247]	98 Cf カリホルニウム Californium [252]	99 Es アインスタイニウム Einsteinium [252]	100 Fm フェルミウム Fermium [257]	101 Md メンデレビウム Mendelevium [258]	102 No ノーベリウム Nobelium [259]	103 Lr ローレンシウム Lawrencium [262]

表の見方

セル内の表記

原子番号	元素記号
元素名(日本語)	
元素名(英語)	
原子量	

セルの色



の元素は、単体の物質が**金属**的性質(光沢がある、電気や熱をよく通す、陽イオンになりやすい、など)を持つ。

の元素は、単体の物質が**非金属**的性質を持つ。

の元素は、単体の物質がその中間の(半導体的、半金属的)性質を持つ、ことを示す。

[元素記号の色]

赤字は、単体の物質が常温・常圧(25℃、1気圧)で**気体**。

青字は、単体の物質が常温・常圧で**液体**。

黒字は、単体の物質が常温・常圧で**固体**である、ことを示す。

※ 原子量が範囲で示される元素の原子量は、簡単のため、範囲の中間値を記した。

※ 安定同位体がなく、天然で特定の同位体組成を示さない元素については、その元素の放射性同位体の質量数の一例を [] 内に記した。

参考文献

国立天文台編「理科年表 2018年版」、丸善

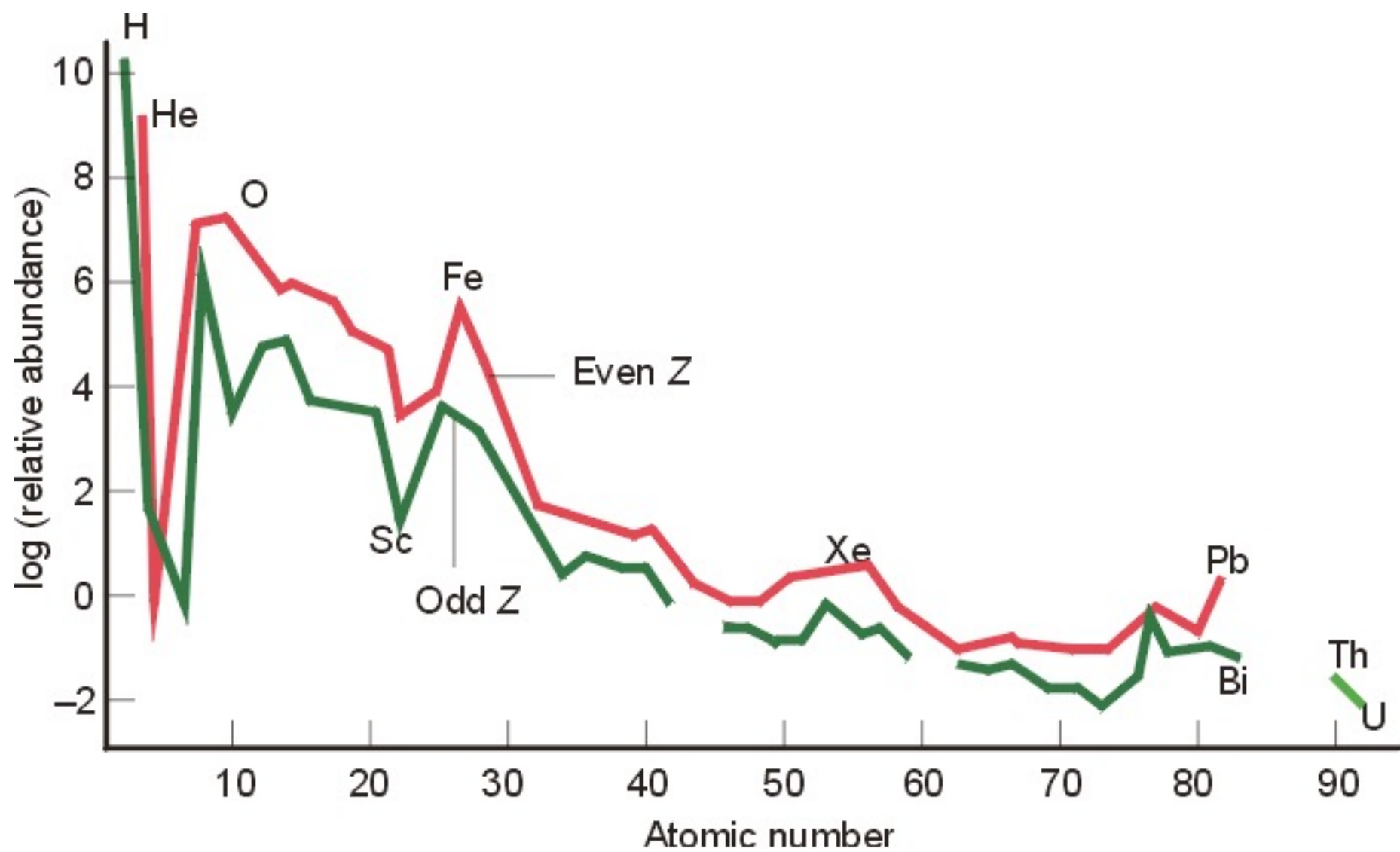
... 他

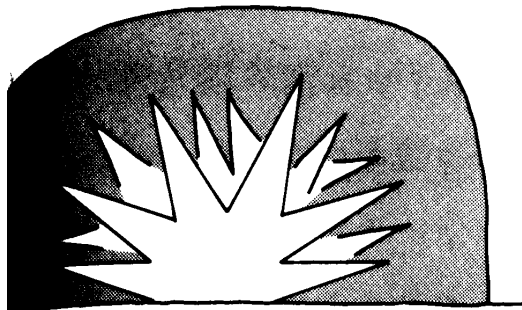
元素の種類：118

分子の種類：> 600万（1990年時点）

クロロフィルの分子構造の決定
： フィッシャー（ドイツ）
1930年ノーベル化学賞

現在では5000万種以上、1億種以上という説もある。





150億年前、1000億℃

ビッグバン

水素原子の誕生

5000℃

分子の雲ができる

星の誕生

重い原子ができる

核融合反応

星の爆発

3000℃

大きな分子ができる

生命の誕生



ビッグバンから物質の歴史が始まる

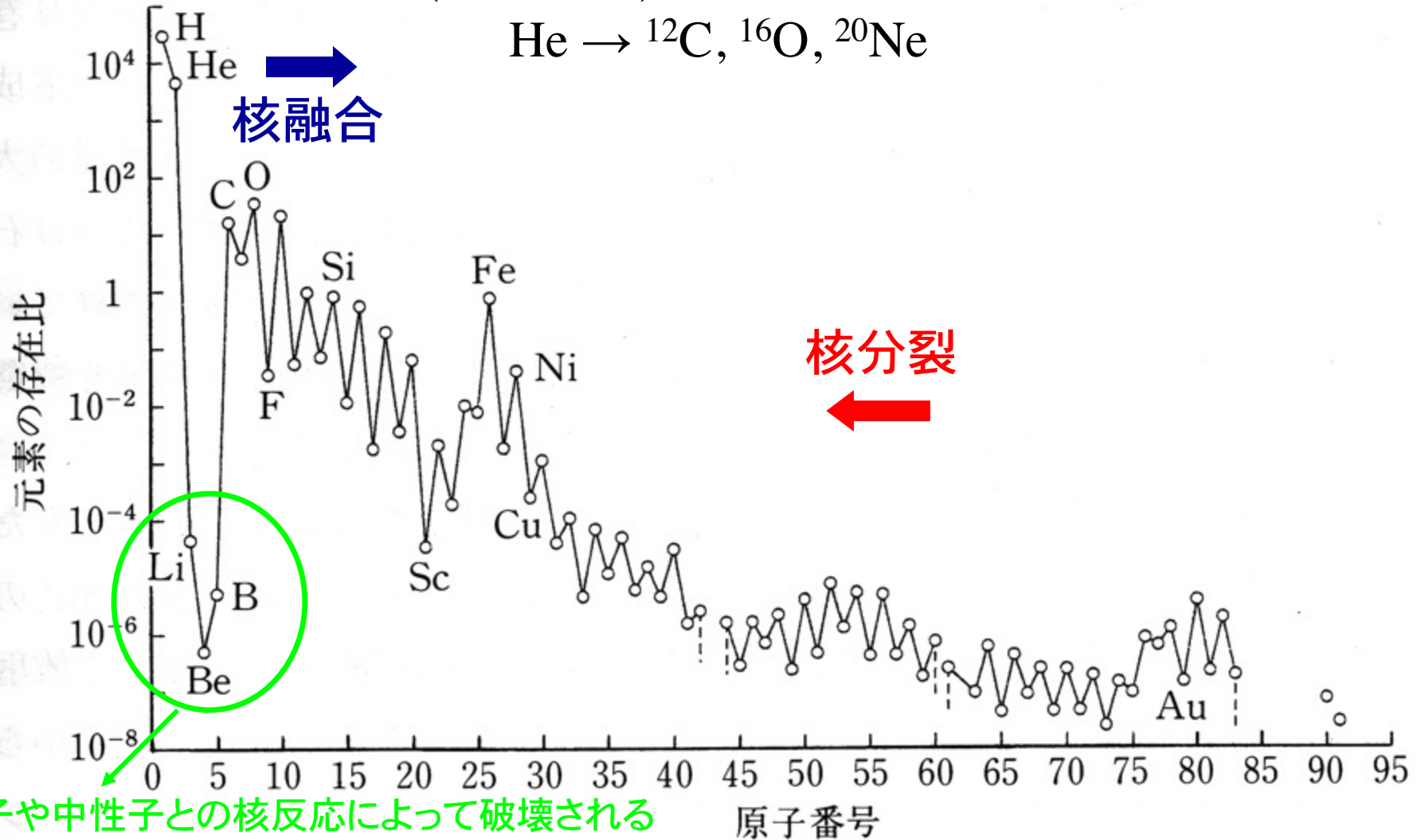
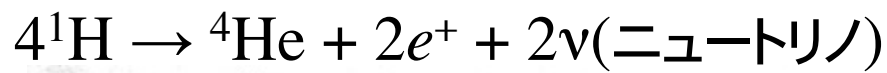
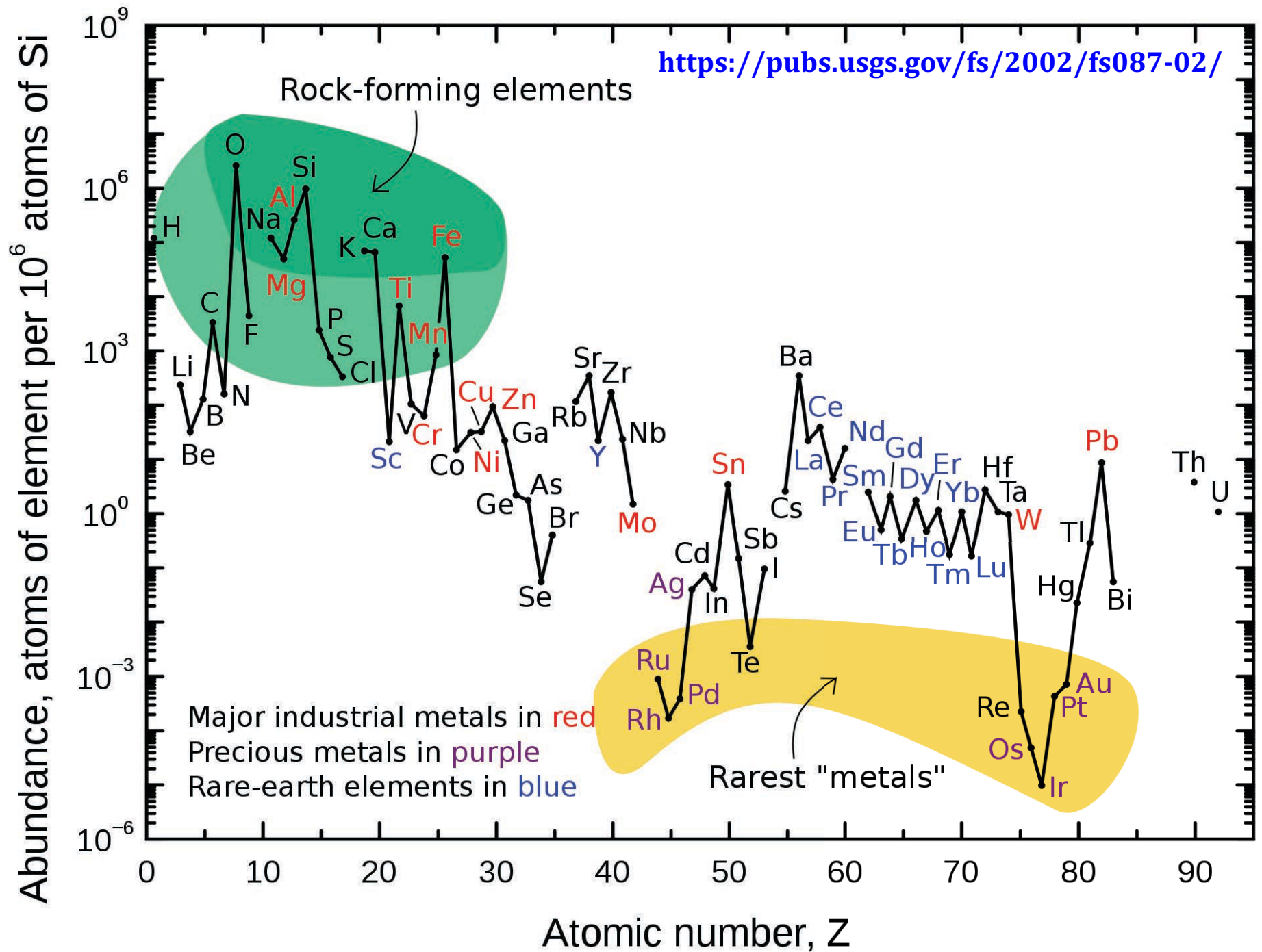


図 1.1 宇宙における元素の存在比. Si を 1 にとってある. [松井義人：地球科学 4 地球の物質科学 III (岩波書店, 1979), p. 265]



Irの価格推移

Ir Price Data
(1995.9 ~ 2021.8)

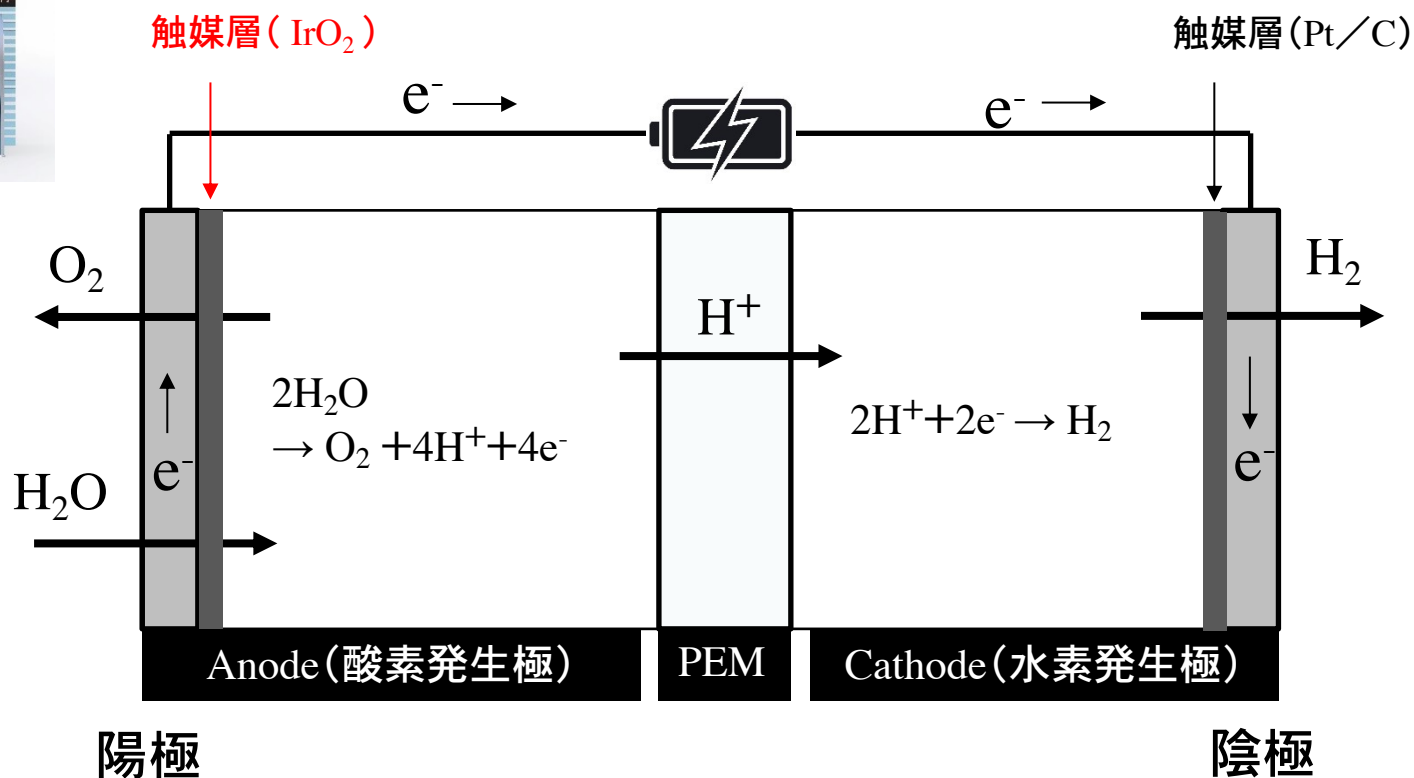
— Johnson Matthey Base Price

(\$/toz) **1 toz (トロイオンス)
= 31.1035 g**



PEM(固体高分子形)水電解電極システムの概要

水電解触媒では、高い触媒性能と耐久性を実現するためにPGMが使用されている。
(アノード極の酸素発生反応でIr、カソード極の水素発生反応でPtが使用されている。)
⇒ 酸素発生について、実際はRuの性能が高いが、耐久性の問題でIrが使用されている。



- **2020年7月に欧州委員会から発表された「欧州の気候中立に向けた水素戦略」の中で2030年時の水電解設置容量目標が80GW（PEM型：40GW、アルカリ型：40GWと推定）で設定されている。**
- **上記80GWはEU域内＋EU域外（ウクライナ、北アフリカ）とされており、これに米国、中国、日本、その他の国の数字が付加されることを想定して、2030年時の世界水電解設置容量をPEM水電解で100GWと推定出来る。**
- **2030年ロードマップ目標値をベースにIr使用量を計算すると100GW投入時に40トンのIrが必要になり、年産8トン（この内、実質的に水電解に使用できる量は2～3トン程度と推定）ではカバーすることが困難である。**

水電解水素製造の課題：触媒必要量

水電解を普及させるには、Ir使用量を現状想定レベルの**1/10**未満にする必要有

1/10未満

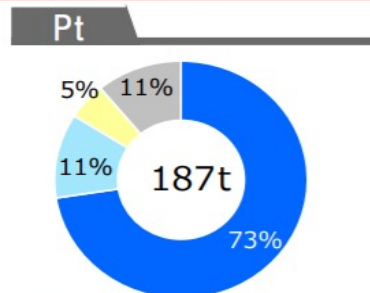
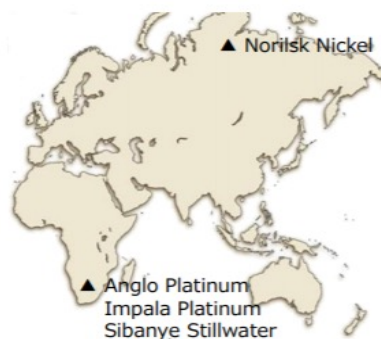
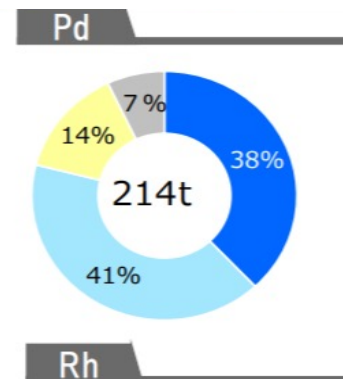
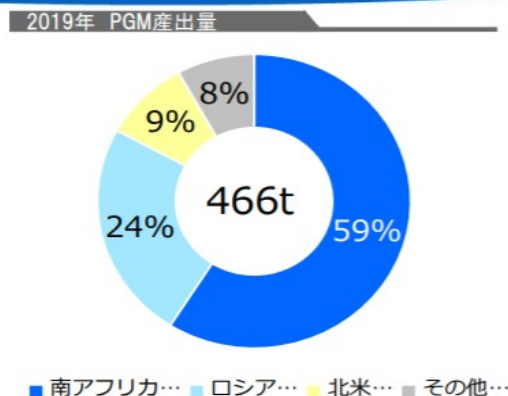
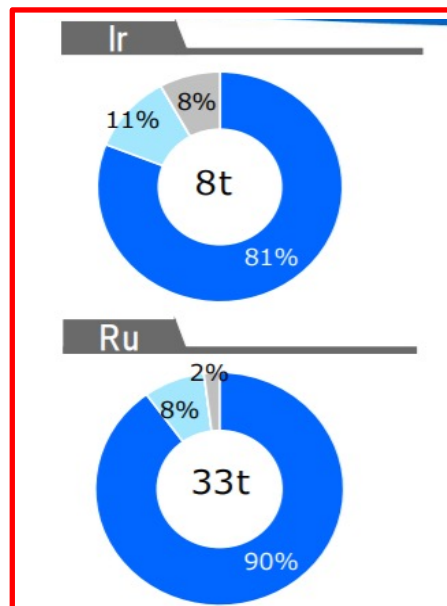


項目		ロードマップ ※1 (2020年時予測)	ロードマップ ※1 (2030年時予測)	開発目標イメージ (2030年)
電流密度	A/cm ²	2.2	2.5	—
触媒金属	種類	PGMと記載	PGMと記載	多元素ナノ合金
Anode触媒金属使用量	mg/W	2.7	0.4	0.01
【1GW】発電容量の触媒重量	t	2.7	0.4	0.01
【10GW】発電容量の触媒重量	t	27	4	0.1
【100GW】発電容量の触媒重量	t	270	40	1

※1 2019年水素・燃料電池戦略協議会 水素・燃料電池戦略ロードマップ

2019年 世界のPGM産出量

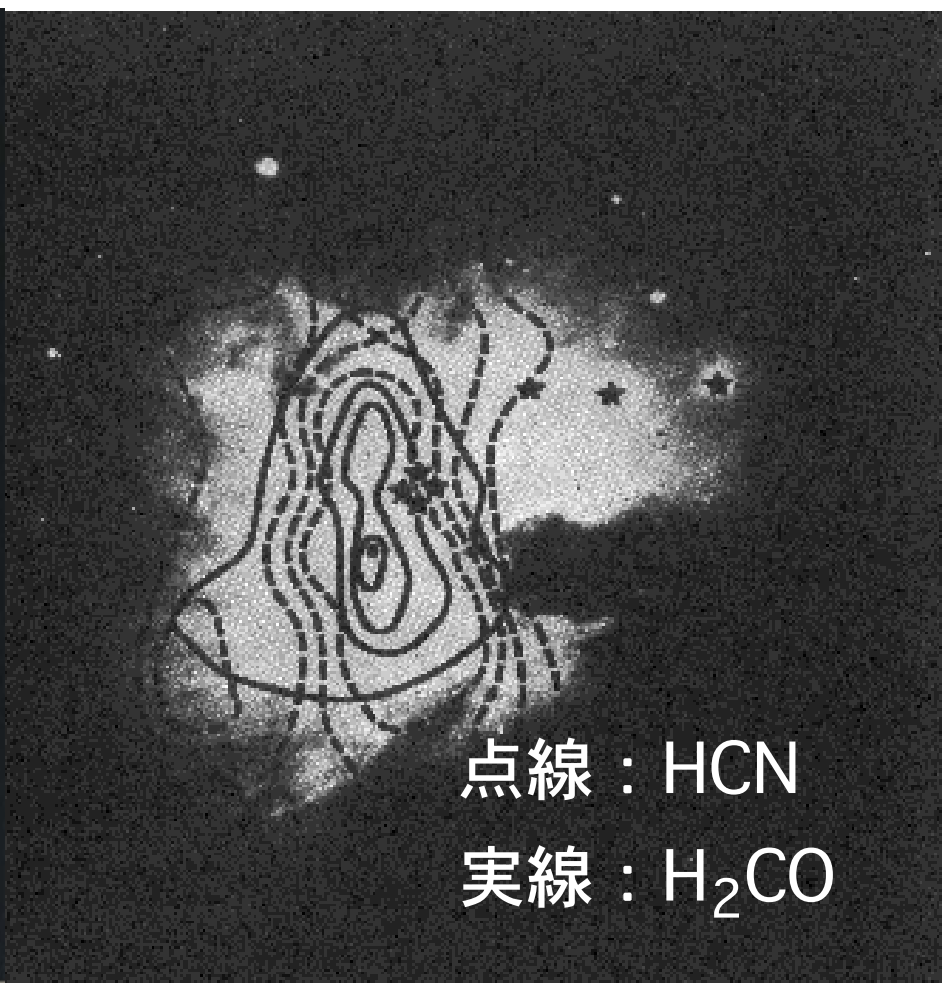
IrはPGMの中で最も産出量の少ない元素であり、少量で効果的に使う必要がある。



【多元素ナノ合金触媒による物質循環社会の実現】

作るほどきれいになる夢の社会 グリーンファクトリー





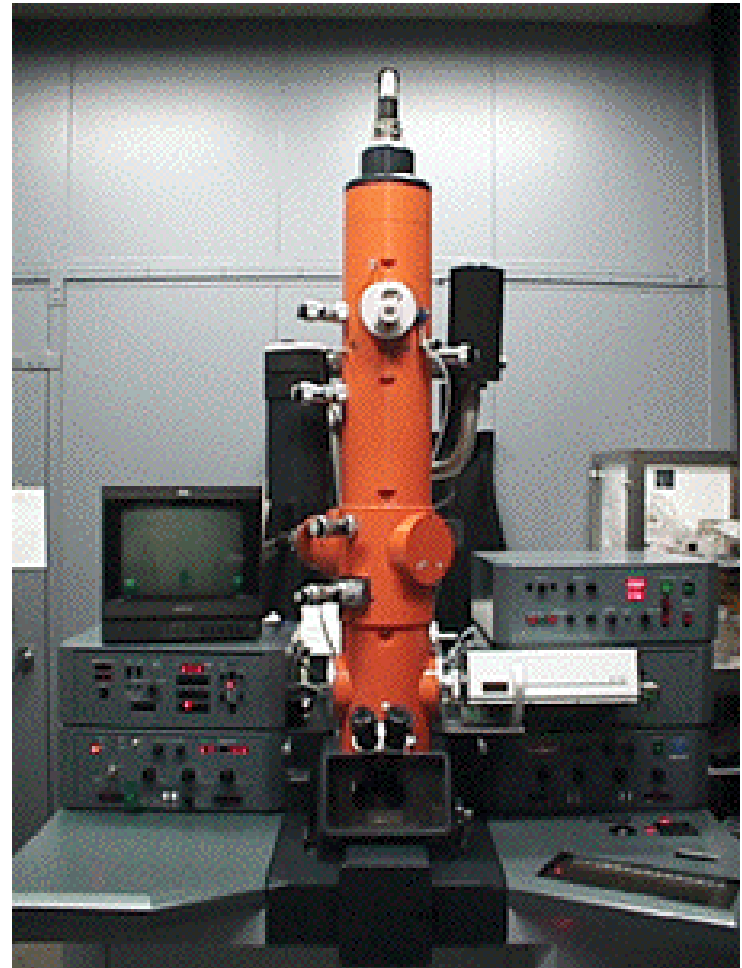
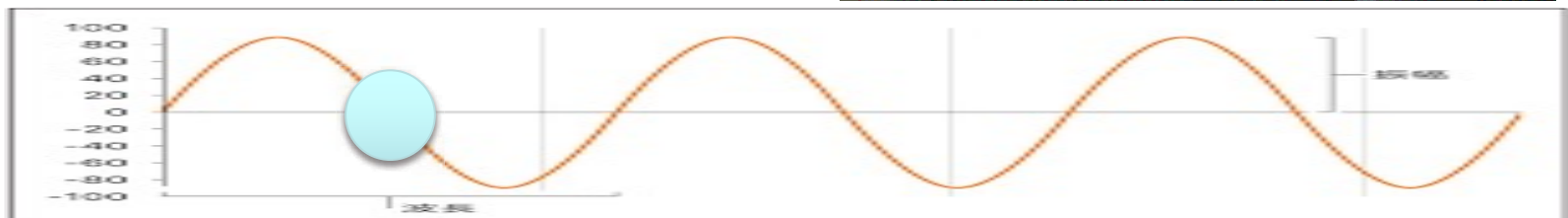
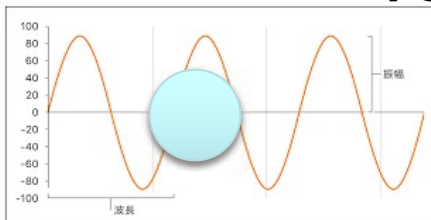
点線 : HCN

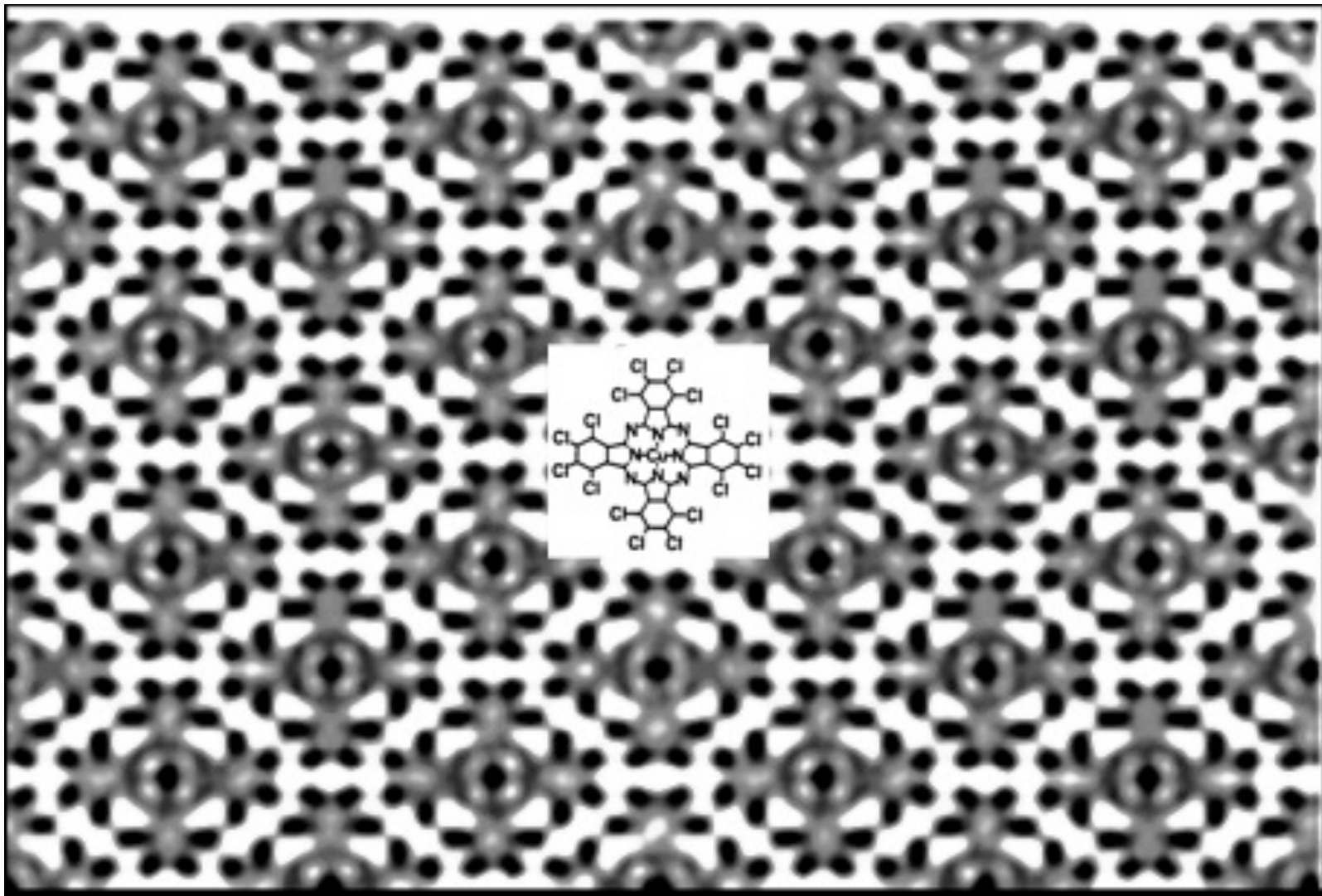
実線 : H₂CO

高分解能電子顕微鏡

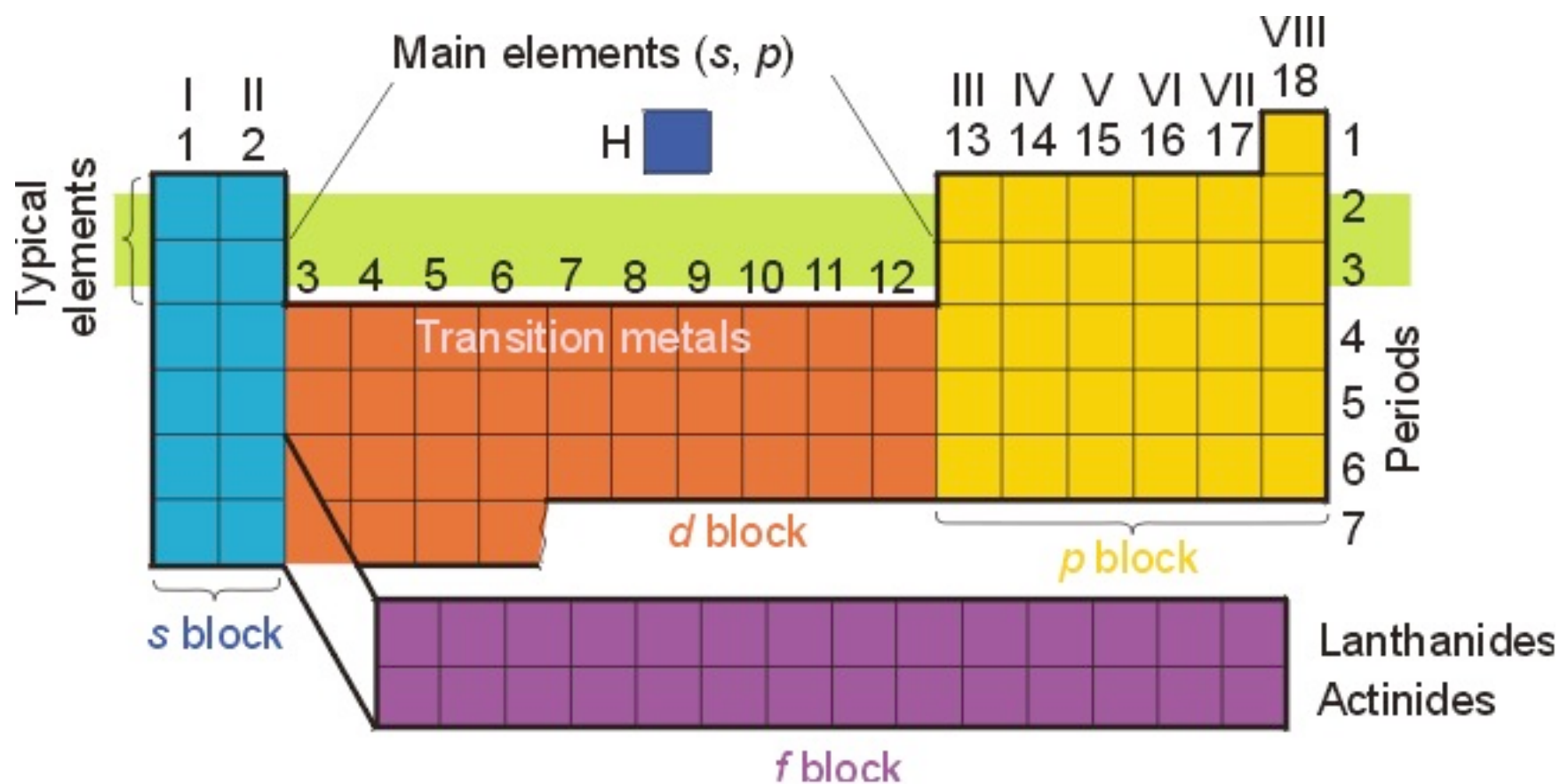
観測に用いる波長以下の
の像は見えない

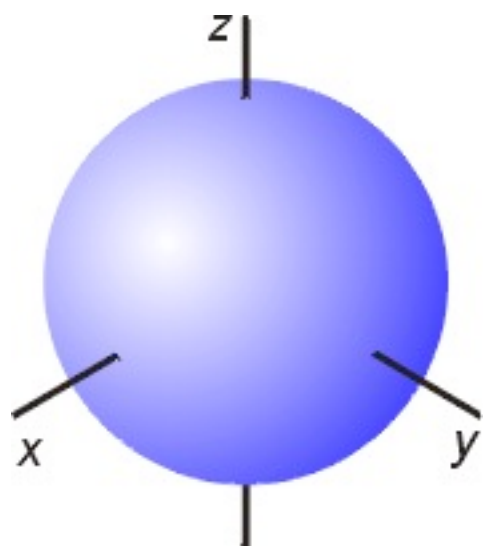
$$E = h \frac{c}{\lambda}$$

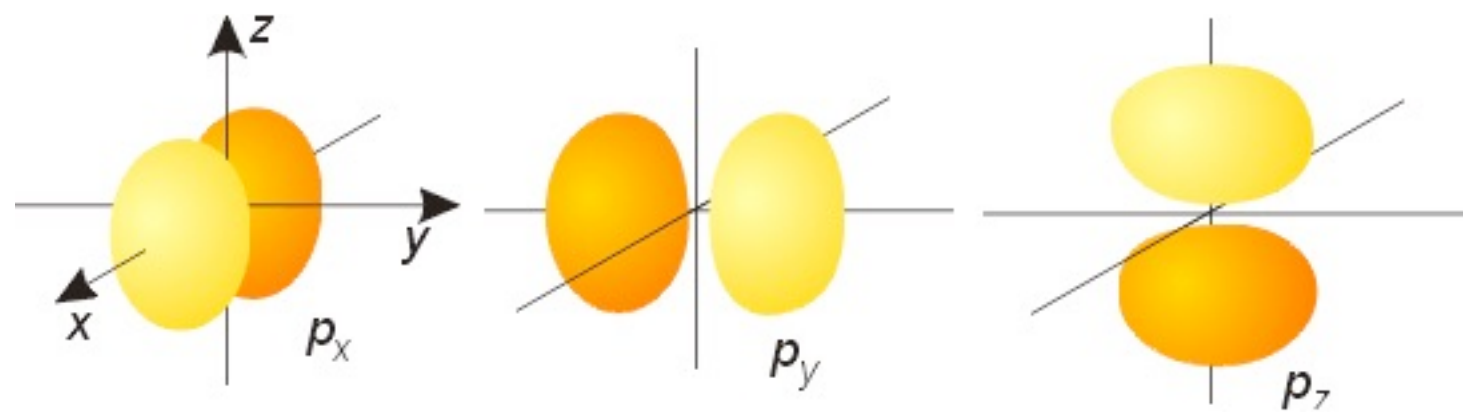


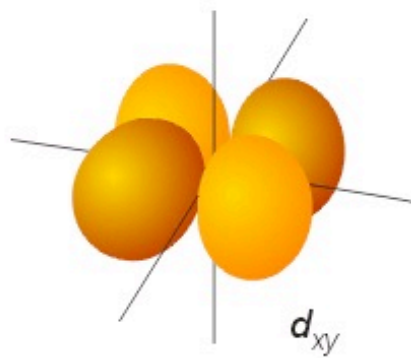
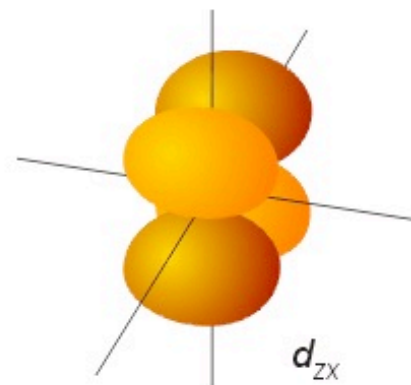
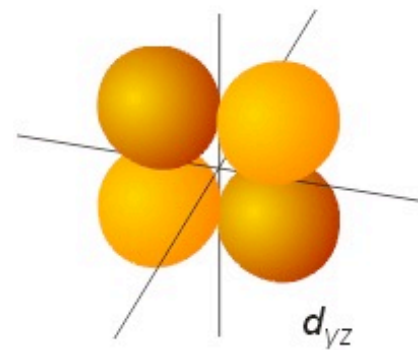
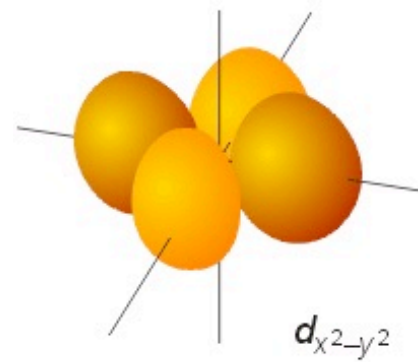
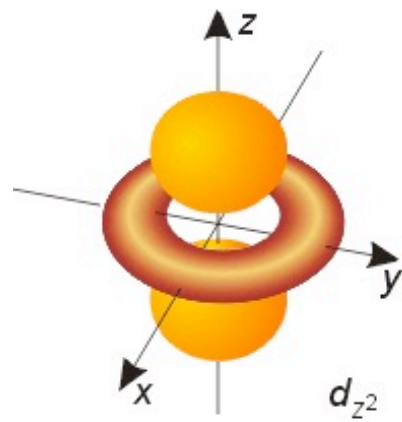


植田 夏(京大名誉教授)

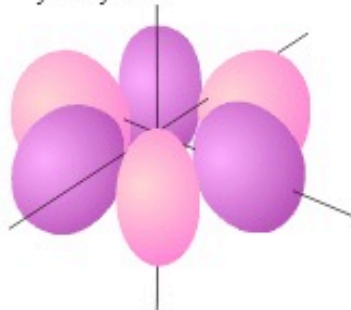




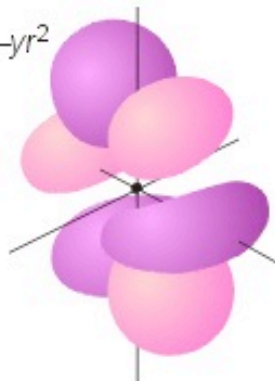




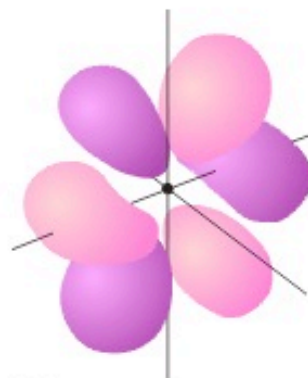
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



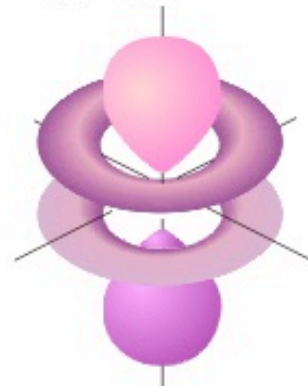
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



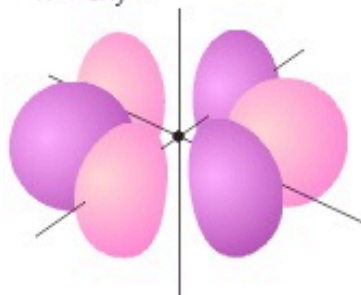
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



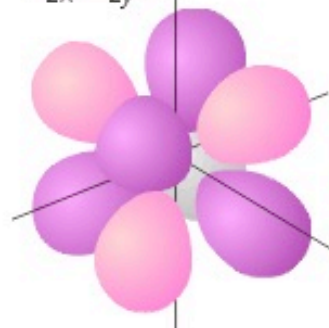
$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



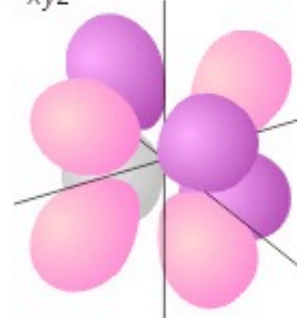
$$4f_{x^3-3xy^2}$$

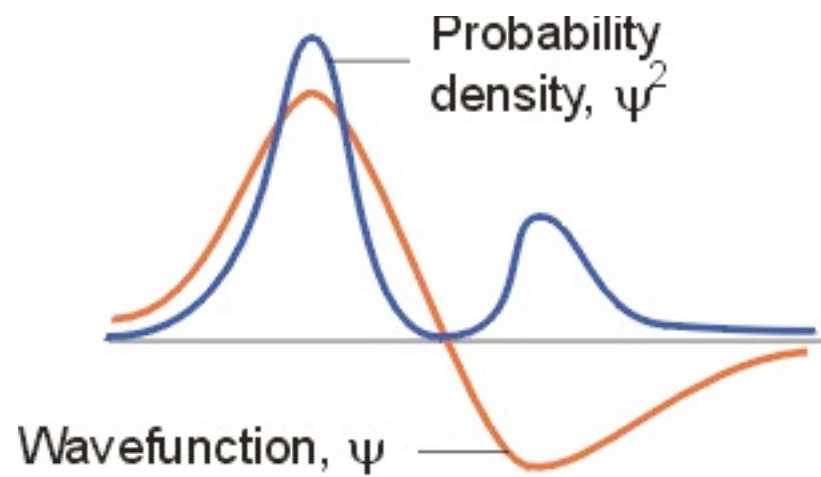


$$4f_{zx^2-zy^2}$$

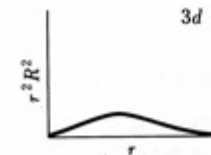
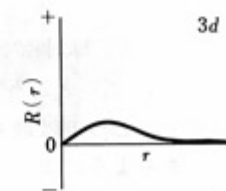
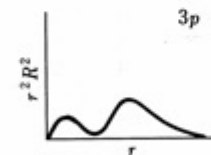
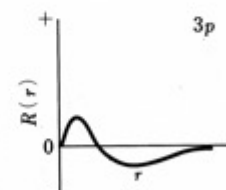
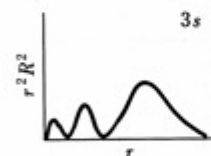
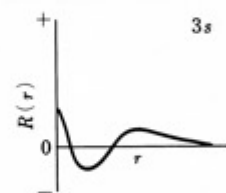
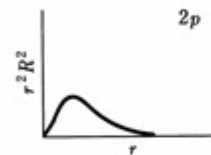
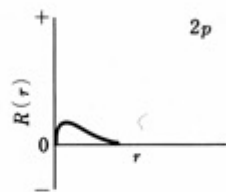
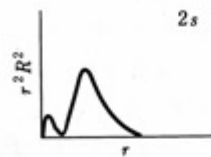
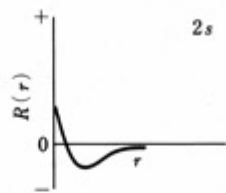
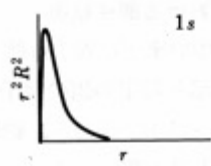
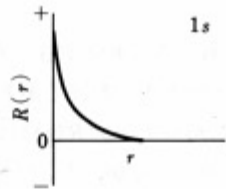


$$4f_{xyz}$$





Probability
density



(a)

(b)

ボーア半径: a_0
Bohr radius

$$a_0 = 5.29177210903(80) \times 10^{-11} \text{ m} \\ = 1 \text{ a.u.}$$

図 2-7 水素類似波動関数のプロット。(a) 原子核からの距離 r に対する動径関数 $R(r)$ 。(b) 原子核からの距離 r に対する確率密度分布関数 $r^2 R^2(r)$ 。図によって二つの座標軸の値の範囲が違っていることに注意していただきたい。

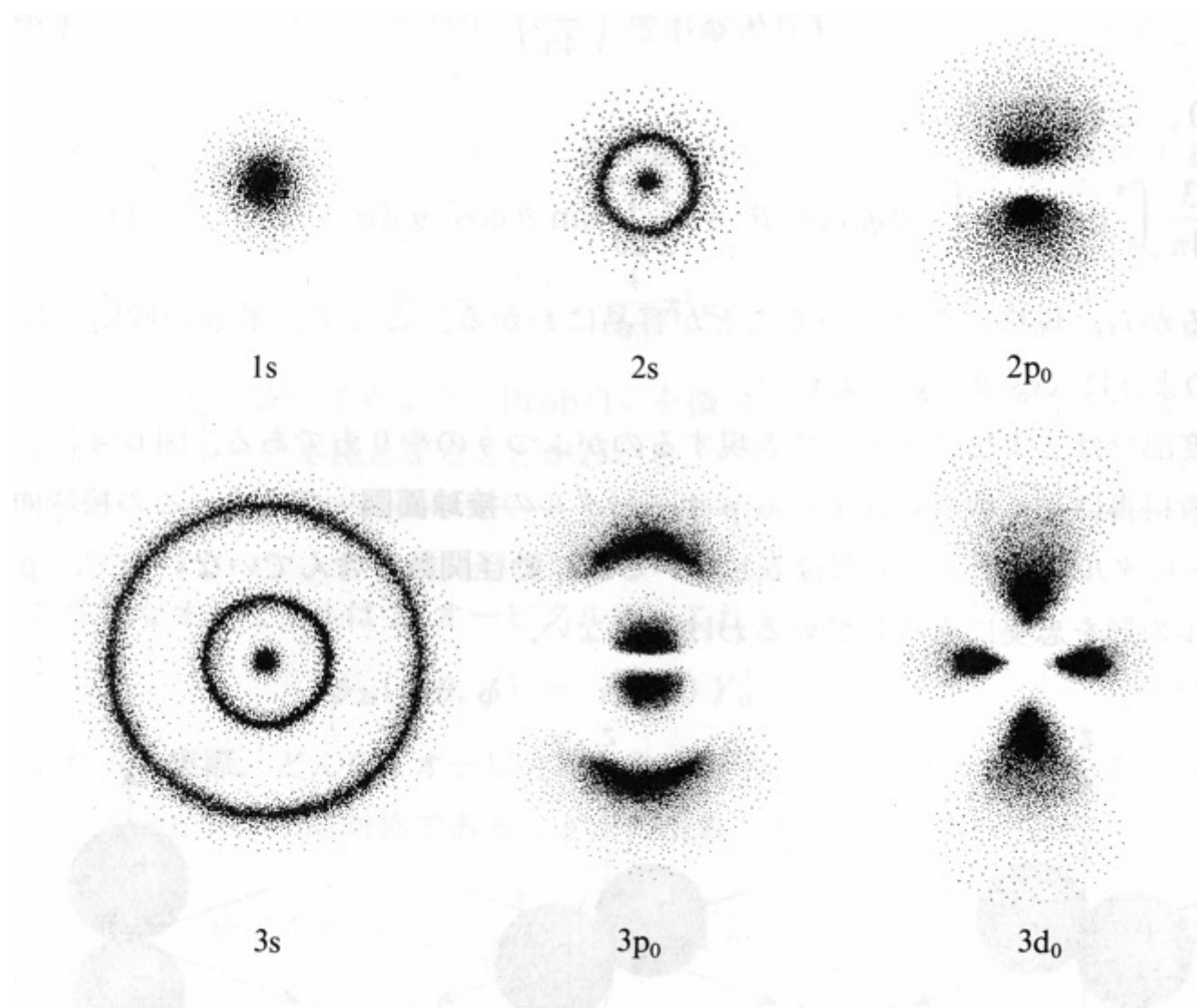
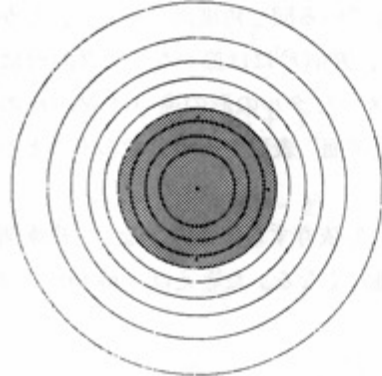
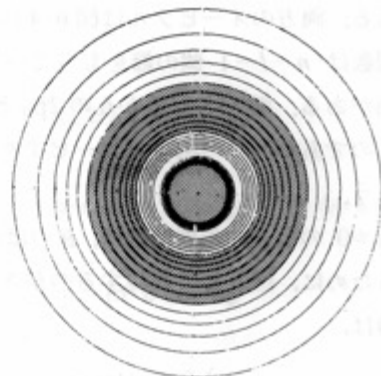


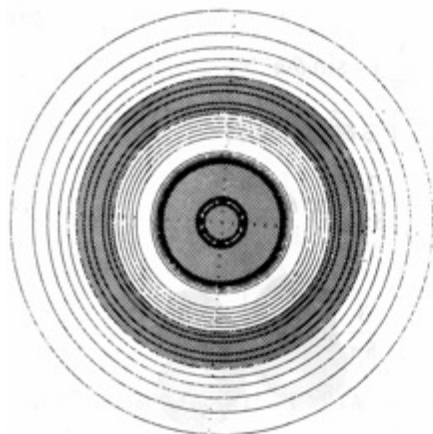
図 6・5 水素原子オービタルの確率密度プロット．点の密度がその領域に電子を見つける確率に比例する．



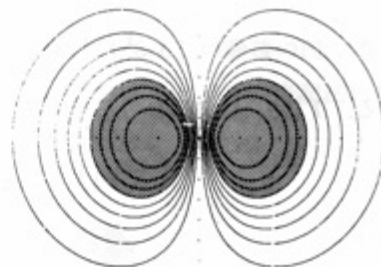
(a) 1s



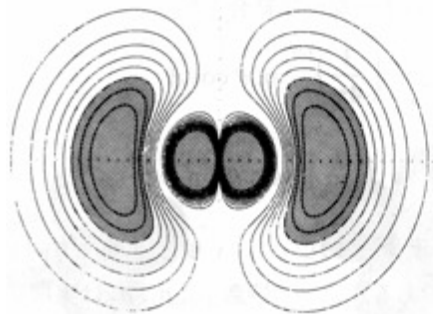
(b) 2s



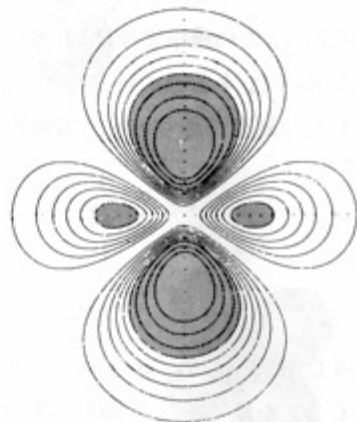
(c) 3s



(d) 2p₀



(e) 3p₀



(f) 3d₀

水素原子オービタルの確率等高線地図。おのこの図に示した9本の等高線は、各等高線の内側に電子を見つける確率が10%, 20%, ..., 90%になるように囲っている。図のスケールは左右に並んだ小さな印で示してある。一つの印ごとに1ボーア半径 a_0 に対応する。オービタルごとにスケールが違うことに注意せよ。影をつけた領域は確率密度の高い部分で全体の40%が入る領域を示している。

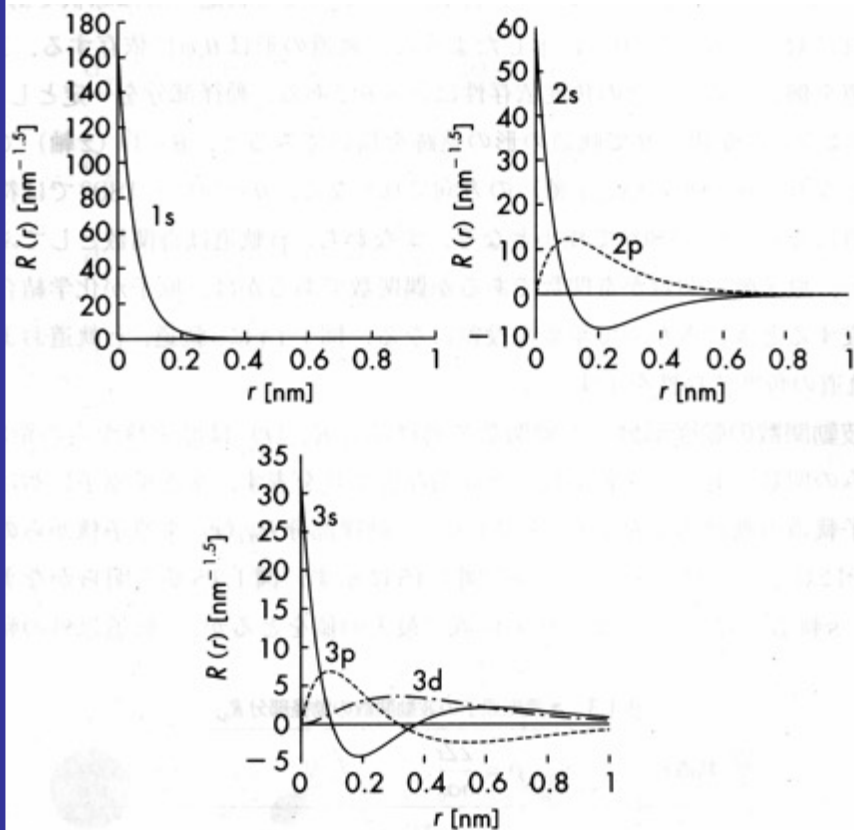
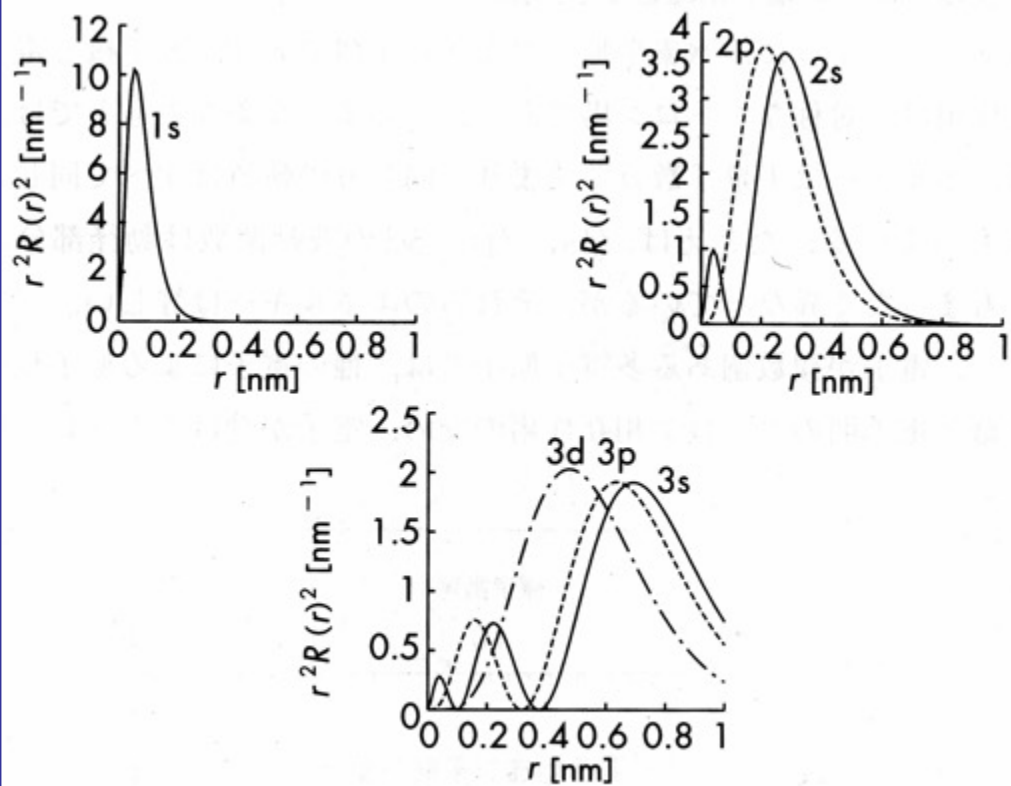
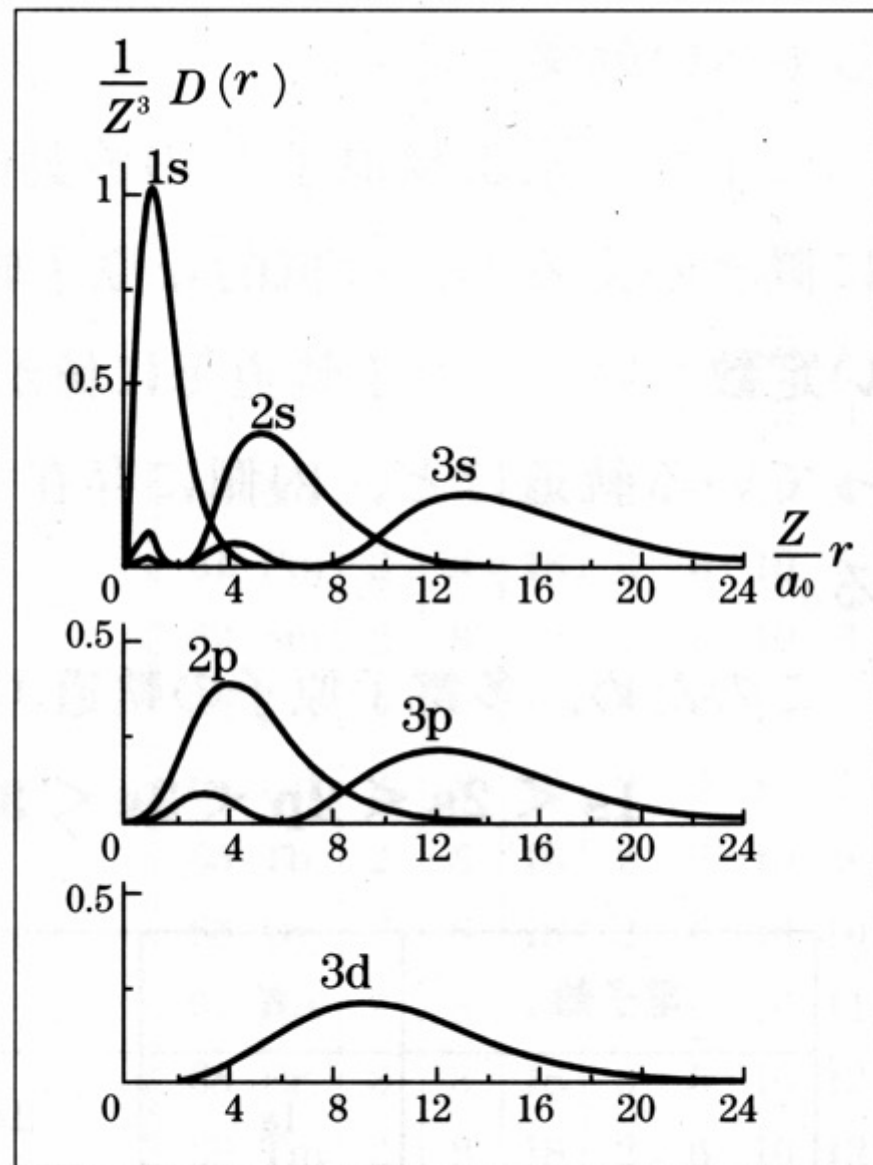


図 1.15 水素原子における動径部分 $R_{n,l}(r)$ の r 依存性.



水素原子における動径分布関数 $D_{n,l}(r)$ の r 依存性.



1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 3d
軌道の動径分布関数 $D(r)$

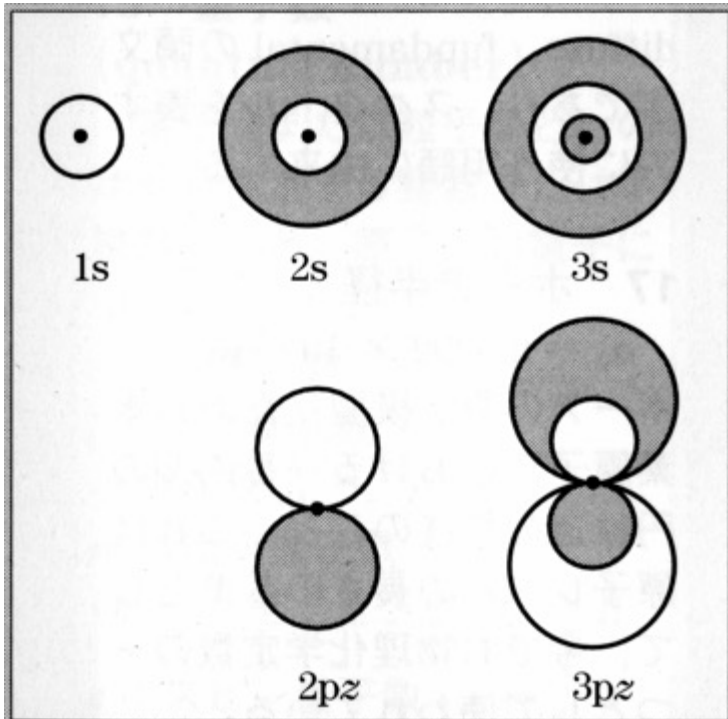
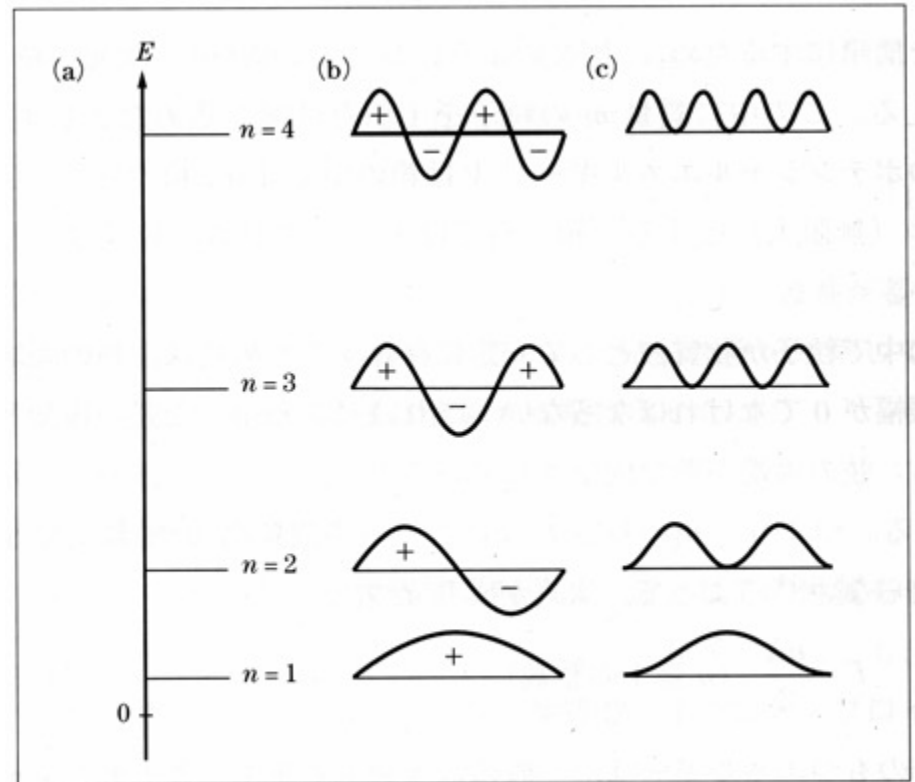


図6 軌道の空間分布の模式図
(白は正、黒は負、中央の黒丸は原子核)



一次元の箱の中の粒子

(a) エネルギー準位, (b) 波動関数 Ψ , (c) 存在密度 $|\Psi|^2$

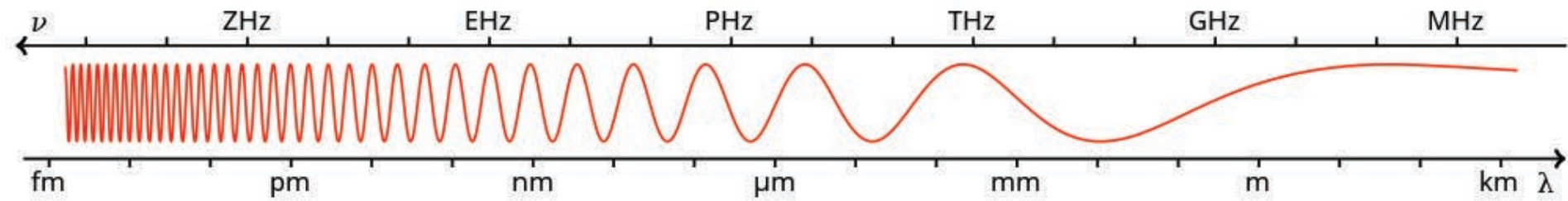
$$c = v \times \lambda$$

$$E = h \times v = h \times$$

$$\frac{c}{\lambda}$$

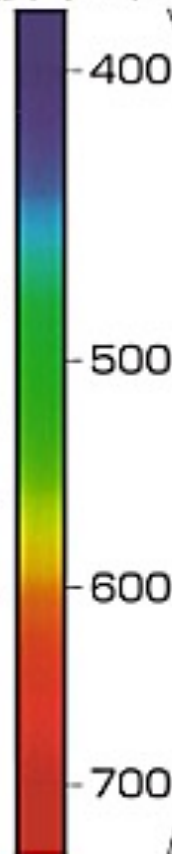
c : 光速、 h : プランク定数

v : 振動数、 λ : 波長

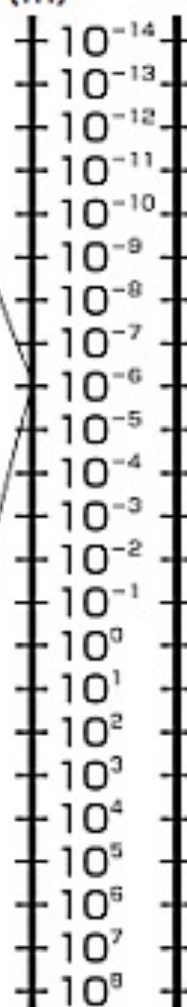


可
視
光
線

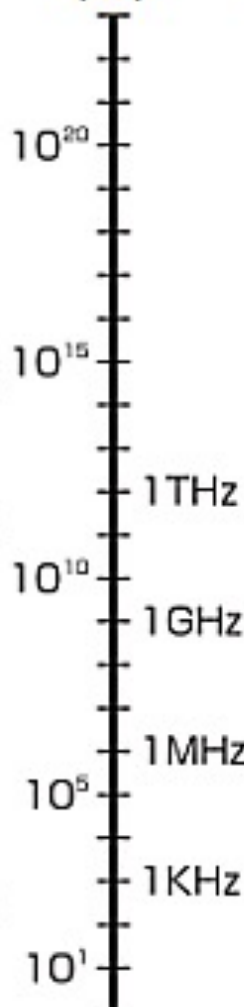
波長 (nm)



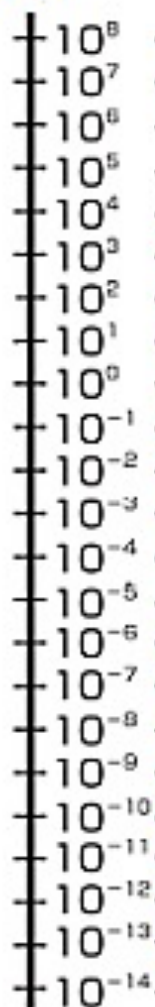
波 長
(m)



振動数
周波数
(Hz)



エネルギー
(eV)



ガンマ線

エックス線

極遠紫外 (真空紫外)

遠紫外

近紫外

可視光

近赤外

中赤外

遠赤外

サブミリ波

ミリ波 (EHF)

センチ波 (SHF)

極超短波 (UHF)

超短波 (VHF)

短波 (HF)

中波 (MF)

長波 (LF)

超長波 (VLF)

超低周波 (電磁界)

放射線

紫外線

赤外線

マイクロ波

電波

電磁放射線

非電磁放射線

用途

科学機器
医療機器

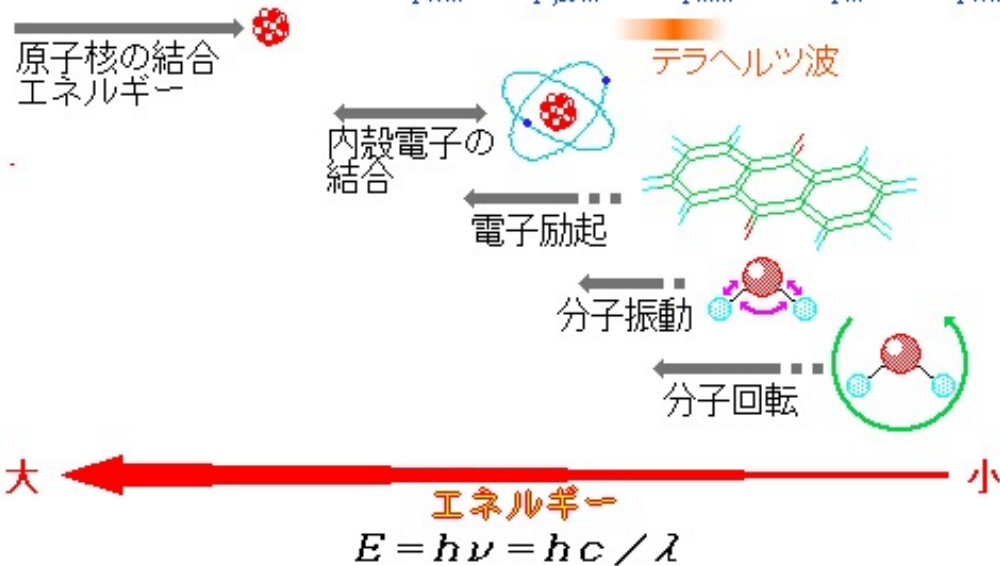
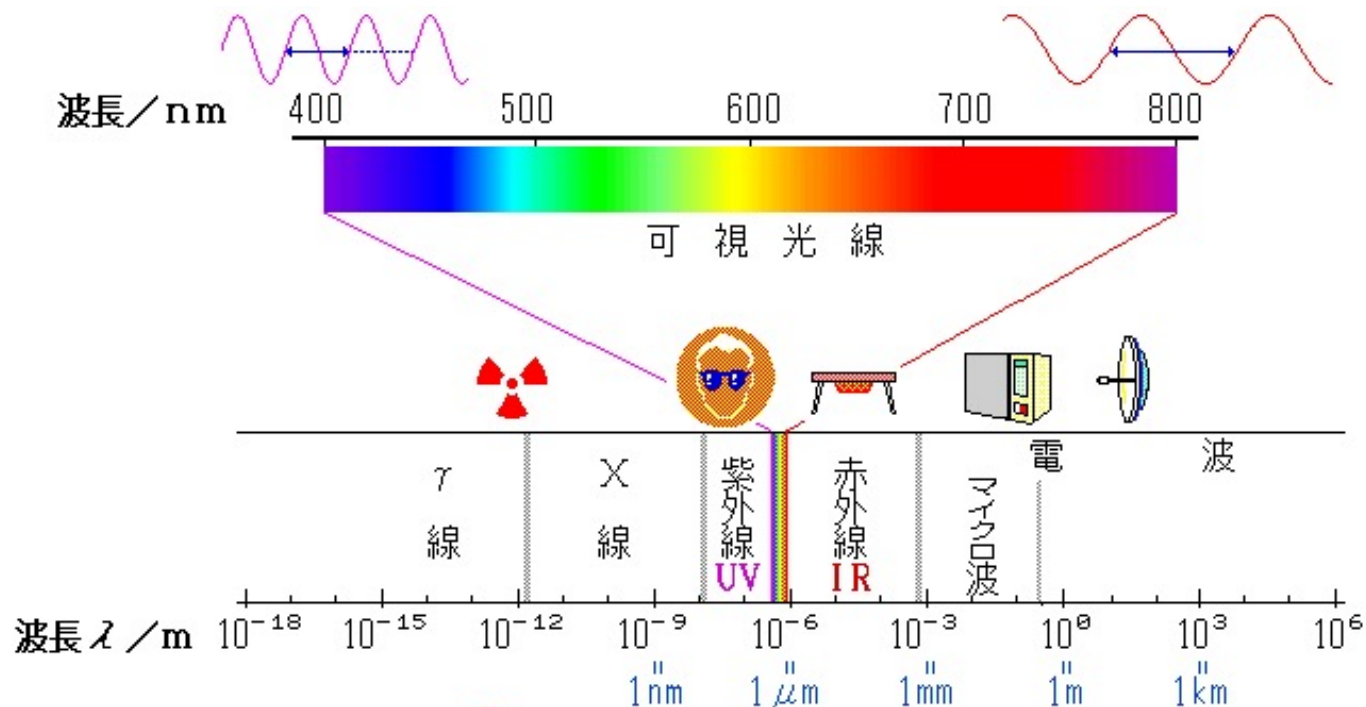
殺菌灯
ブラックライト
蛍光灯、白熱電灯
赤外線ヒータ

光通信
衛星通信・レーダ
電子レンジ、
携帯電話
TV放送

ラジオ

高圧送電線



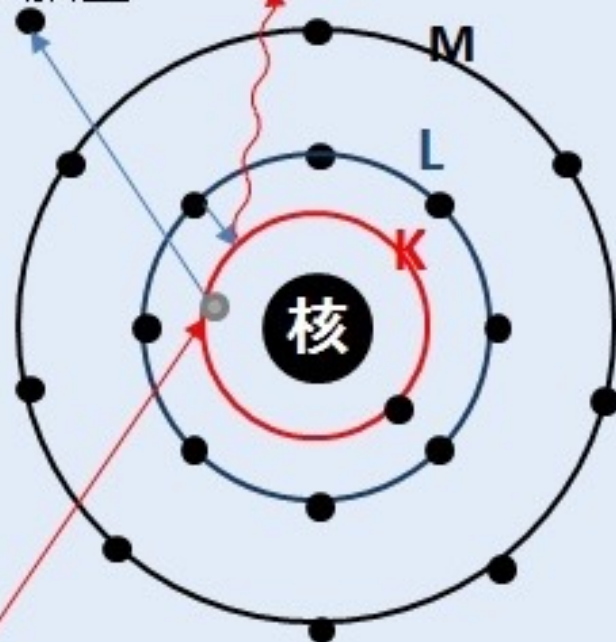


電磁波（光）の波長とエネルギー

光電子

電子の放出

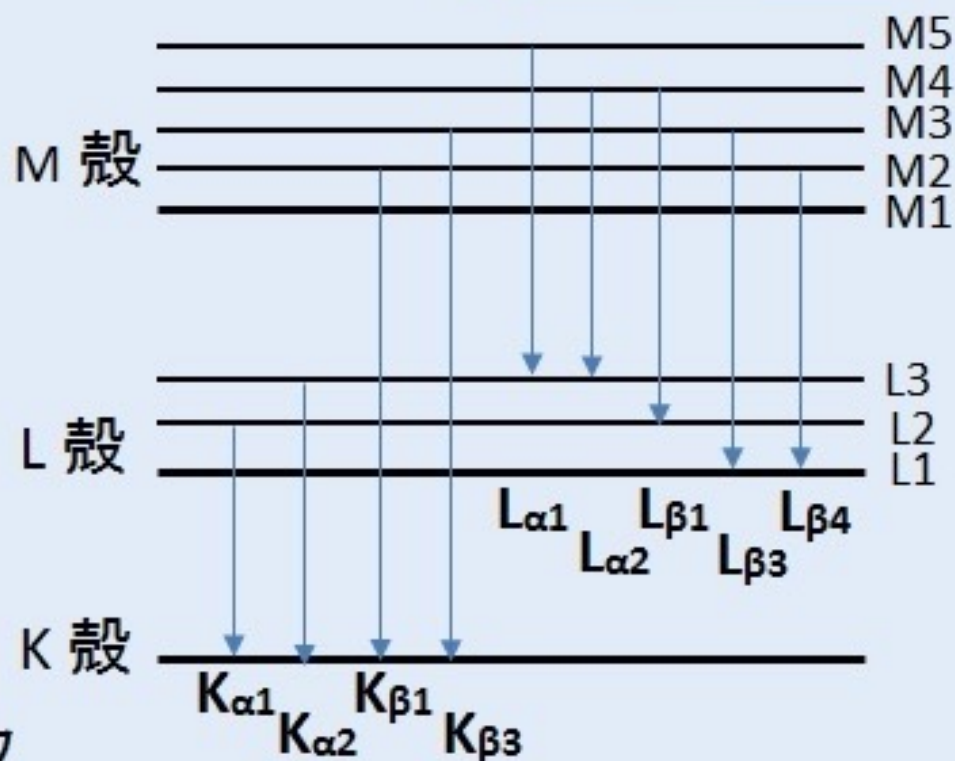
K α 線



エネルギー (X線, 電子線) 吸収



技術情報館SEKIGIN



THz(テラヘルツ波): Terahertz(300GHz-3THz、0.1-1mm)サブミリ波(光と電波の境界)、電波天文学、非破壊検査、腫瘍・火薬・薬物の検出

EHF(ミリ波): Extremely High Frequency(30GHz-300GHz、1mm-10mm)ミリ波、車載レーダー(極めて狭い指向性)、全身透視スキャナー

SHF(マイクロ波): Super High Frequency(3GHz-30GHz、1cm-10cm)センチメートル波、衛星放送(BS/CS)、無線LAN、レーダー、5G通信

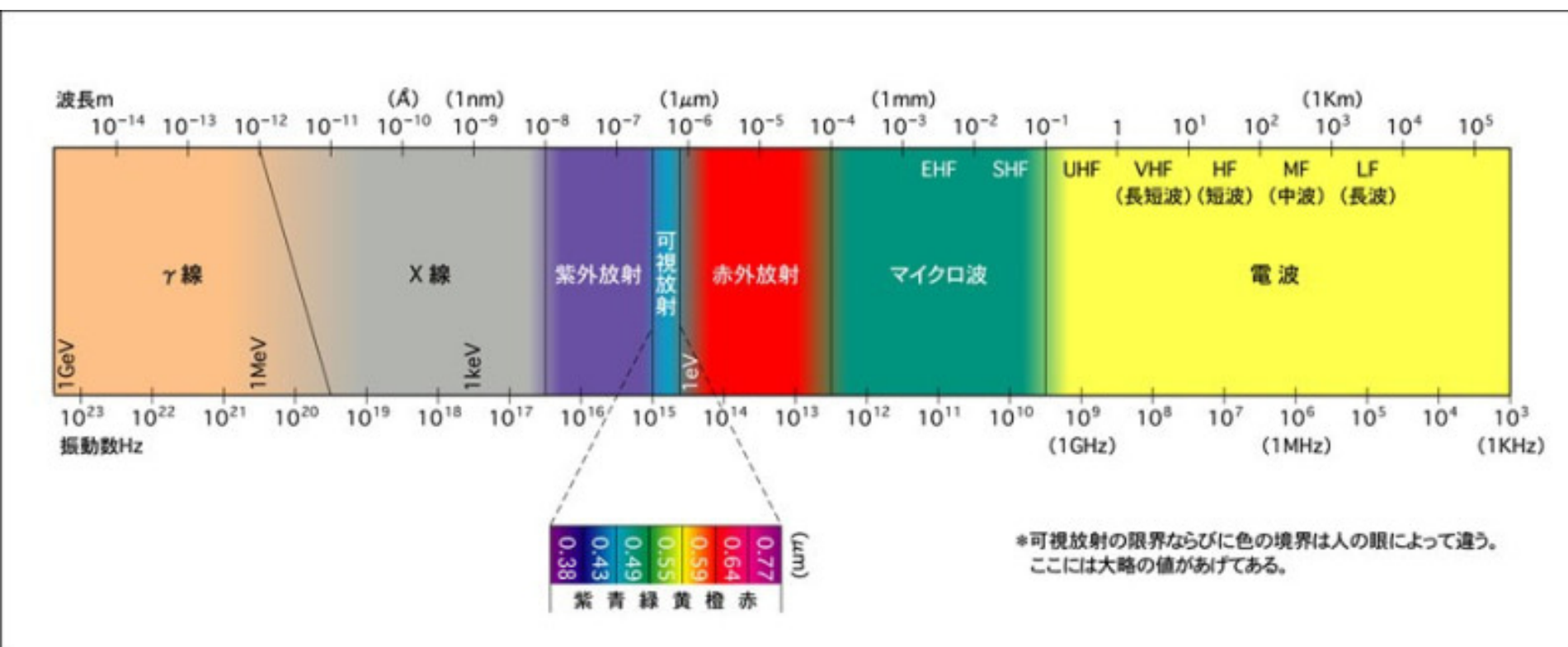
UHF(極超短波): Ultra High Frequency(300MHz-3GHz、10cm-1m)デシメートル波 携帯電話、UHF-TV

VHF(超短波): Very High Frequency(30MHz-300MHz、1m-10m)メートル波 VHF-TV、FMラジオ

HF(短波): High Frequency(3MHz-30MHz、10m-100m)デカメートル波 CB無線

MF(中波): Medium Frequency(300kHz-3MHz、100m-1km)ヘクトメートル波 AMラジオ

LF(長波): Low Frequency(30kHz-300kHz、1km-10km)キロメートル波 電波時計



海外まで飛ばすアマチュア無線の場合は、例えば、

1 4 MHz 帯 (波長: 20mバンド)

2 1 MHz 帯 (波長: 15mバンド)

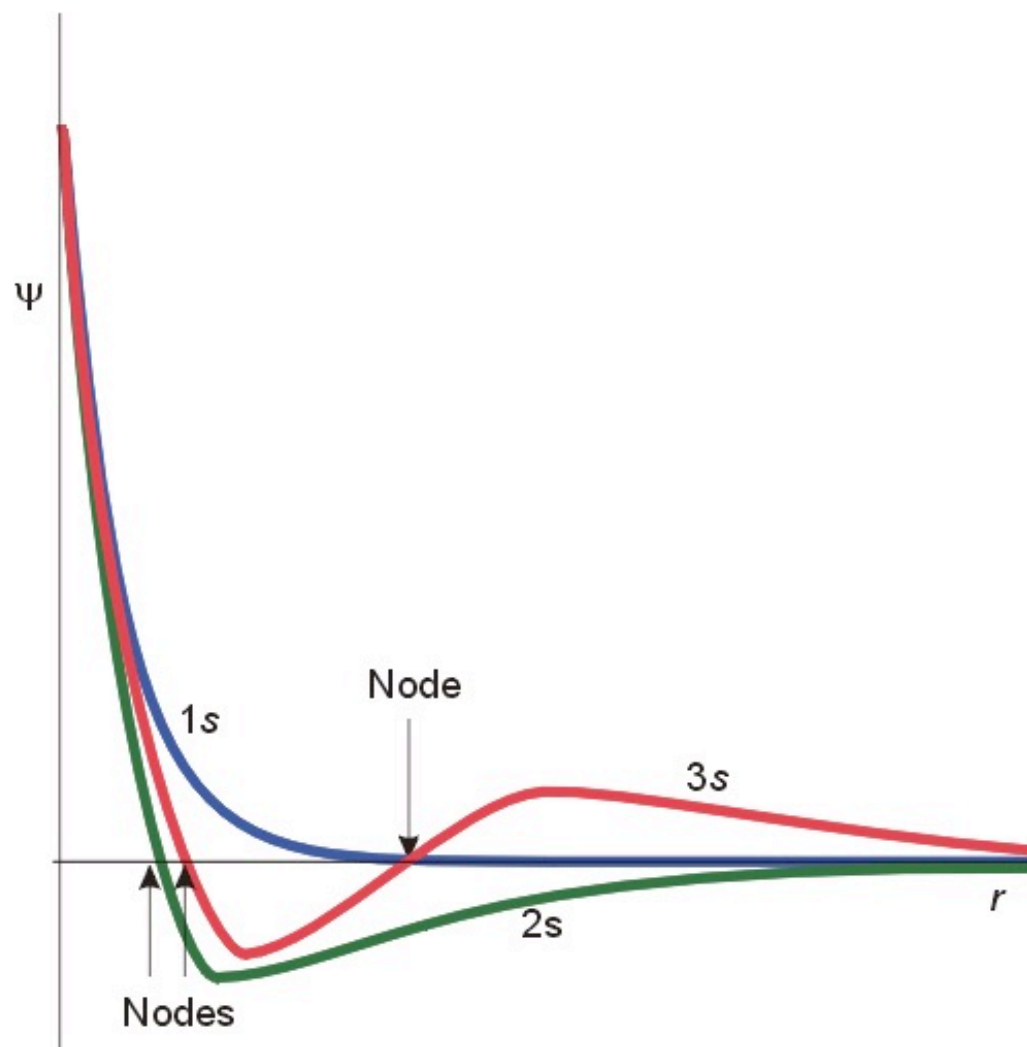
などがある。HF (短波) 帯の領域である。

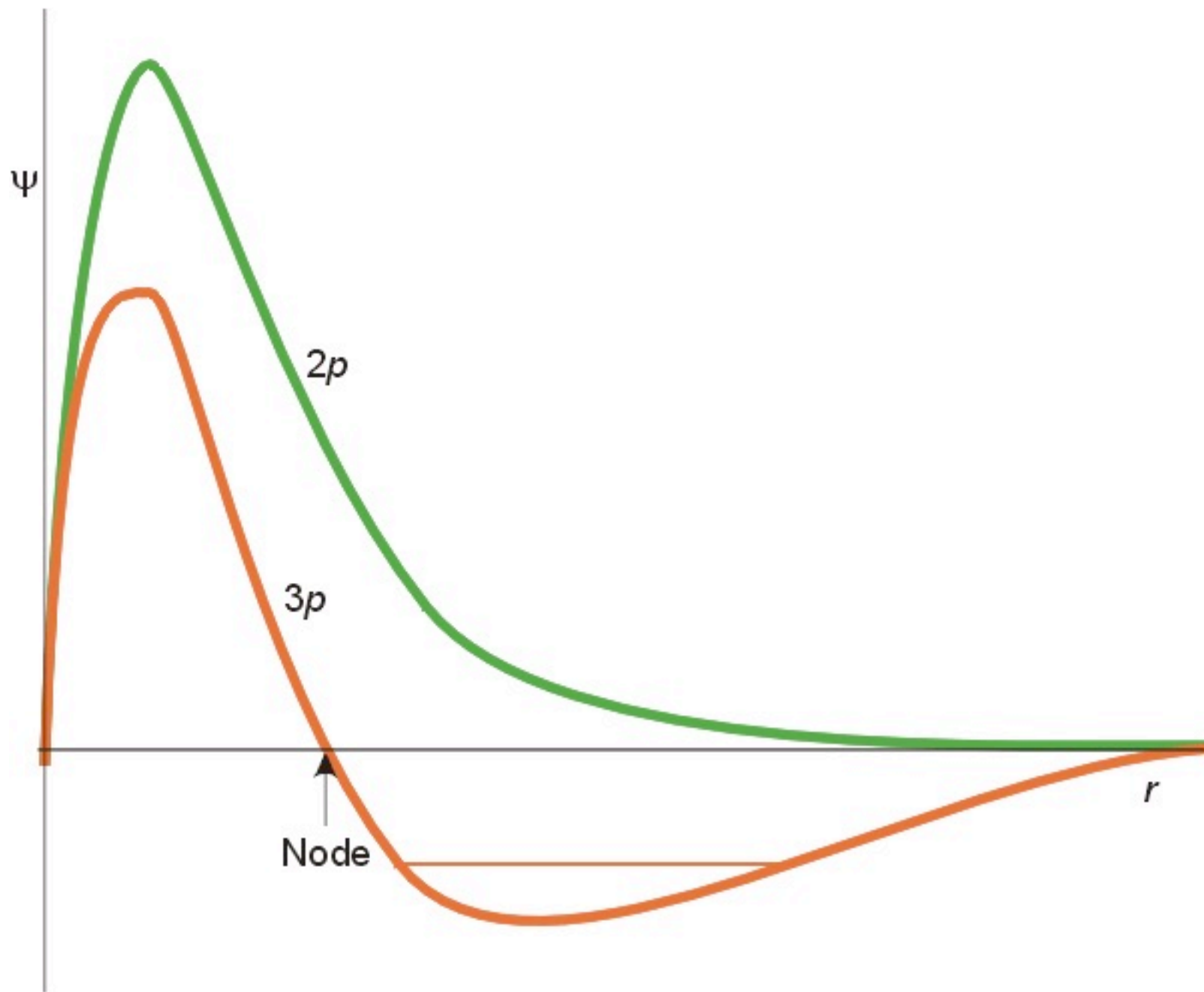
マイクロ波の周波数による分類(IEEE)

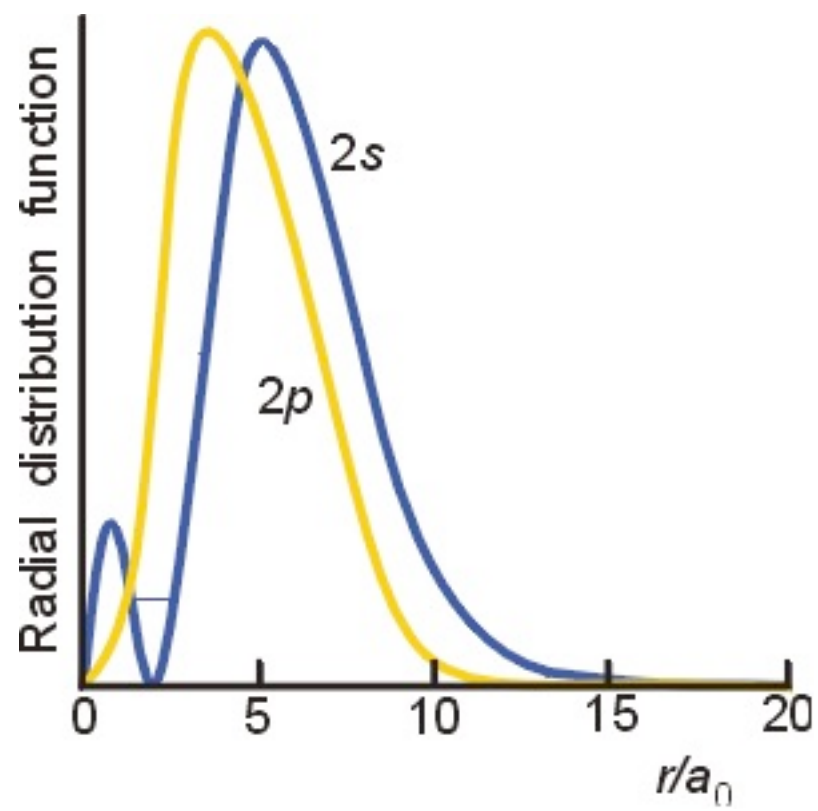
マイクロ波(microwave)の名前由来: μm 波という意味ではない

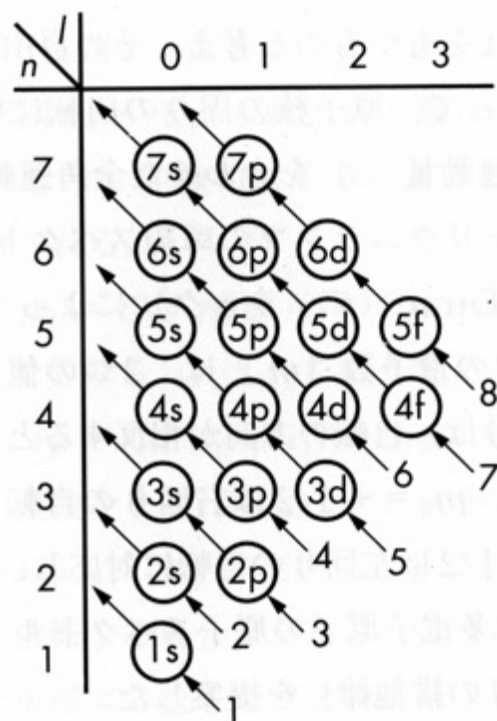
「マイクロ」は、電波の周波数の分類において、短い波長域であることを意味する。

名称	帯域 (GHz)	用途
Iバンド/HF	– 0.2	
Gバンド/VHF	0.2 – 0.25	軍用航空無線
Pバンド/UHF	0.25 – 0.5	移動体通信・アナログコードレス電話・特定小電力無線
Lバンド	0.5 – 2	テレビ放送・携帯電話・インマルサット衛星電話
Sバンド	2 – 4	固定無線・移動体向けデジタル衛星放送・ISMバンド(電子レンジ・無線LAN・衛星電話) 電子レンジ: 2.4GHz帯
Cバンド	4 – 8	通信衛星・固定無線・無線アクセス・気象用レーダー
Xバンド	8 – 12	ねずみ取用レーダー・軍事通信・気象衛星・地球観測衛星・捜索用レーダー・気象用レーダー
Kuバンド	12 – 18	衛星テレビ放送・通信衛星
Kバンド	18 – 26	通信衛星
Kaバンド	26 – 40	通信衛星
Vバンド	40 – 75	車載レーダー・通信衛星
Wバンド	75 – 110	電波天文学
mmバンド	110 – 300	

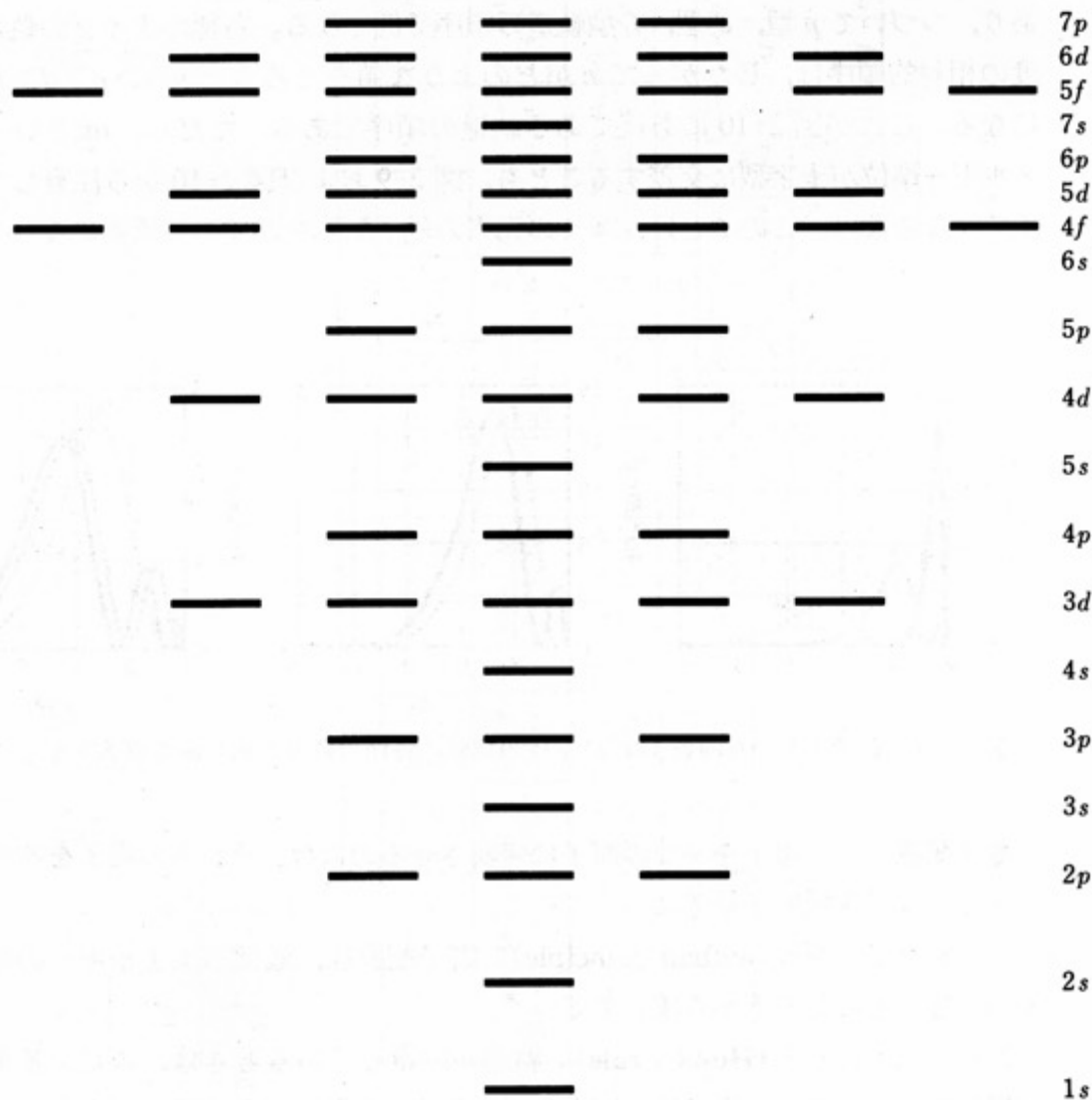




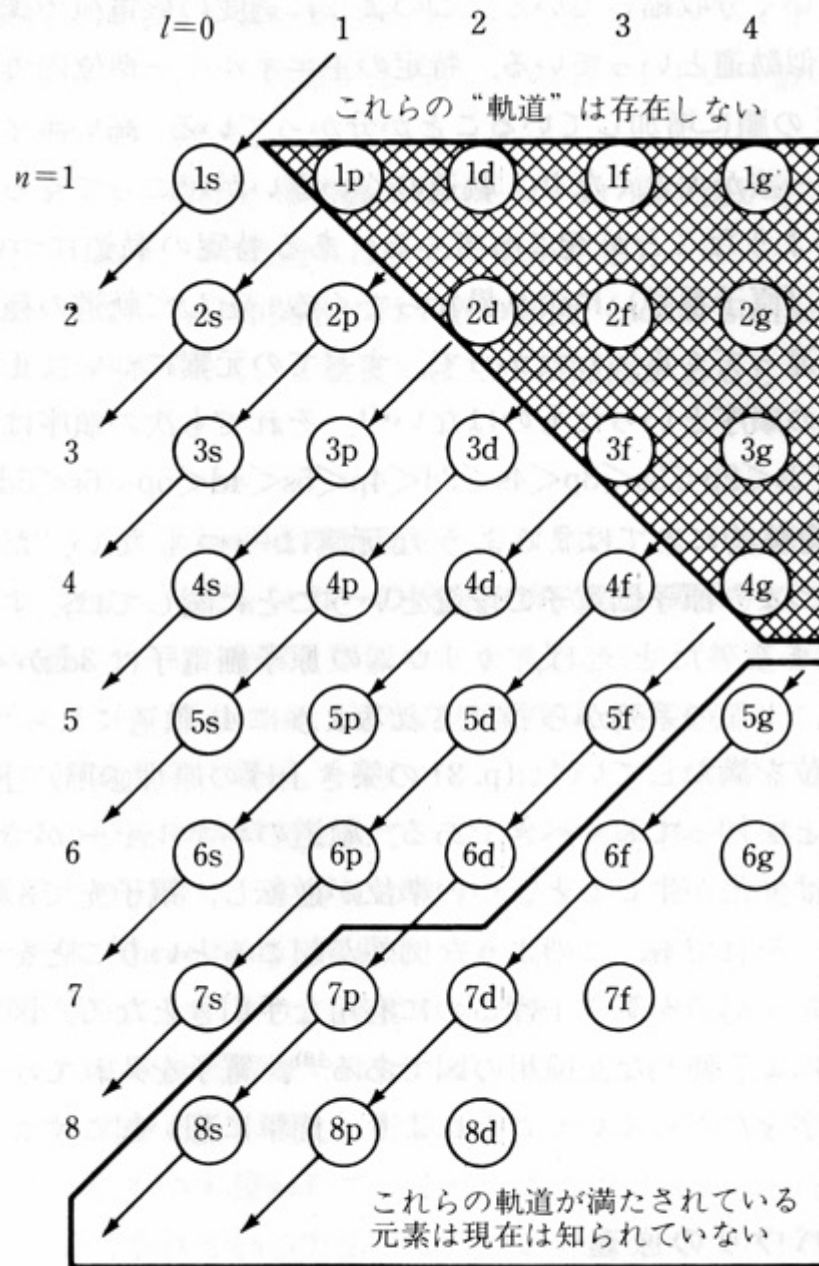




多電子原子における電子収容の順序.



多電子原子の電子配置を組立てるときに用いられる原子軌道の順序。軌道は、組立ての原理、フントの規則、パウリの排他律にしたがって下から用いられる



記憶用軌道順序図 (近似的) [T. Moeller,
“Inorganic Chemistry,” Wiley, New York (1952).
許可を得て転載]

主量子数

副殻が満たされていく

 n ns $(n-1)d$ np n

1

ns		$(n-1)d$										np					
1												非金属					
1	2																VIII A
H	He																2 He
軽金属		遷移金属										III A	IV A	V A	VIA	VII A	
I A	II A																
3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
11	12											13	14	15	16	17	18
Na	Mg	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B			I B	II B	Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106												
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha													

2

3

4

5

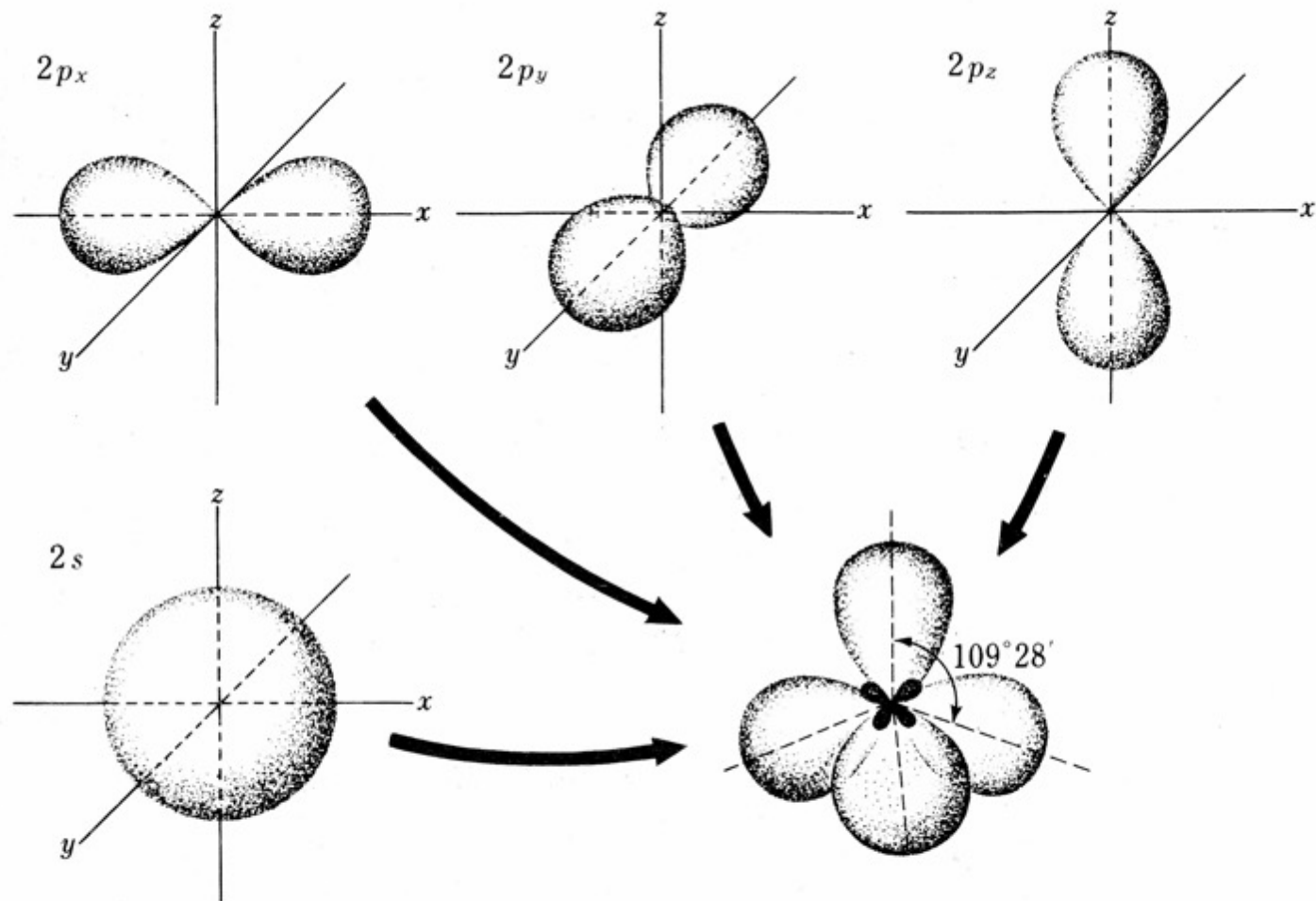
6

7

後遷移金属

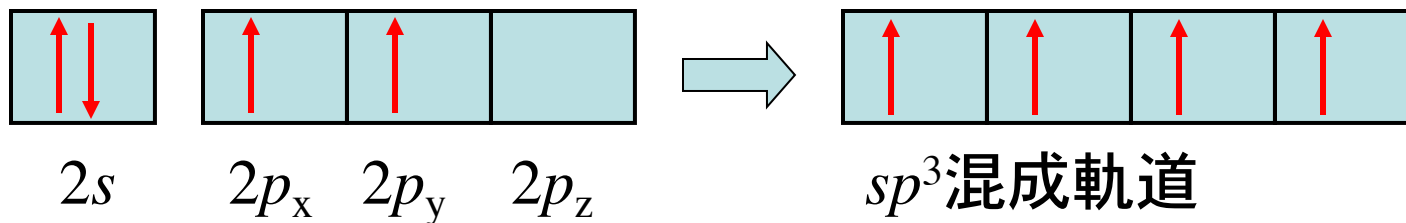
 $(n-2)f$

ランタニド 系列	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
アクチニド 系列	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



4 炭素の $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ オービタルのまじりあいによる新しいオービタルの形成

Hybridization



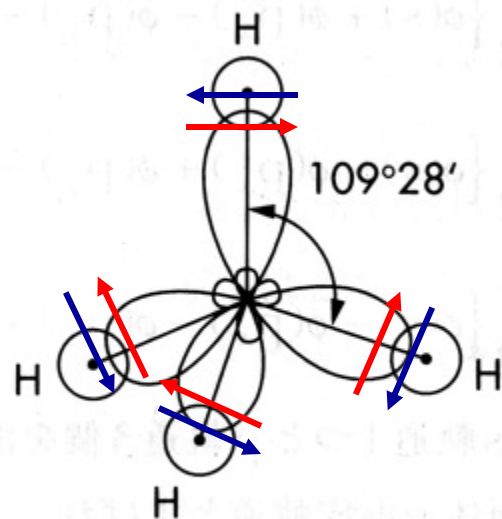
σ 電子

$$\psi_1 = \frac{1}{2} (2s + 2p_x + 2p_y + 2p_z)$$

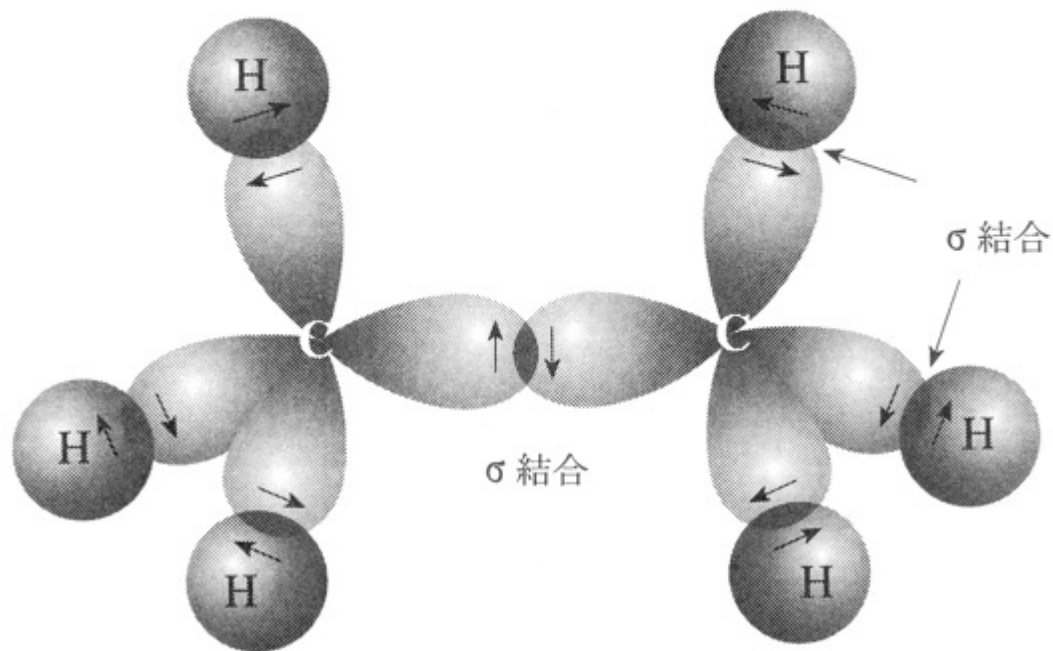
$$\psi_2 = \frac{1}{2} (2s - 2p_x - 2p_y + 2p_z)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2} (2s + 2p_x - 2p_y - 2p_z)$$

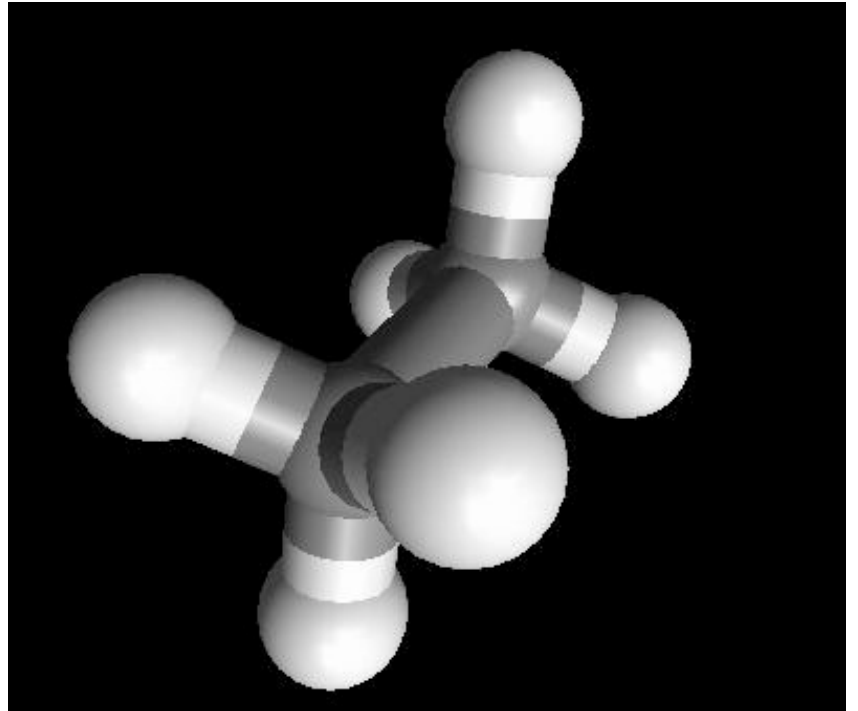
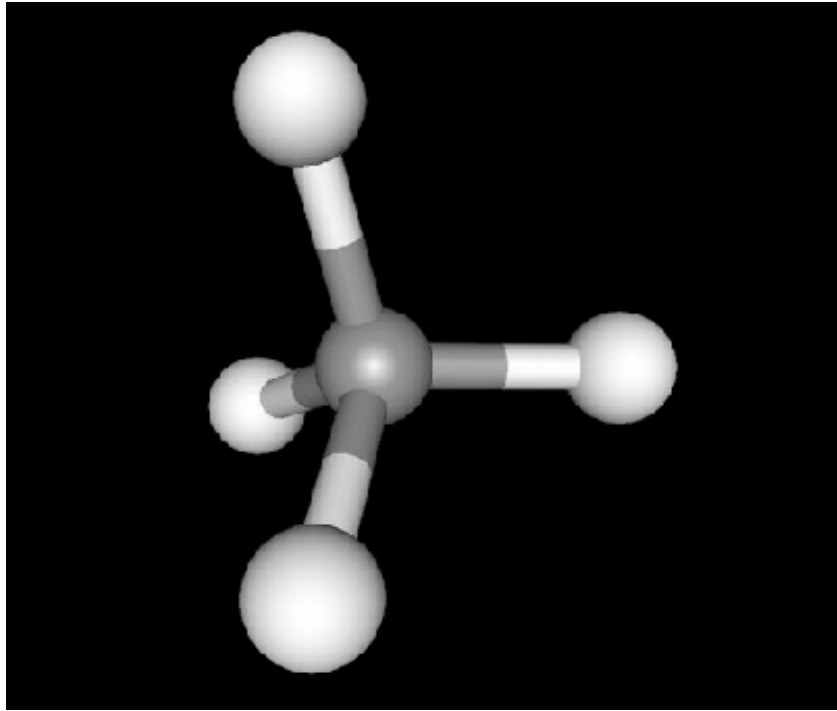
$$\psi_4 = \frac{1}{2} (2s - 2p_x + 2p_y - 2p_z)$$

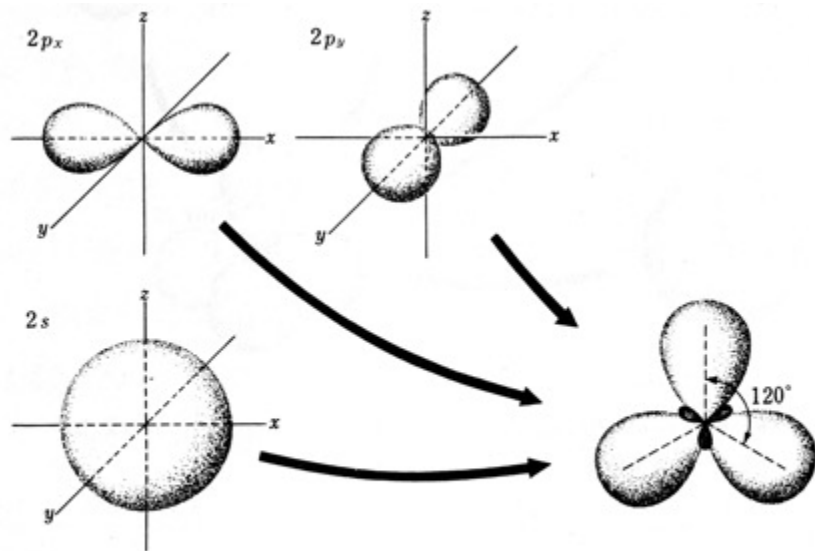


メタン分子における σ 結合.

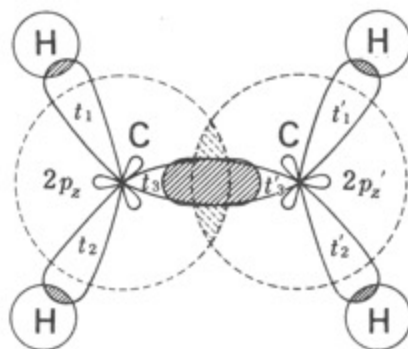


エタン CH_3CH_3 の結合の模式図. エタンの 7 個の結合オービタルのうちの 6 個は炭素原子の sp^3 オービタルと水素の 1s オービタルの重なりによってできる. 7 番目の結合オービタルはそれぞれの炭素の sp^3 オービタルの重なりによる. エタンには 14 個の価電子がある. 7 個の結合オービタルはそれぞれ逆のスピンのもつ価電子対で占められる. 電子を矢印で示した.

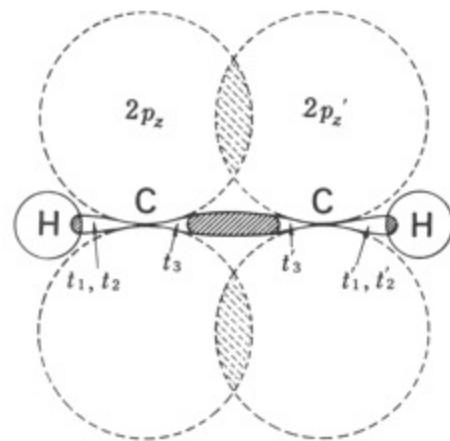




$2s, 2p_x, 2p_y$ オービタルのまじりあい形成されるオービタル

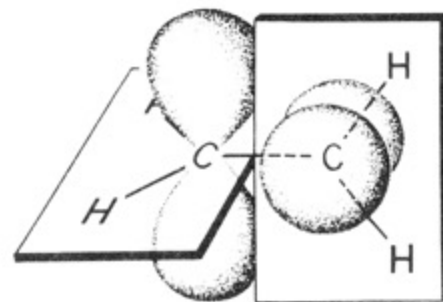
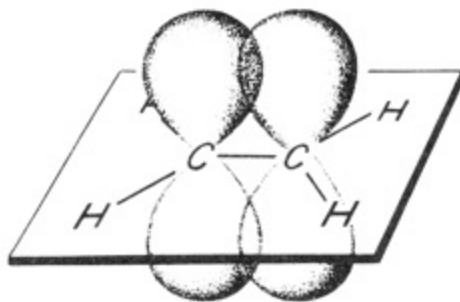


分子面の上からみたとき



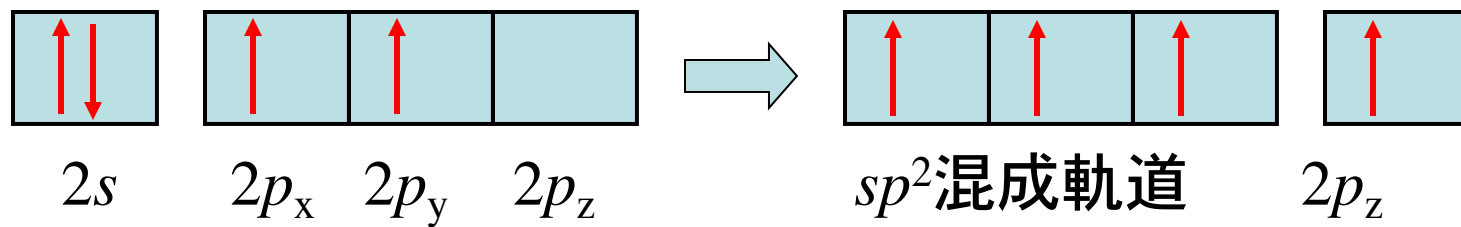
分子面の横からみたとき

エチレン分子の価電子のオービタル

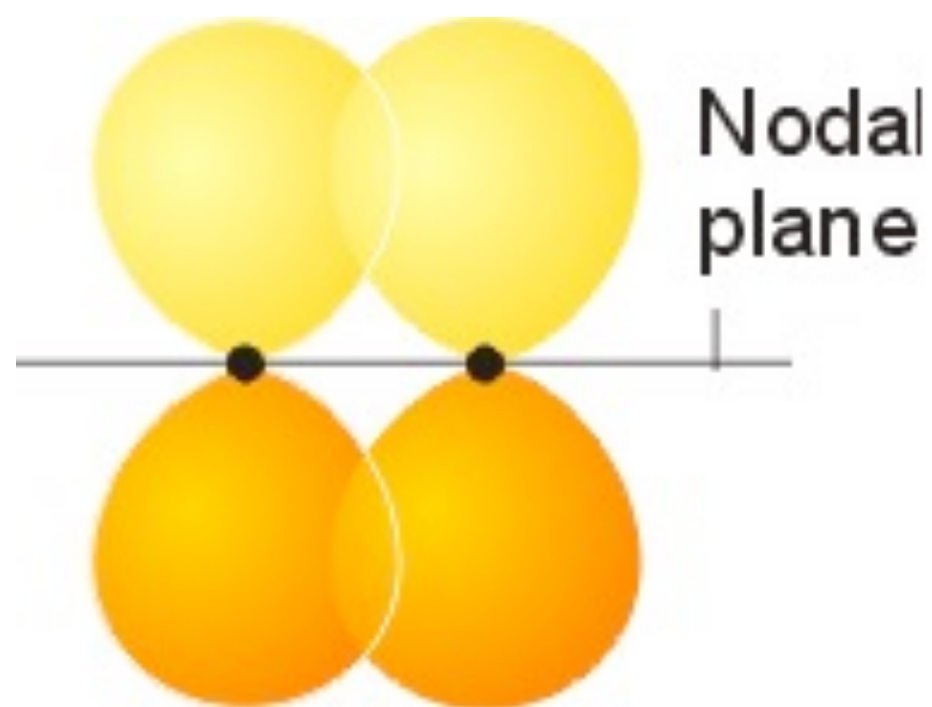


エチレンの π 電子のオービタルのかさなりのねじれの角度による変化

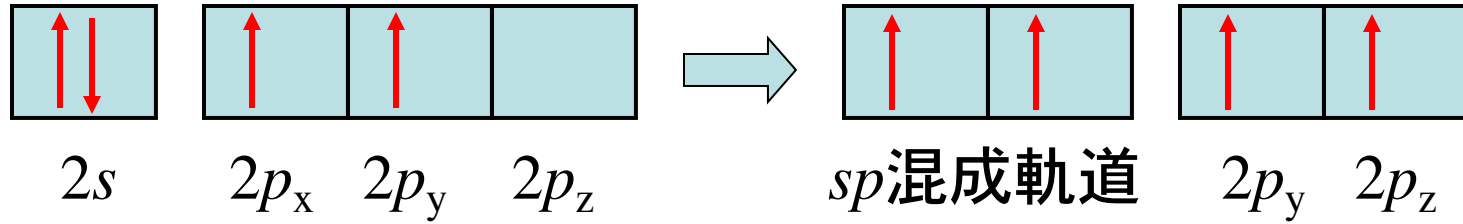
sp^2 -Hybridization



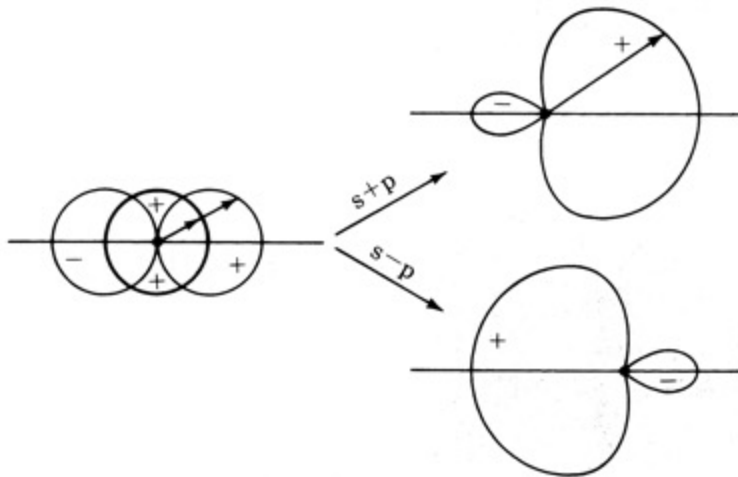
σ 電子 π 電子



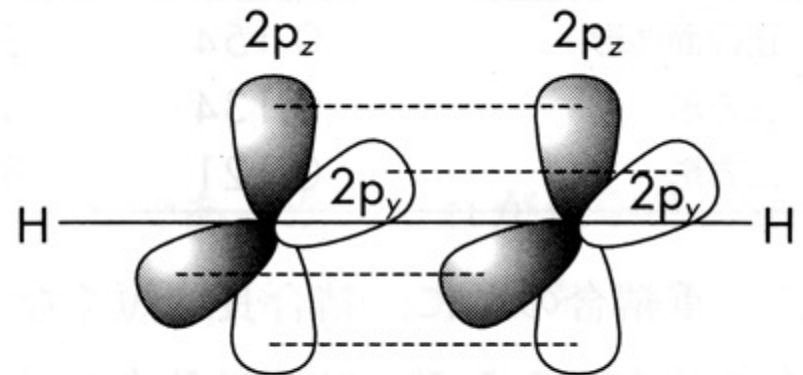
sp -Hybridization



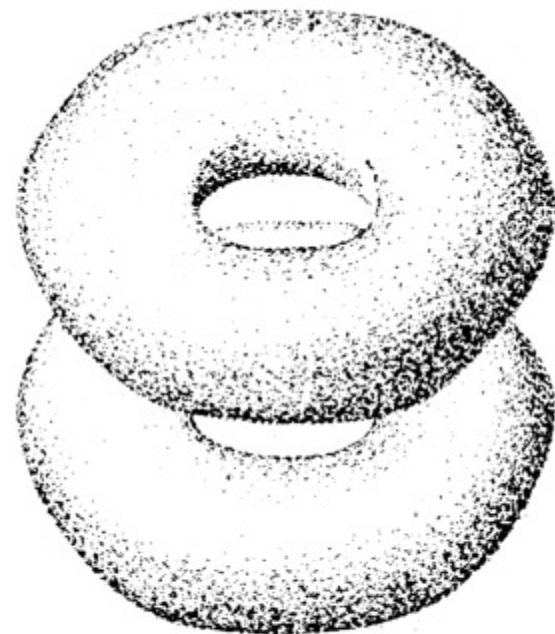
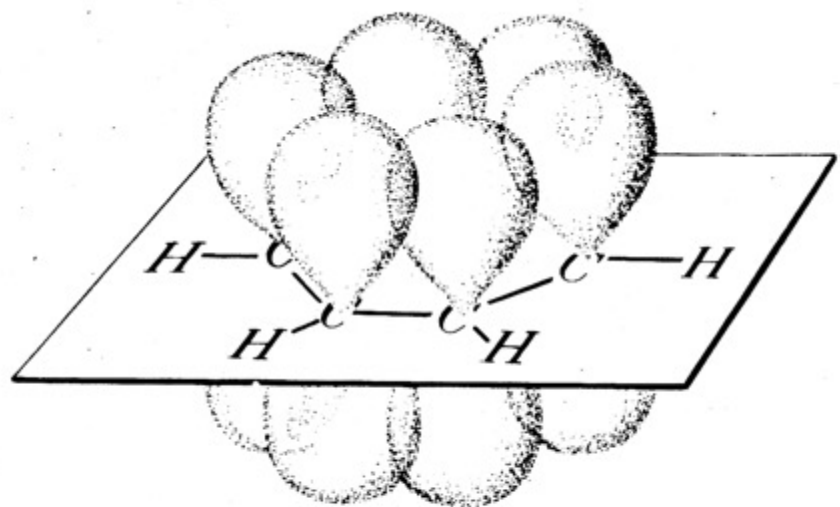
σ 電子 π 電子



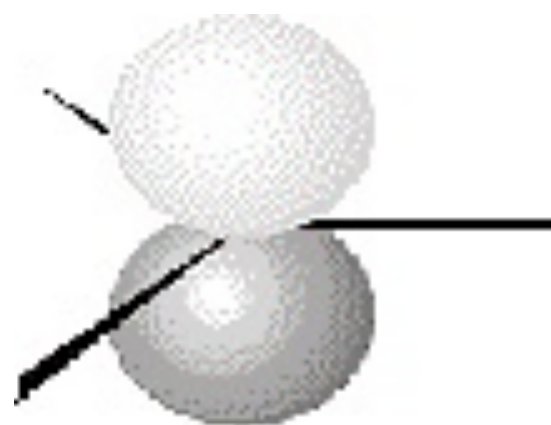
sp 混成軌道のでき方——角波動関数の和と差



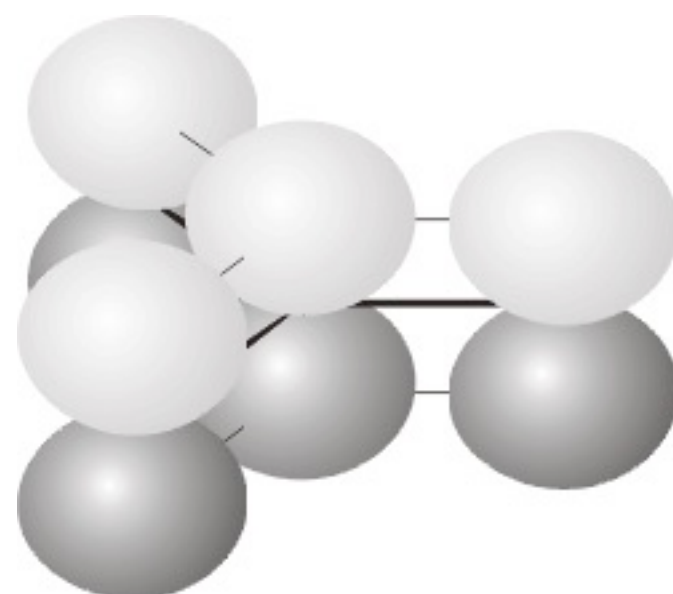
アセチレン分子における2つの π 結合.



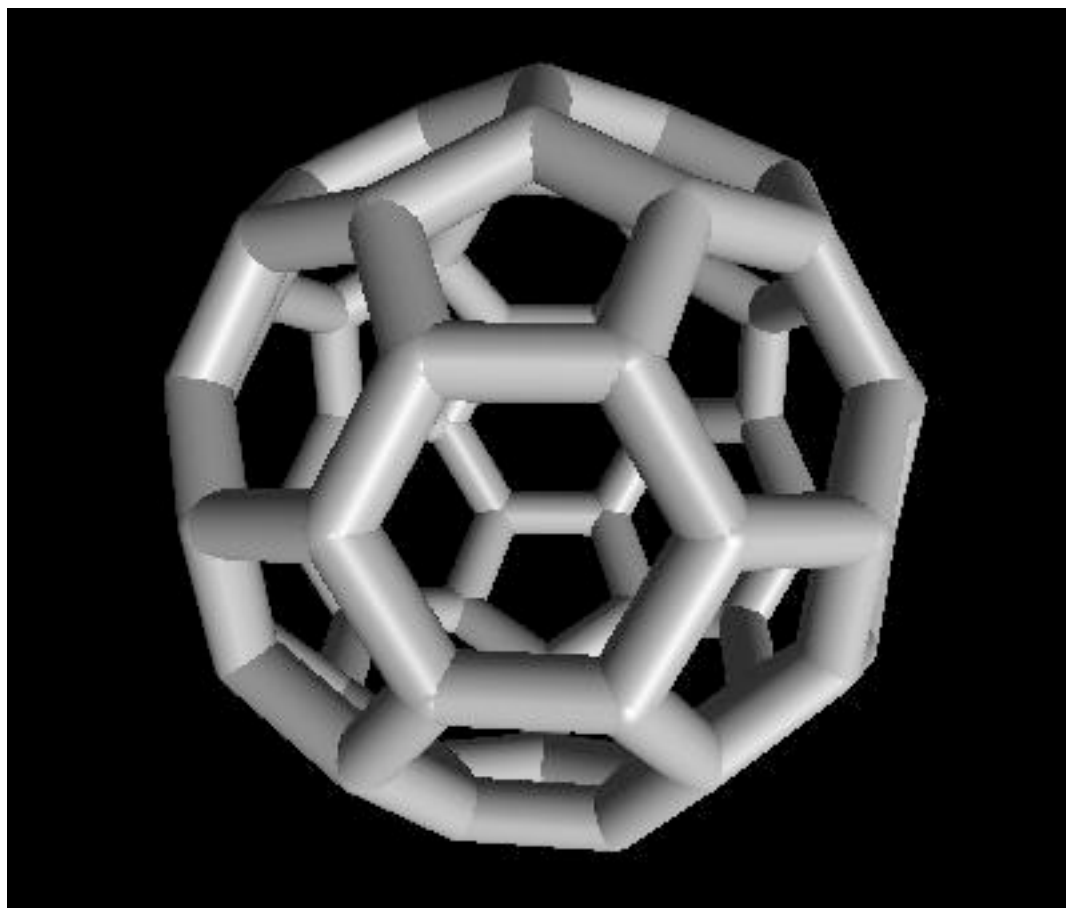
ベンゼンの $2p_z$ 電子のオービタルのひろがり



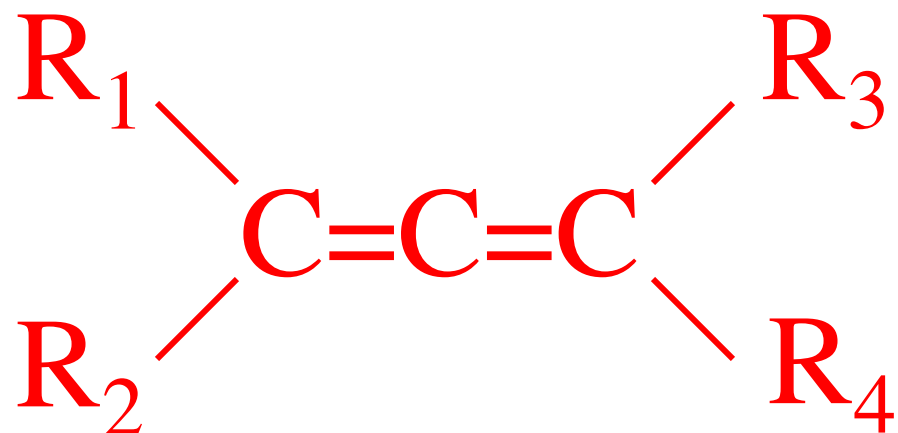
21 AlX_3 and BX_3



22

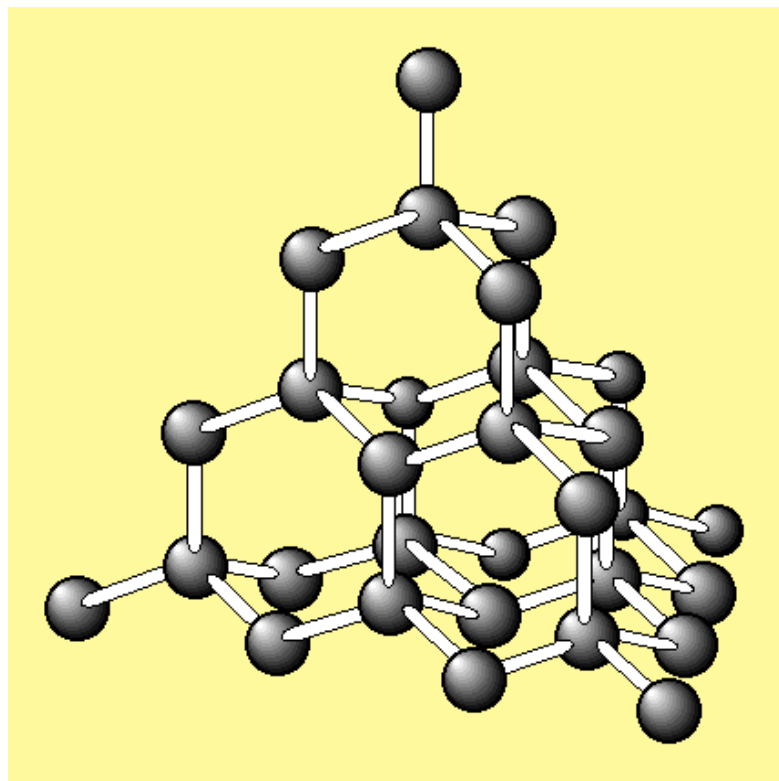


アレン(allene): $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$

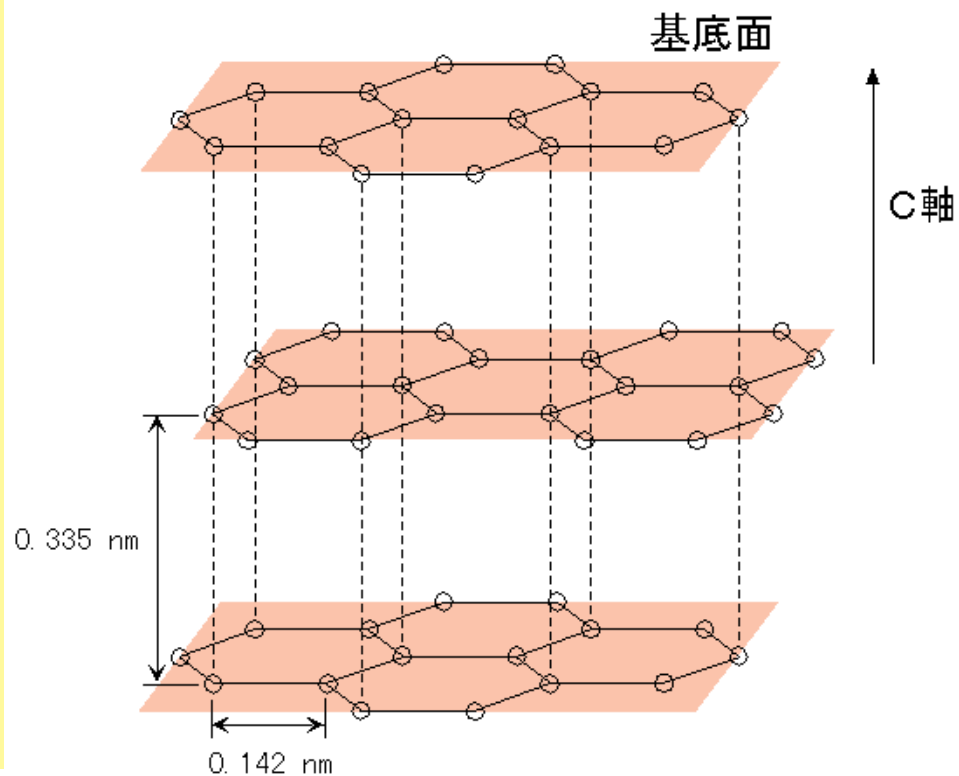


不斉炭素原子は無いが、光学異性体があるのはなぜか？

炭素



ダイヤモンド



グラファイト

MgB₂

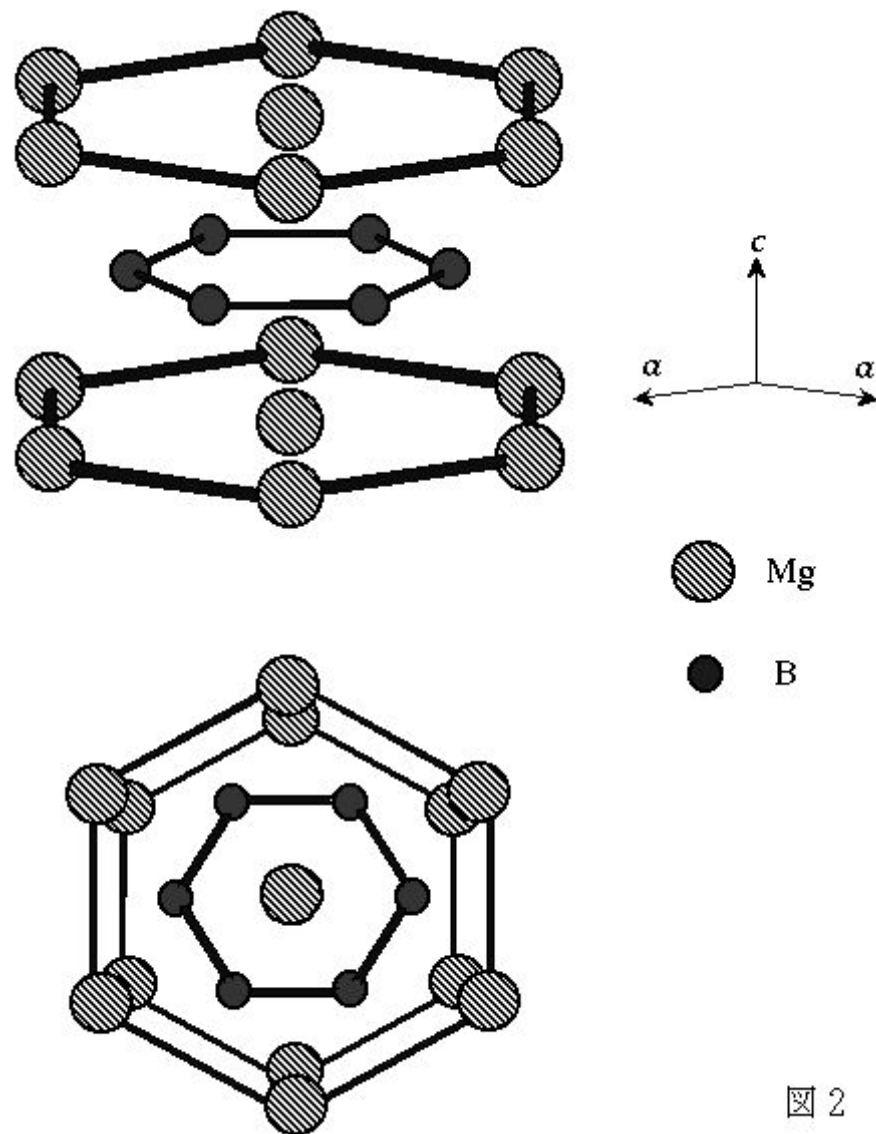
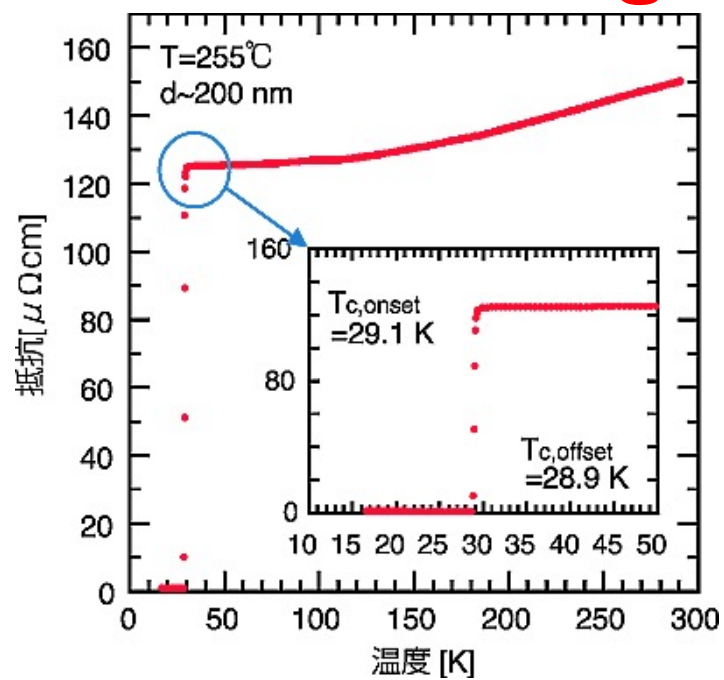
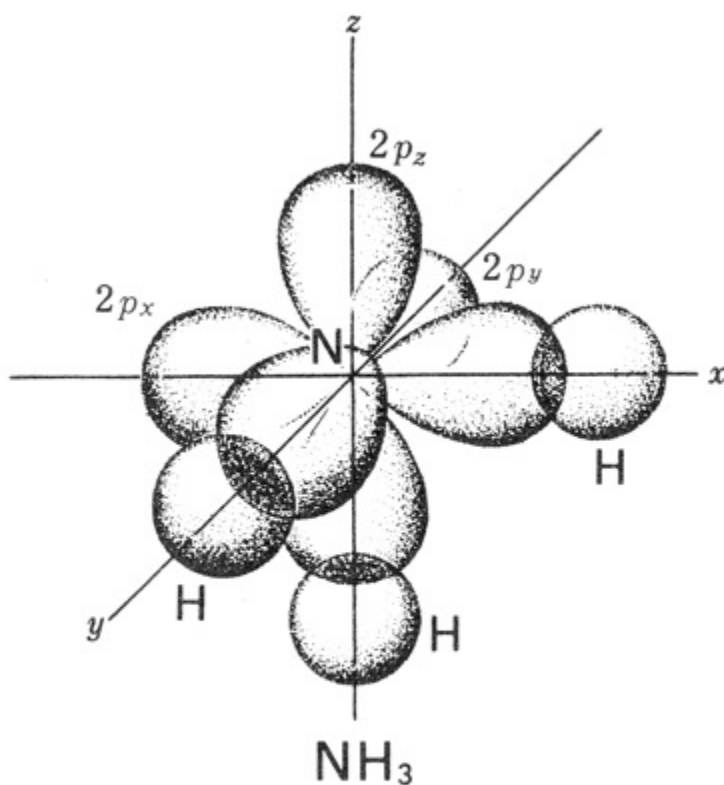
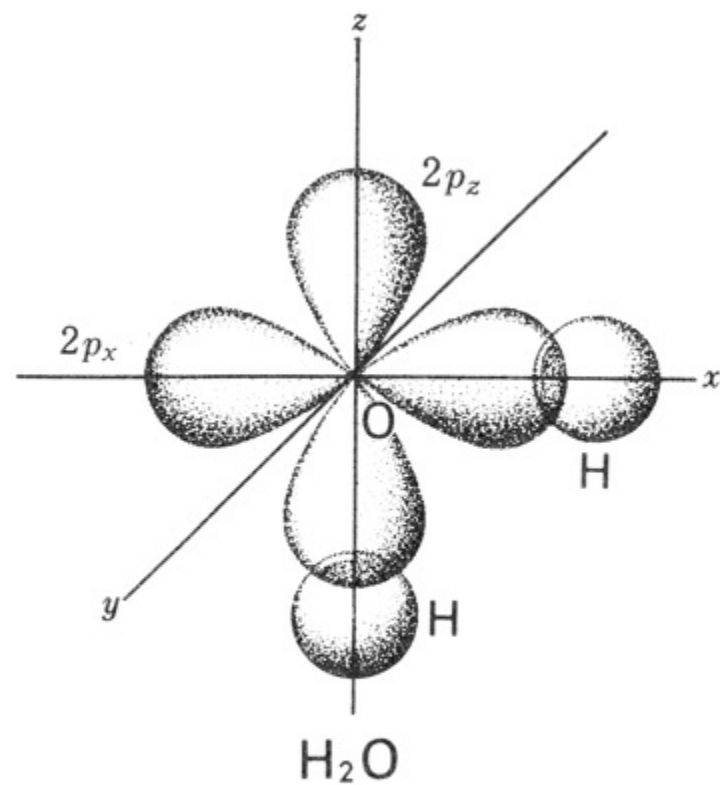
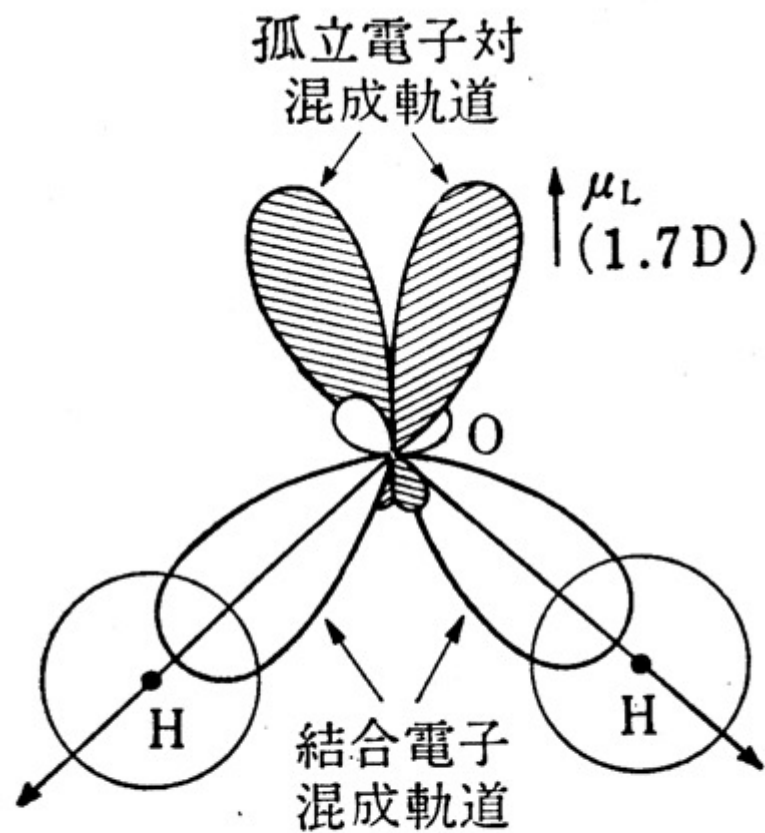


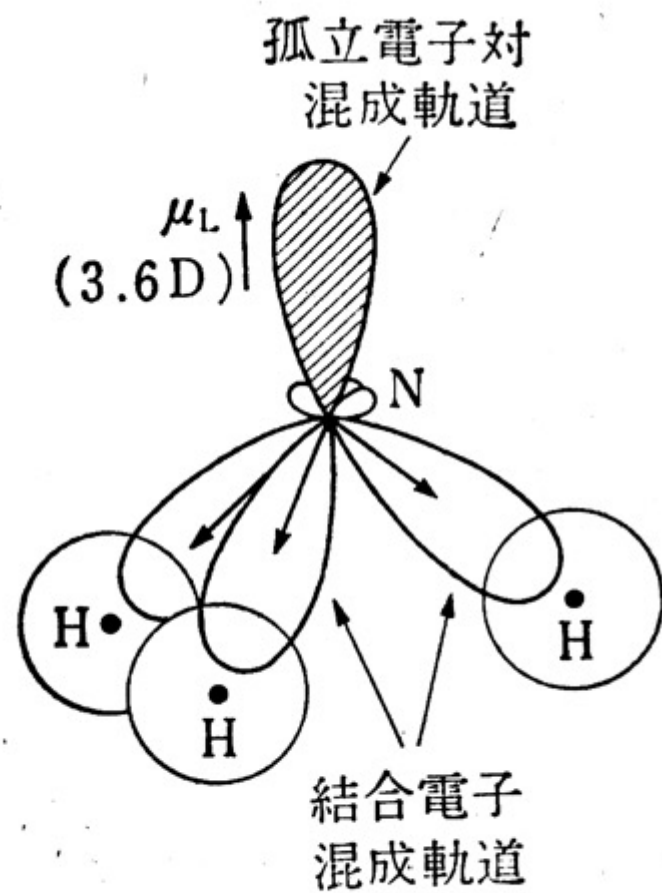
图 2



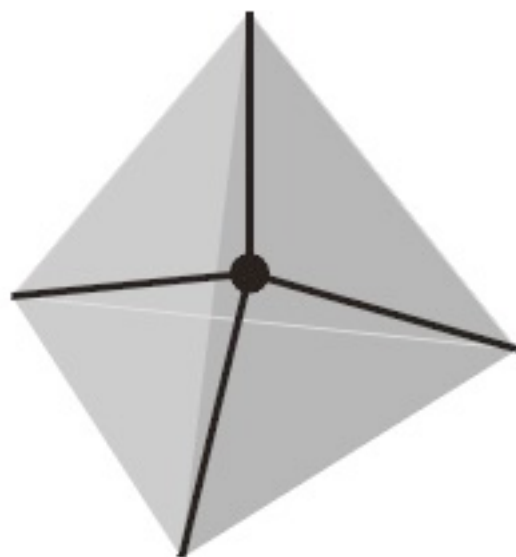
酸素および窒素原子の不对電子のオービタル



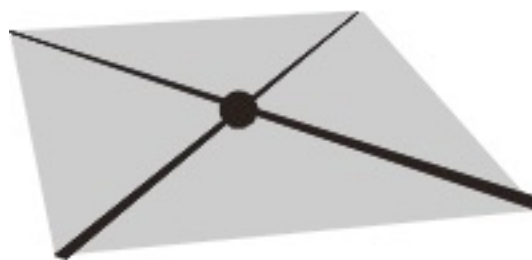
(a) H_2O



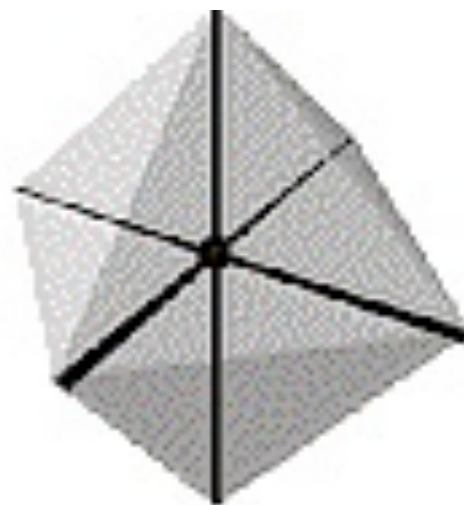
(b) NH_3



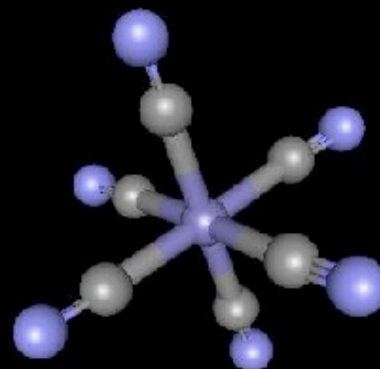
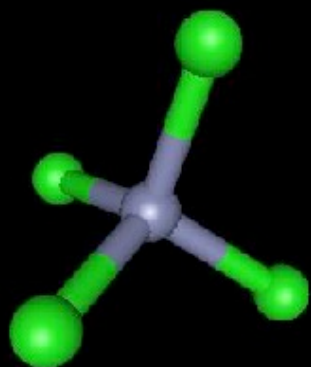
4 Tetrahedral complex, T_c

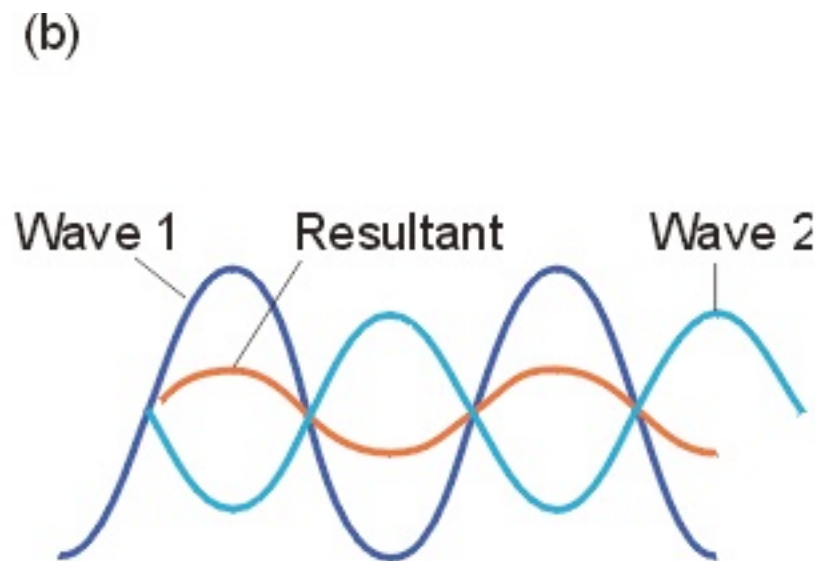
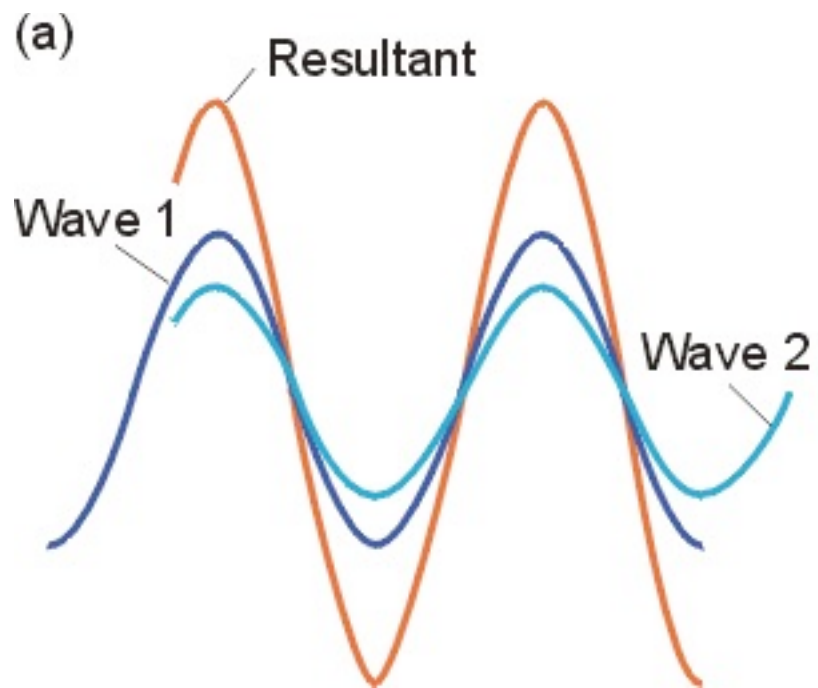


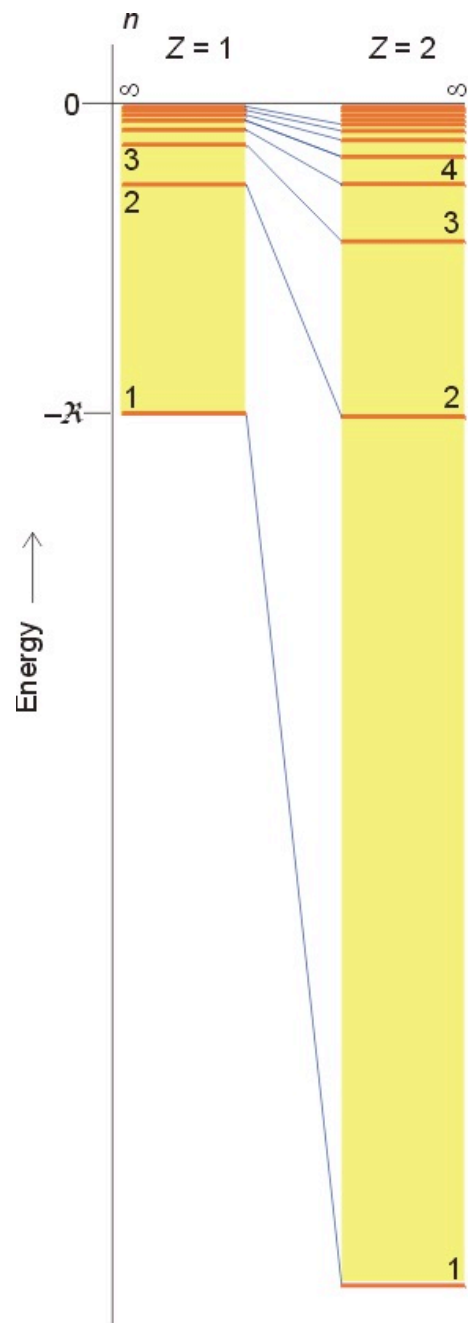
6 Square-planar complex, D_{4h}



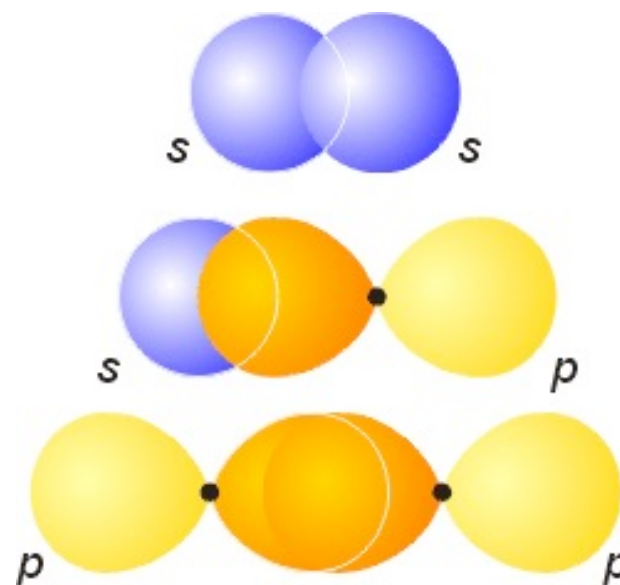
10 Octahedral complex, O_h



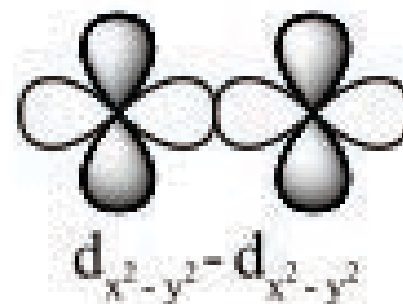
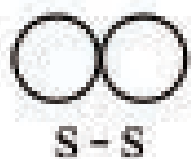




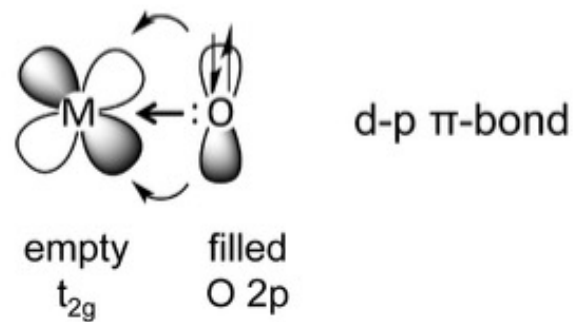
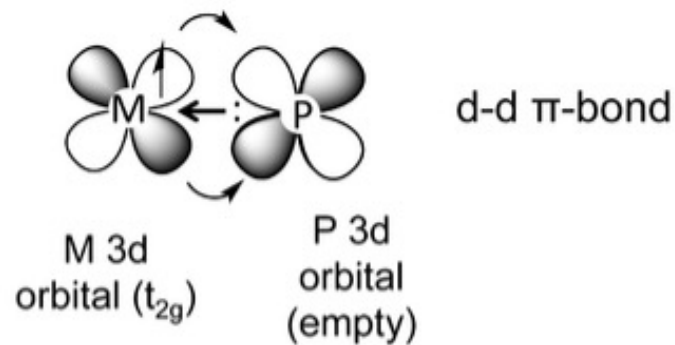
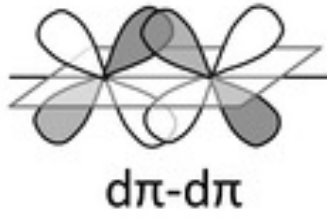
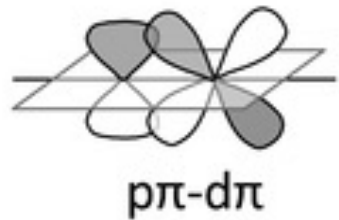
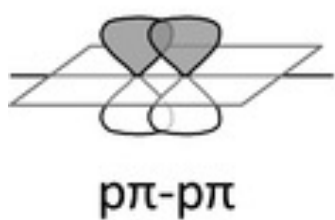
σ結合



σ bonds

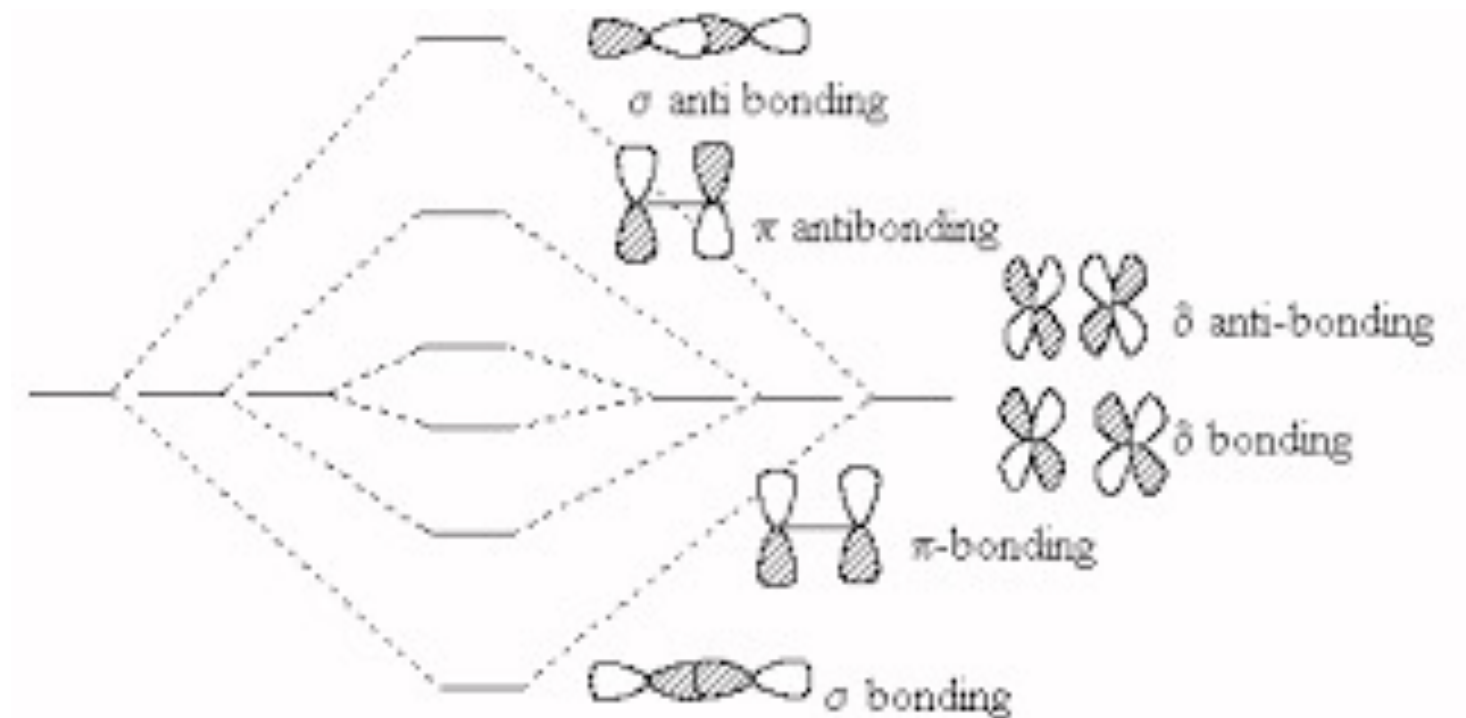
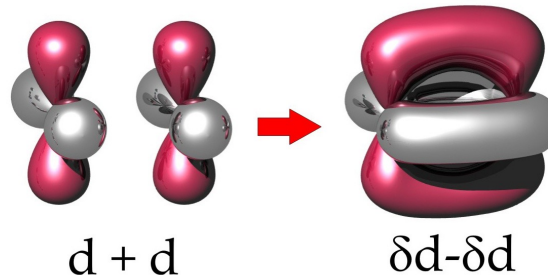


π 結合



δ 結合

Delta Bond Type



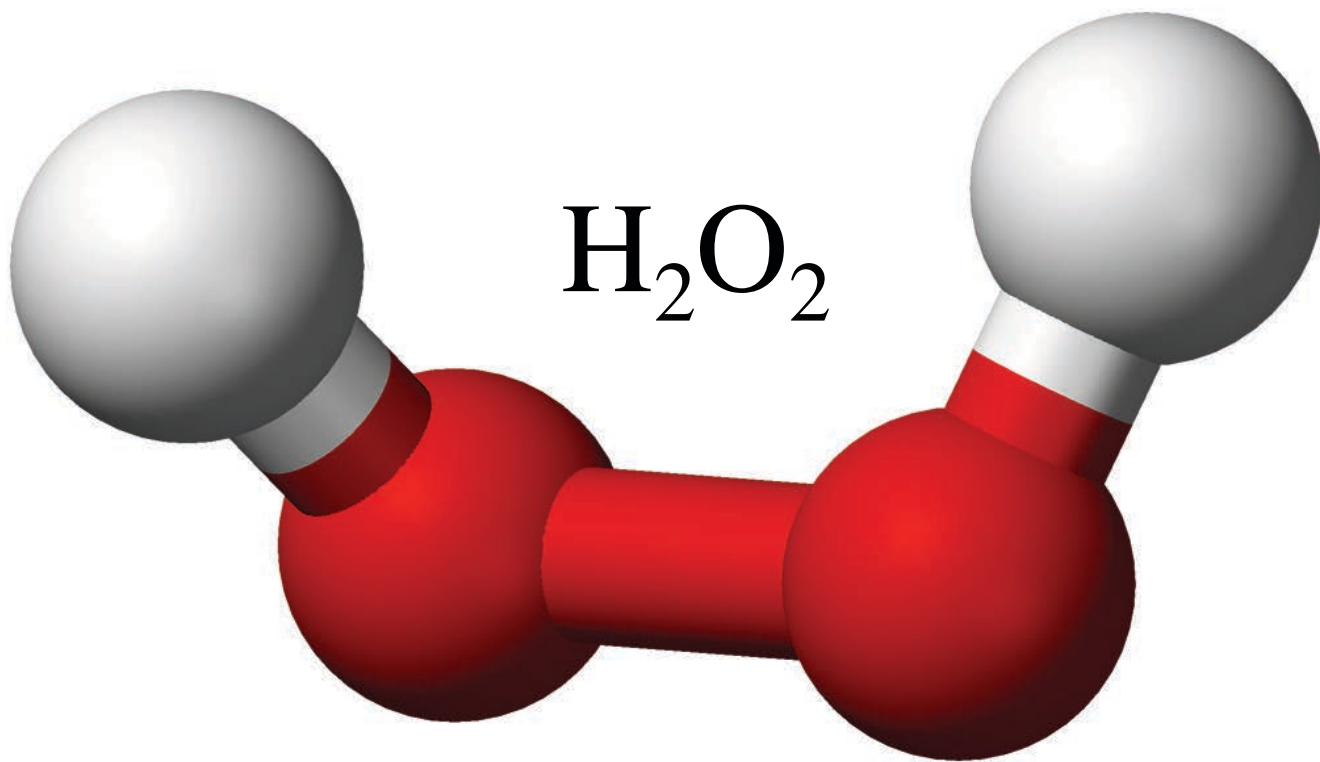
炭素(C)とケイ素(Si)の違い

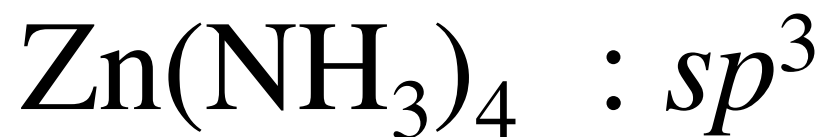
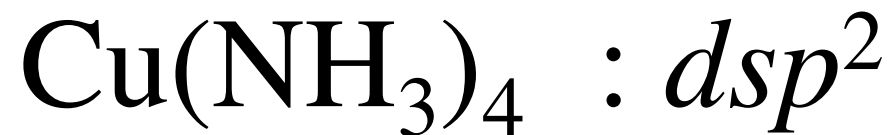
C: 多重結合性(二重、三重結合)

Si: 単結合(多重結合は希)

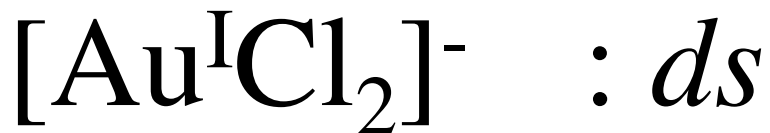
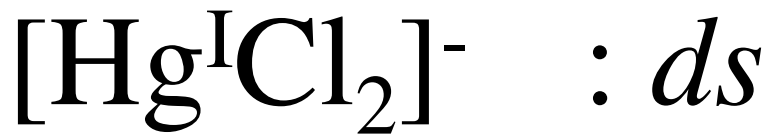
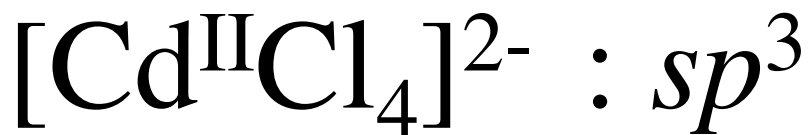
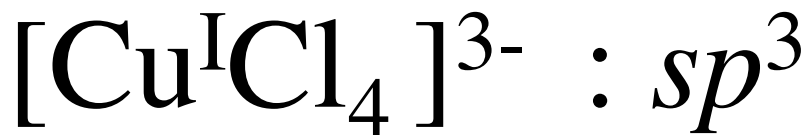
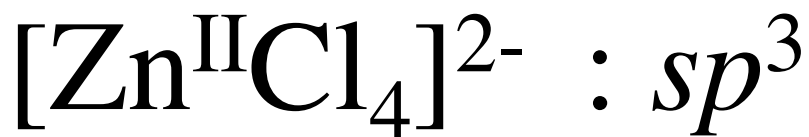
C: $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$

Si: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$





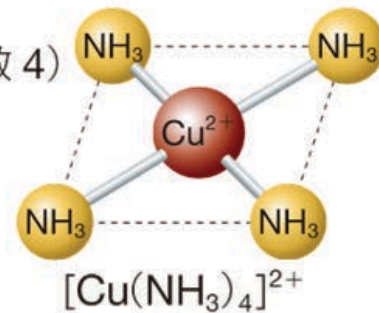
d^{10} : 化合物



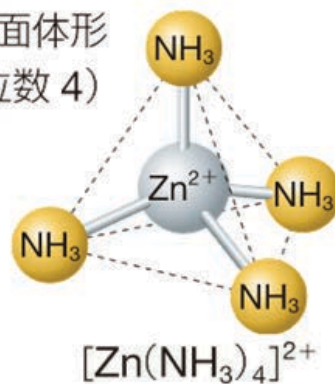
直線形
(配位数 2)



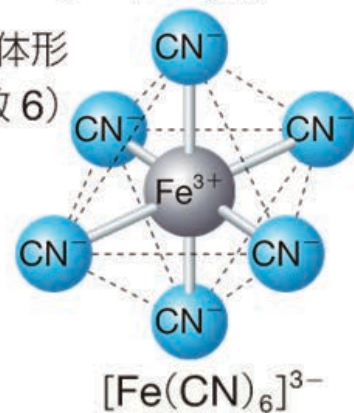
正方形
(配位数 4)



正四面体形
(配位数 4)



正八面体形
(配位数 6)



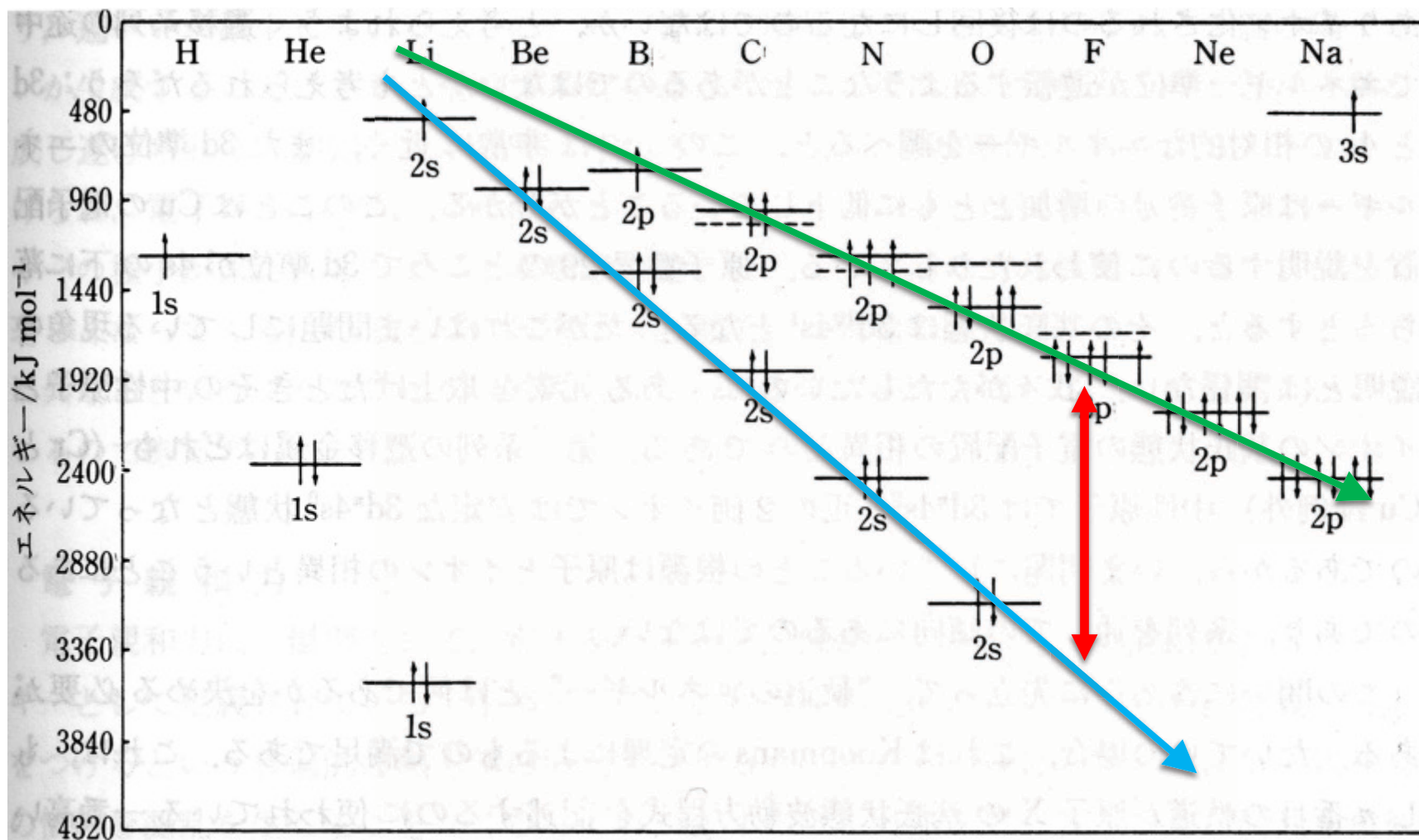
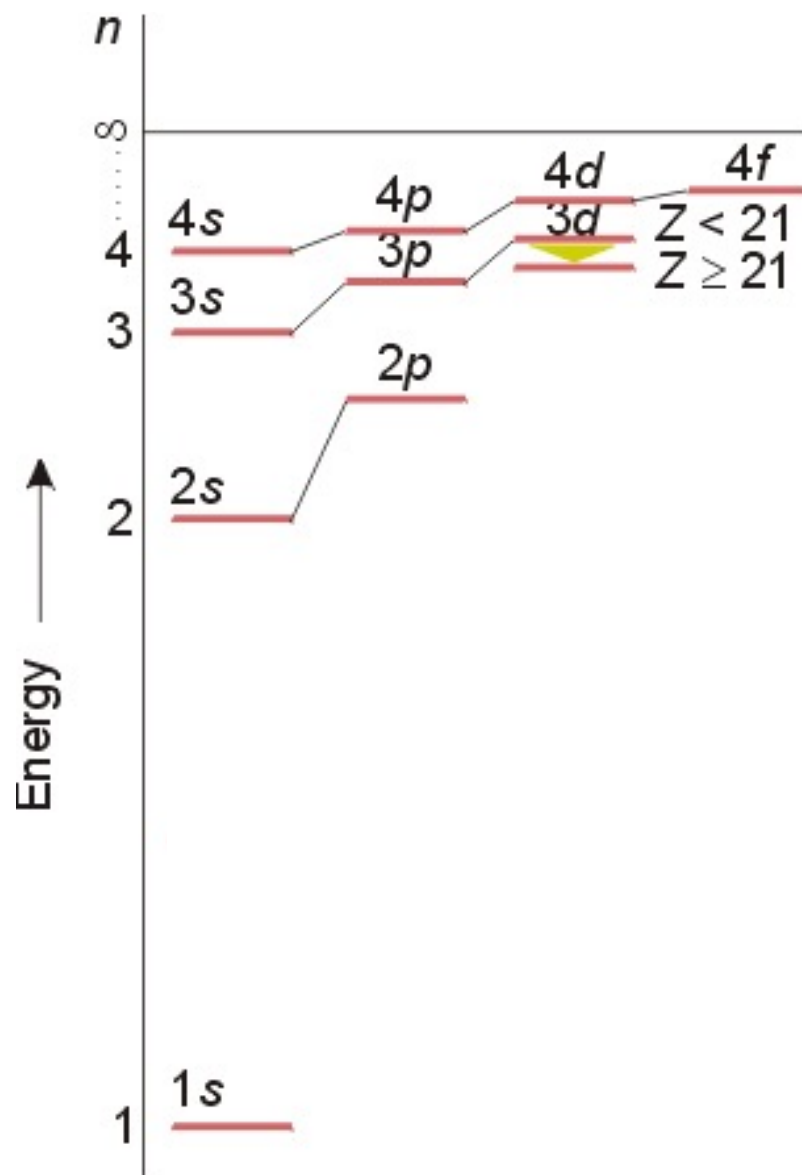
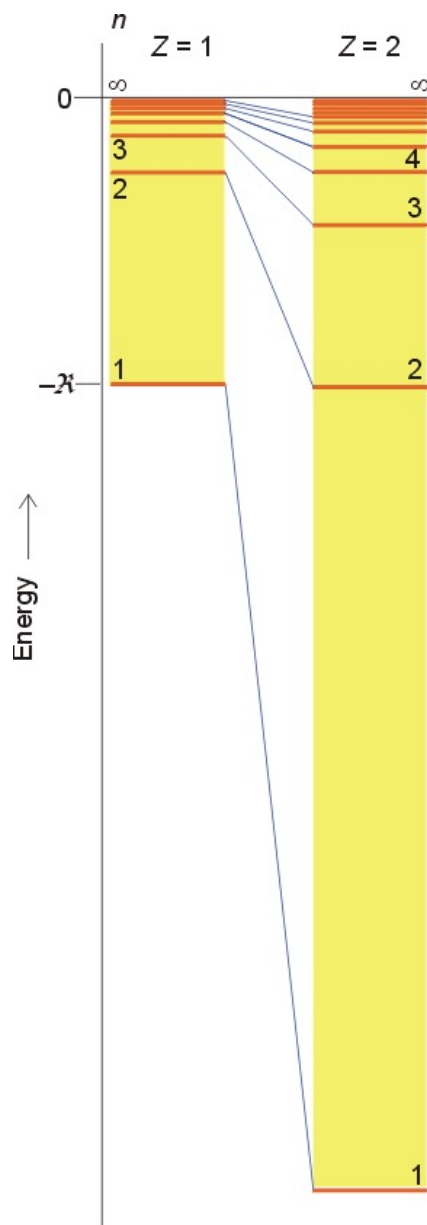


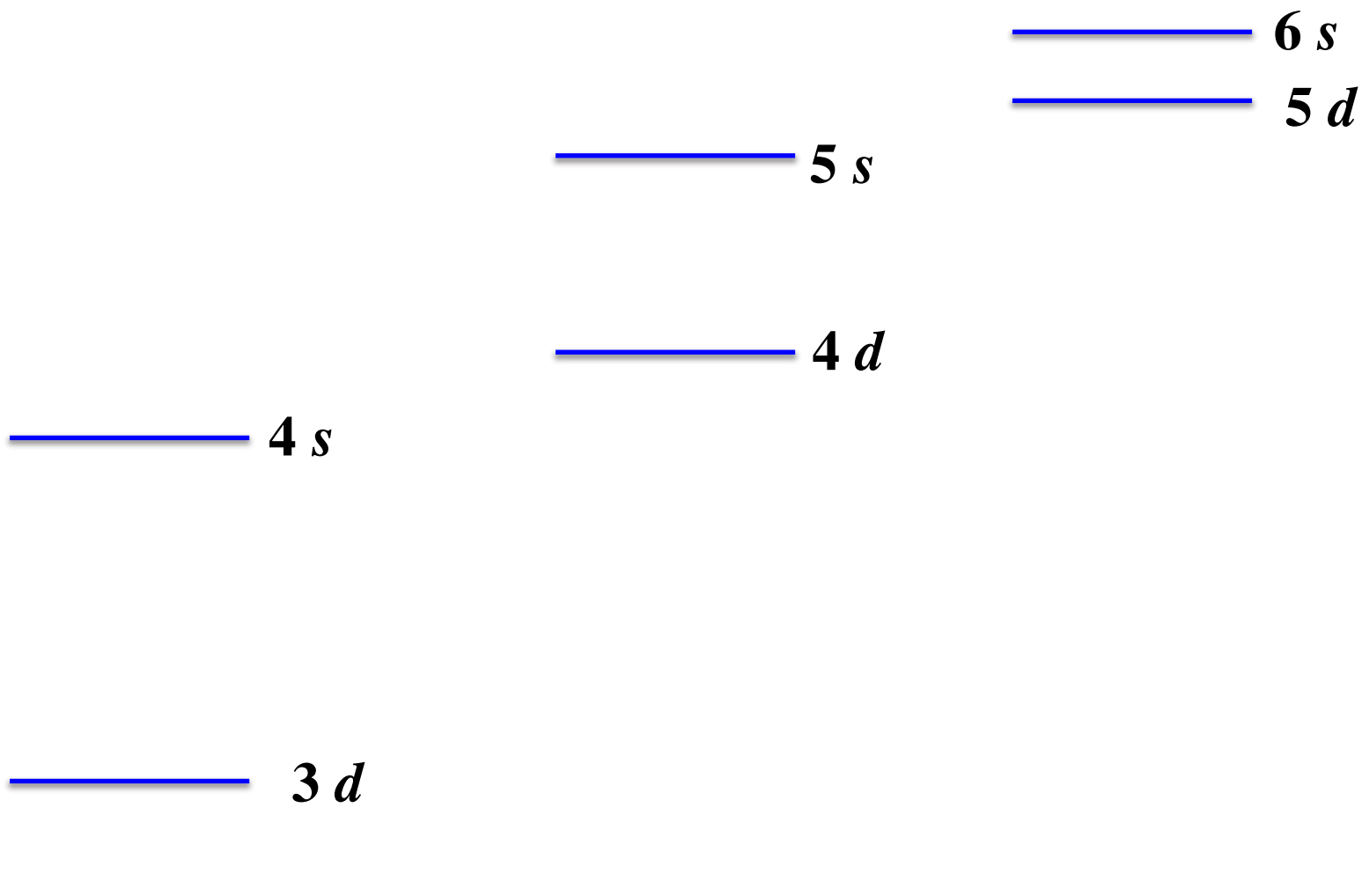
図 2・14 水素からナトリウムまでの軌道エネルギーの相対値。実線は一電子軌道エネルギーを示す。点線は実測されたイオン化エネルギーを示す。後者は電子-電子の相互作用のため実線で示されたものと異なっている

Fは、s-p間のエネルギー差が大きく、s-p混成できない

*ds*混成



E ds 混成



IUPAC Periodic Table of the Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen 1.007 94(7)																	2 He helium 4.002 602(2)
3 Li lithium 6.941(2)	4 Be beryllium 9.012 182(3)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.0067(2)	8 O oxygen 15.9994(3)	9 F fluorine 18.998 4032(5)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.989 770(2)	12 Mg magnesium 24.3050(6)											13 Al aluminium 26.981 538(2)	14 Si silicon 28.0855(3)	15 P phosphorus 30.973 761(2)	16 S sulfur 32.065(5)	17 Cl chlorine 35.453(2)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955 910(8)	22 Ti titanium 47.867(1)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938 049(9)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 200(9)	28 Ni nickel 58.6934(2)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.409(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.64(1)	33 As arsenic 74.921 60(2)	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(1)	39 Y yttrium 88.905 85(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 38(2)	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium [97.9072]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.905 50(2)	46 Pd palladium 106.42(1)	47 Ag silver 107.8682(2)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(3)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.760(1)	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.904 47(3)	54 Xe xenon 131.293(6)
55 Cs caesium 132.905 45(2)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.9479(1)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.217(3)	78 Pt platinum 195.078(2)	79 Au gold 196.966 55(2)	80 Hg mercury 200.59(2)	81 Tl thallium 204.3833(2)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.980 38(2)	84 Po polonium [209.9824]	85 At astatine [209.9871]	86 Rn radon [222.0176]
87 Fr francium [223.0197]	88 Ra radium [226.0254]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [261.1088]	105 Db dubnium [262.1141]	106 Sg seaborgium [266.1219]	107 Bh bohrium [264.12]	108 Hs hassium [277]	109 Mt meitnerium [268.1388]	110 Ds darmstadtium [269]	111 Uuu unununium [272]	112 Uub ununbium [285]		114 Uuq ununquadium [289]		116 Uuh ununhexium [289]		
			57 La lanthanum 138.9055(2)	58 Ce cerium 140.116(1)	59 Pr praseodymium 140.907 65(2)	60 Nd neodymium 144.24(3)	61 Pm promethium [144.9127]	62 Sm samarium 150.36(3)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925 34(2)	66 Dy dysprosium 162.500(1)	67 Ho holmium 164.930 32(2)	68 Er erbium 167.259(3)	69 Tm thulium 168.934 21(2)	70 Yb ytterbium 173.04(3)	71 Lu lutetium 174.967(1)
			89 Ac actinium [227.0277]	90 Th thorium 232.0381(1)	91 Pa protactinium 231.036 88(2)	92 U uranium 238.028 91(3)	93 Np neptunium [237.0482]	94 Pu plutonium [244.0642]	95 Am americium [243.0614]	96 Cm curium [247.0704]	97 Bk berkelium [247.0703]	98 Cf californium [251.0796]	99 Es einsteinium [252.0830]	100 Fm fermium [257.0951]	101 Md mendelevium [258.0984]	102 No nobelium [259.1010]	103 Lr lawrencium [262.1097]

Notes

- IUPAC alternative names or spelling exist for the elements aluminium (aluminum) and caesium (cesium) and, in special circumstances, sodium (natrium), potassium (kalium), iron (ferrum), copper (cuprum), silver (argentum), tin (stannum), antimony (stibium), tungsten (wolfram), gold (aurum), mercury (hydrargyrum), and lead (plumbum).
- Relative atomic masses ('atomic weights') of elements with no IUPAC assigned standard values are listed between square brackets. IUPAC 2001 standard values are given for other elements, with uncertainties in the last figure in parentheses [R. Loss, Pure Appl. Chem. 75, 1107-1122 (2003)].
- Element with atomic number 111 has not yet been named. The IUPAC provisional name is shown.
- Claims for the existence of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have not been recognized by IUPAC as of August 2003.

ds混成

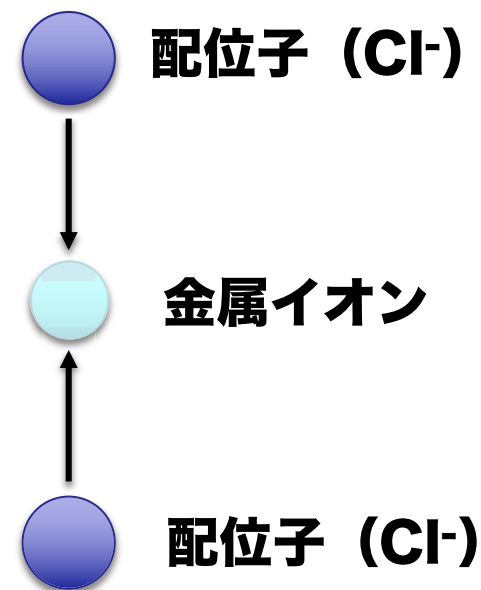
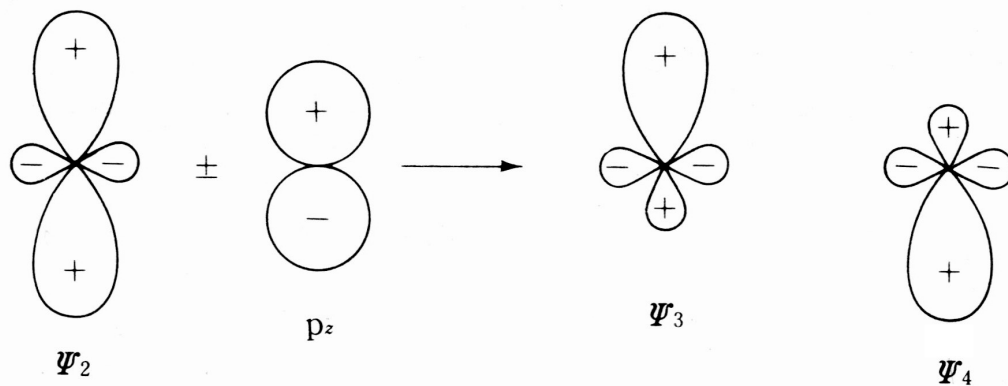
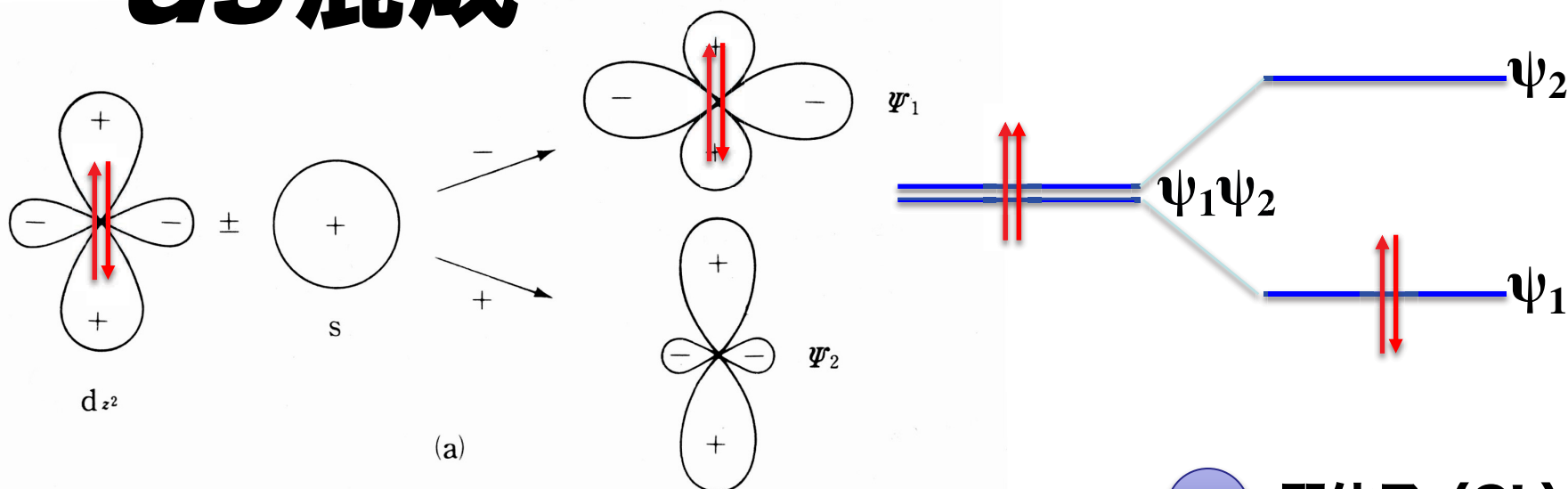
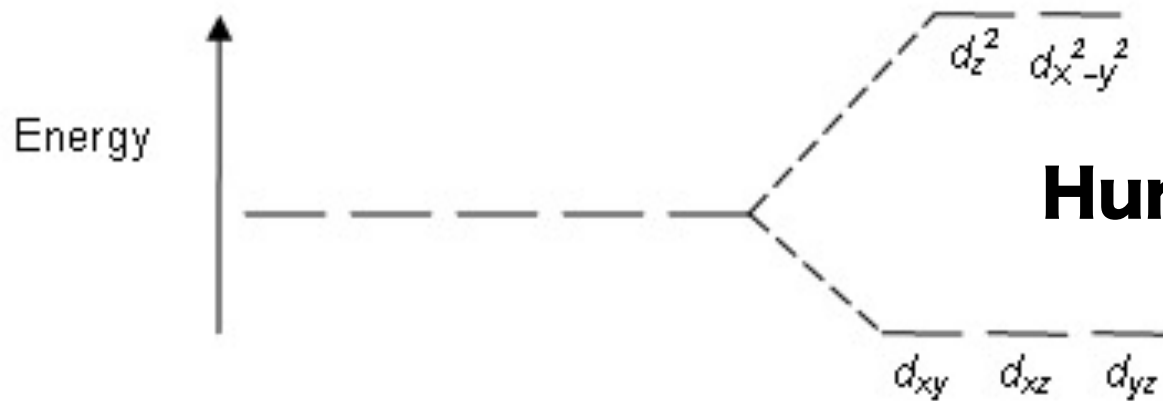


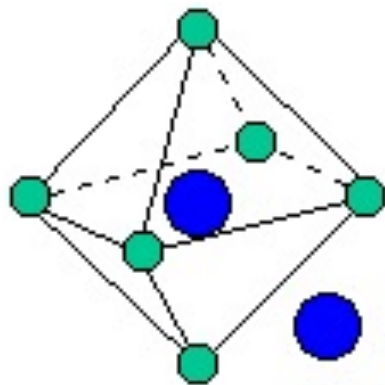
図 10・1 $(n-1)d_{z^2}$, ns , np_z の軌道の混成: (a) 混成軌道 ψ_1 と ψ_2 ができ、 z 軸から電子密度が取去られる (ψ_1 に入る): (b) ψ_2 軌道と np_z 軌道から線型結合混成軌道ができる

d 軌道の結晶場分裂



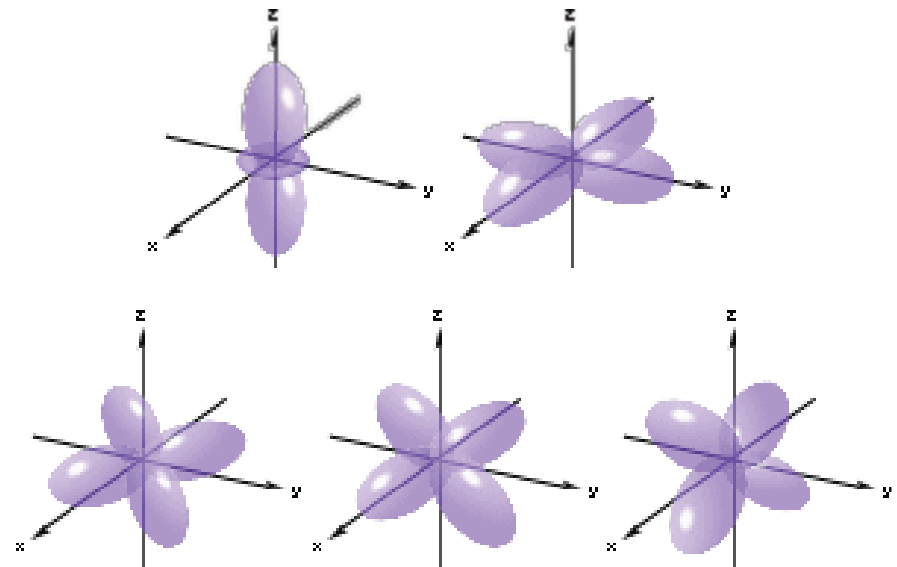
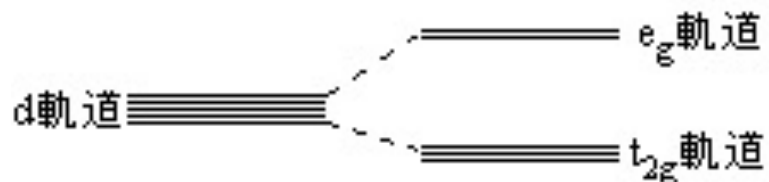
Hund ruleの破れ

Octahedral

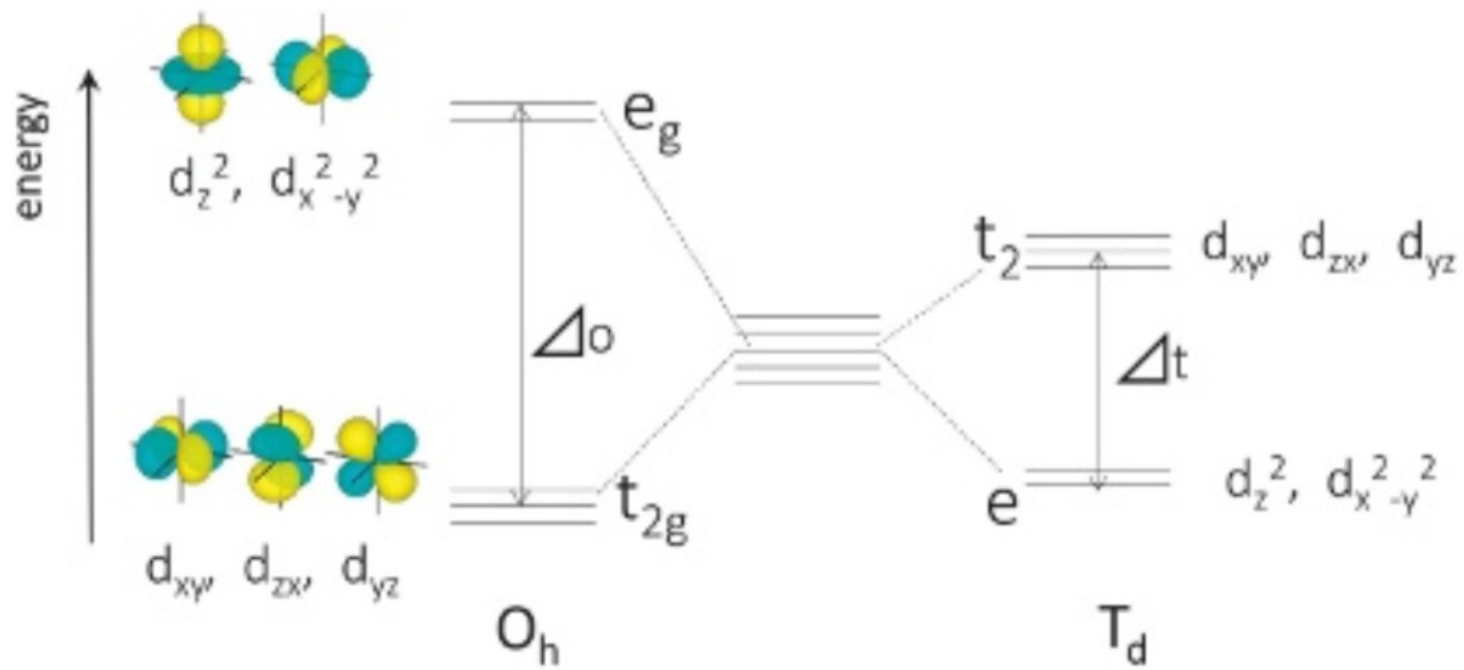


● : Cuなどの遷移金属

● : Oなどの配位子



d 軌道の結晶場分裂



*ds*混成

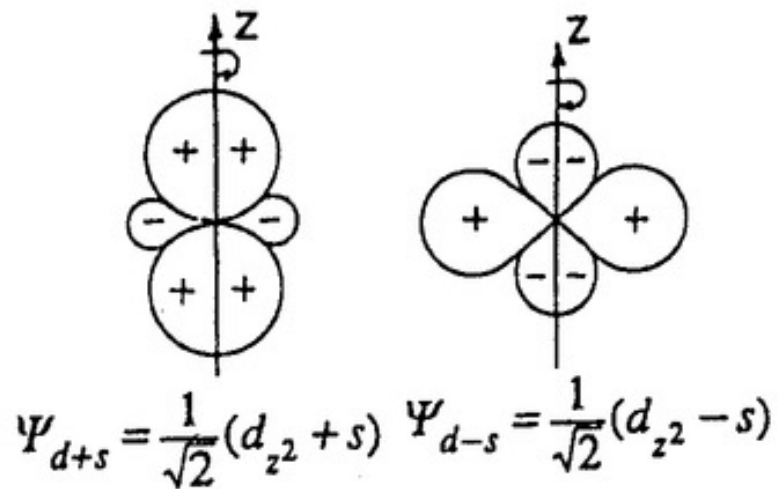
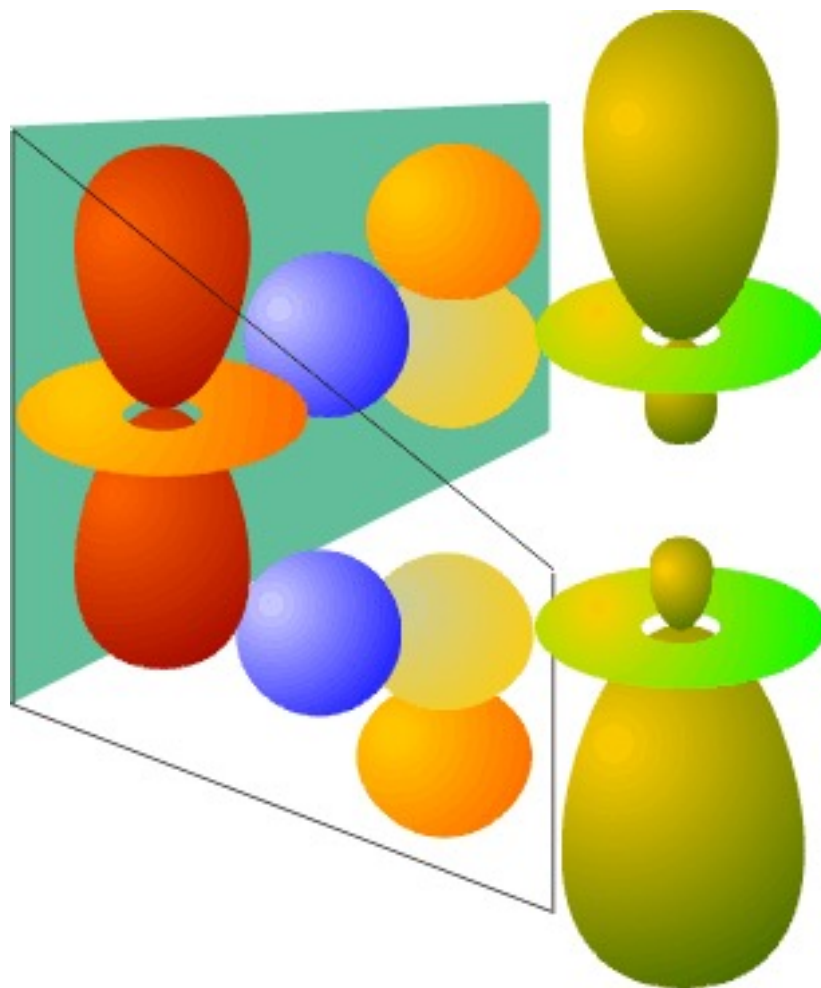
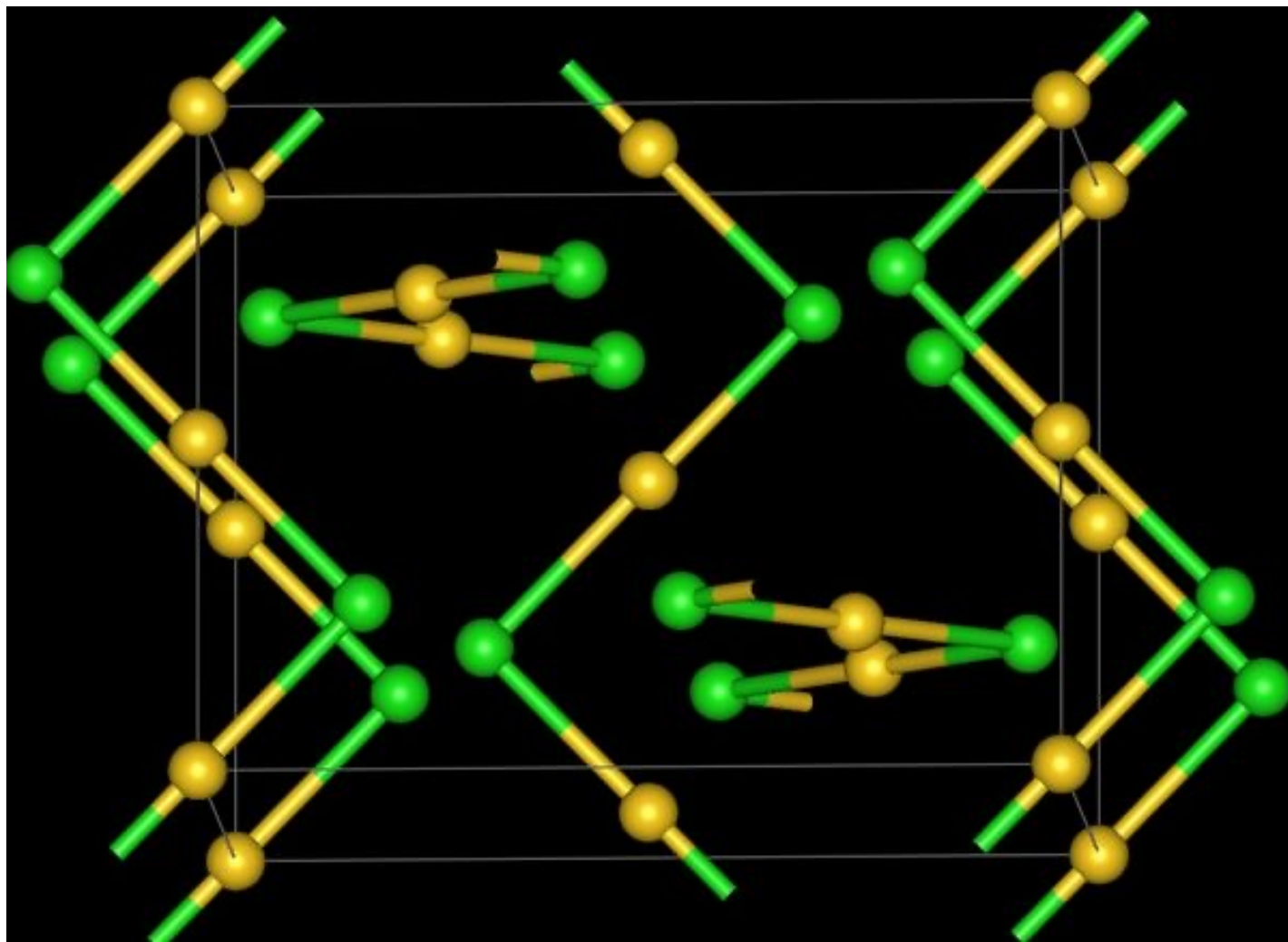


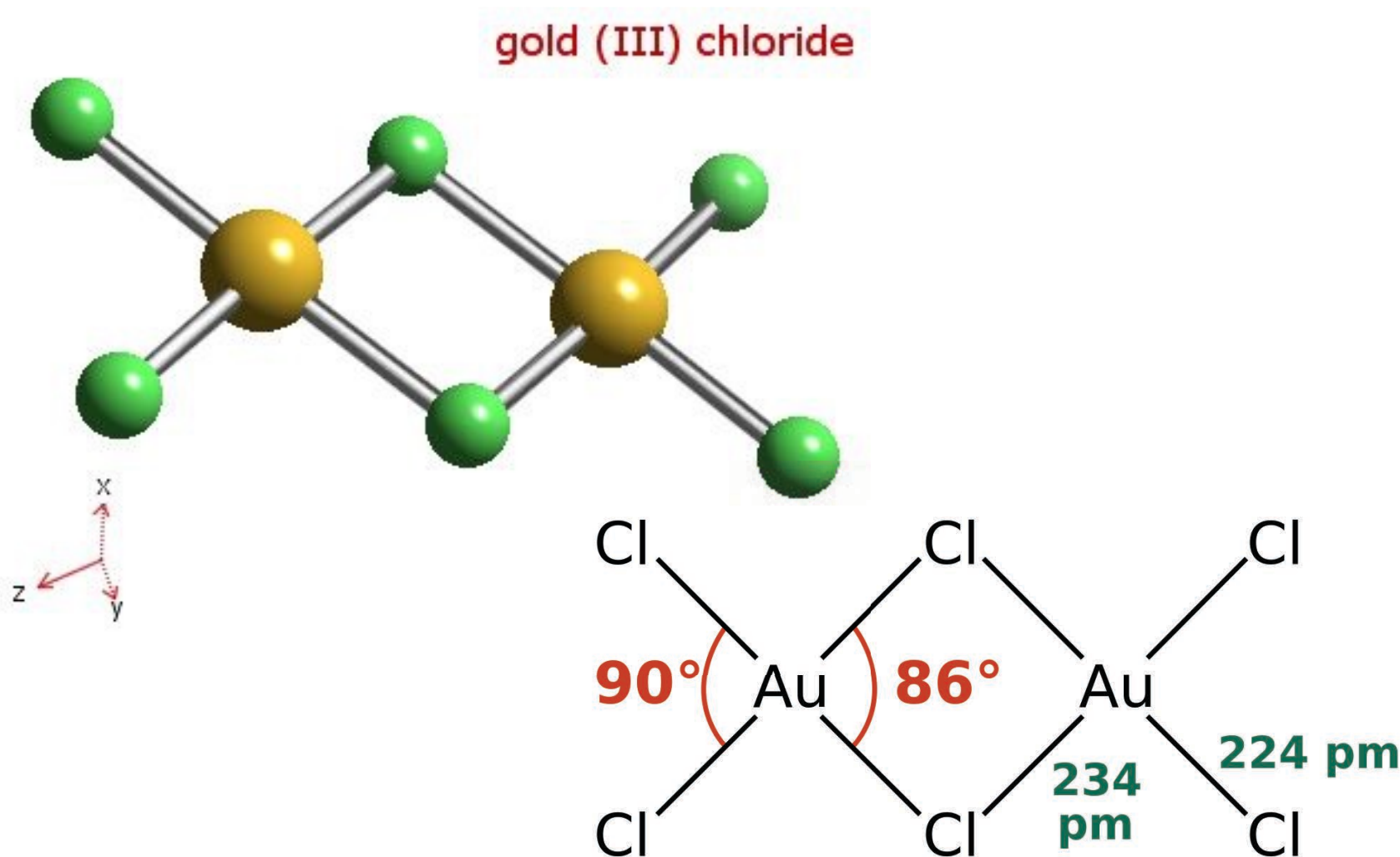
图5 s-d混成轨道 [2]

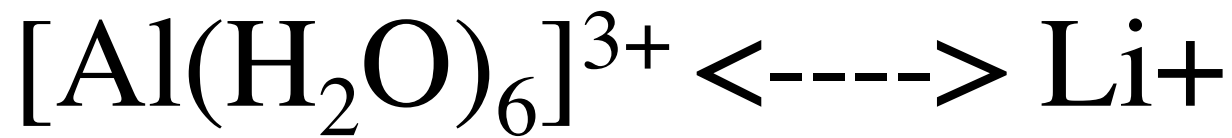


d^{10} : 化合物 (AuCl)

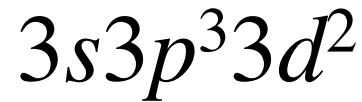


d^8 : 化合物 ($\text{Au}^{\text{III}}\text{Cl}_3 : \text{Au}_2\text{Cl}_6$)





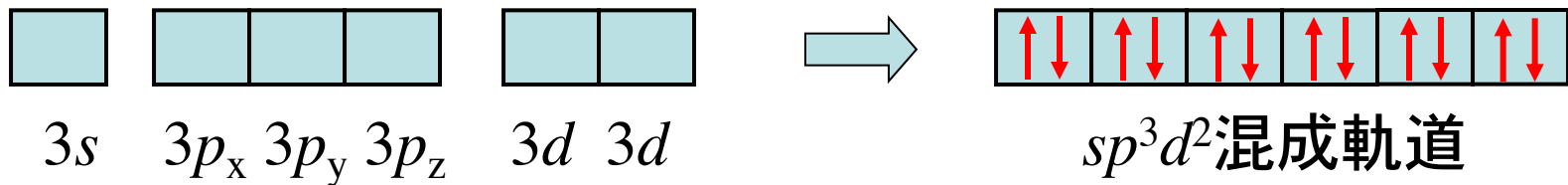
6配位



色々

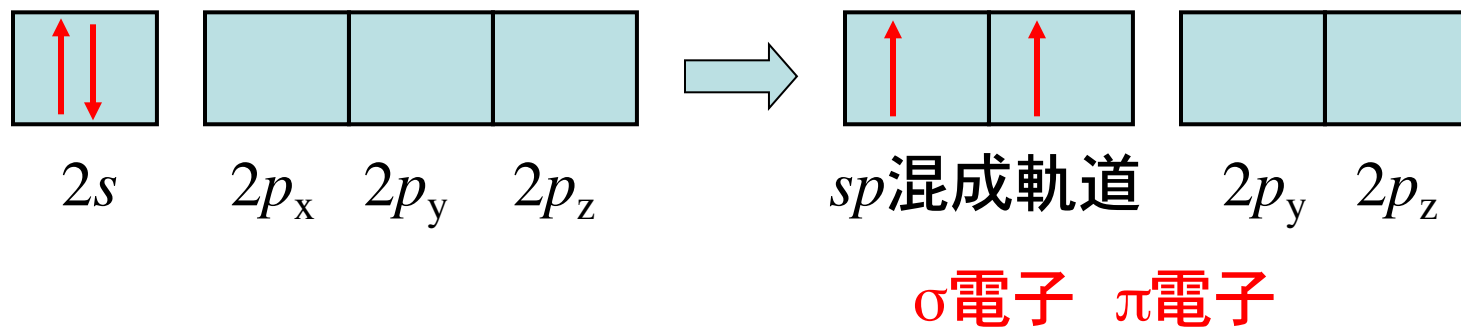
d 殻無

$\text{Al}^{3+}: sp^3d^2$ -Hybridization

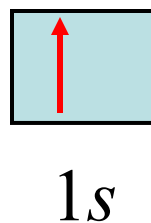




Be: *sp*-Hybridization

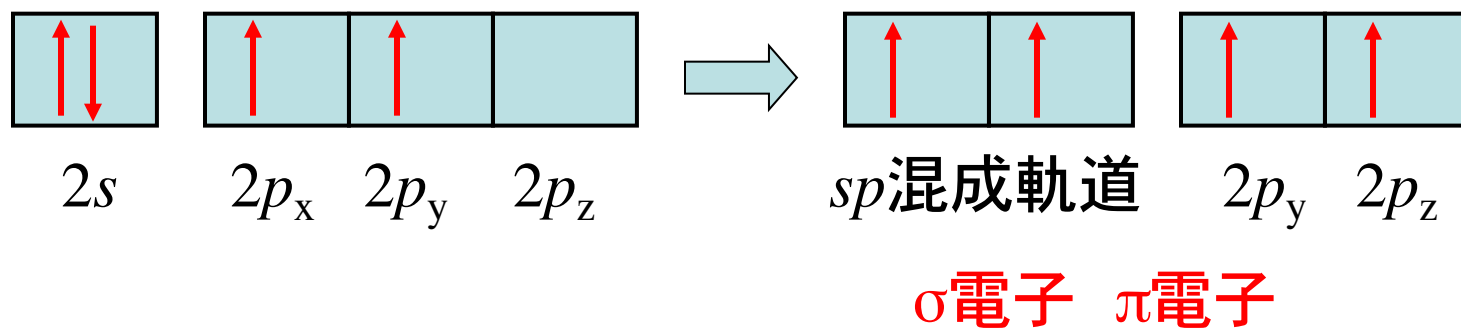


H: atomic orbital

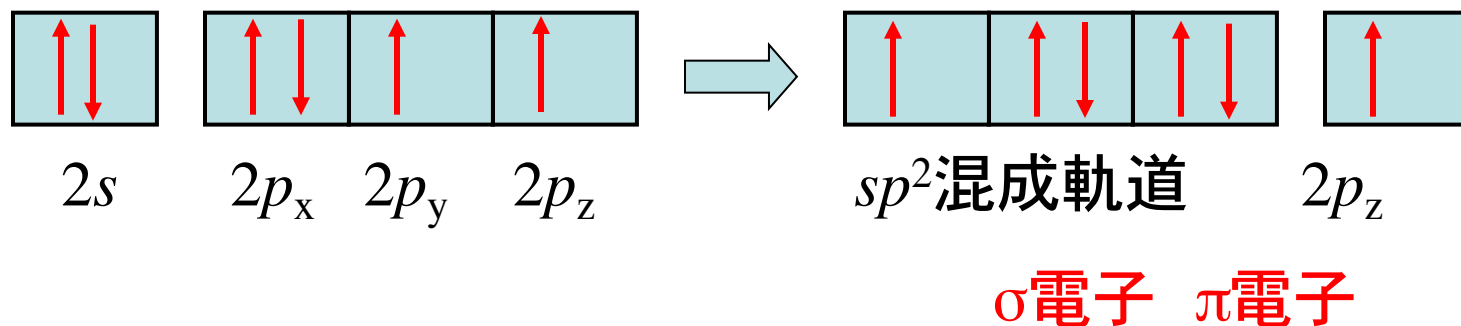




C: sp -Hybridization

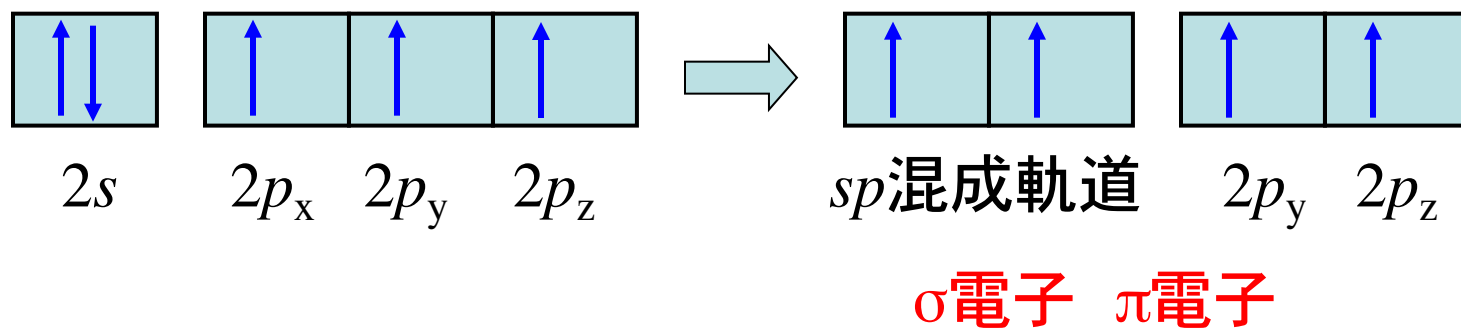


O: sp^2 -Hybridization

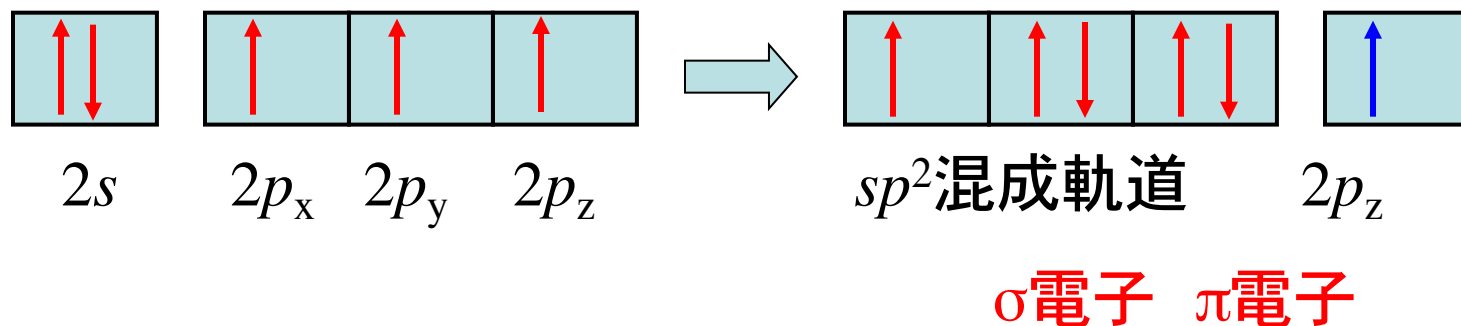


$\text{N}=\text{N}=\text{N}^-$ アジ化物イオン : azide ion

N: sp -Hybridization



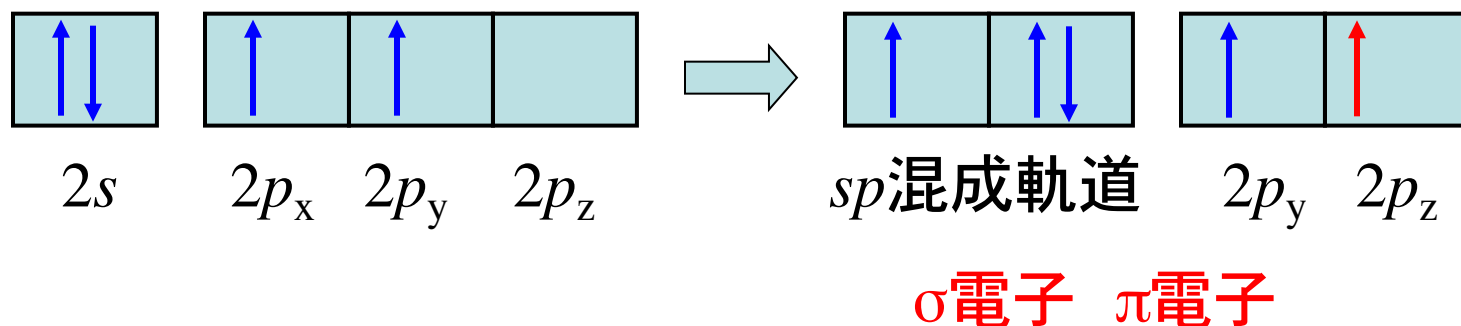
N: sp^2 -Hybridization



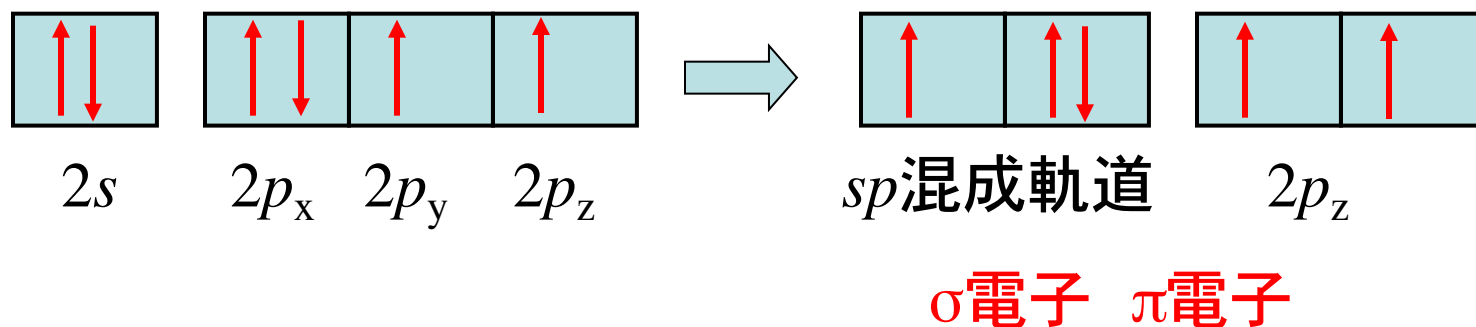


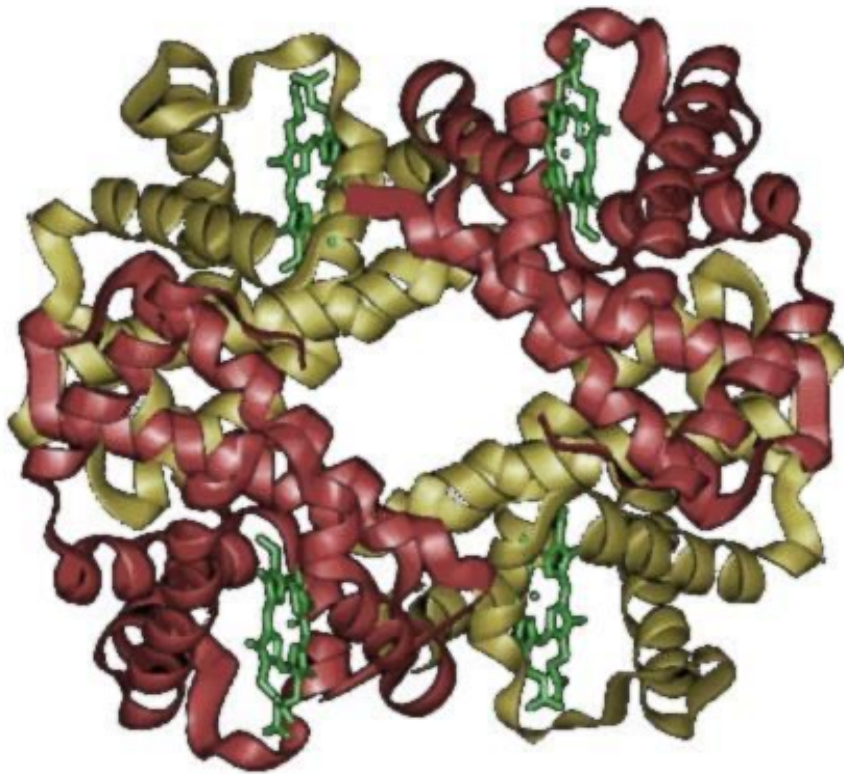
$\text{C} \equiv \text{N}^-$ と等電荷

C : sp -Hybridization

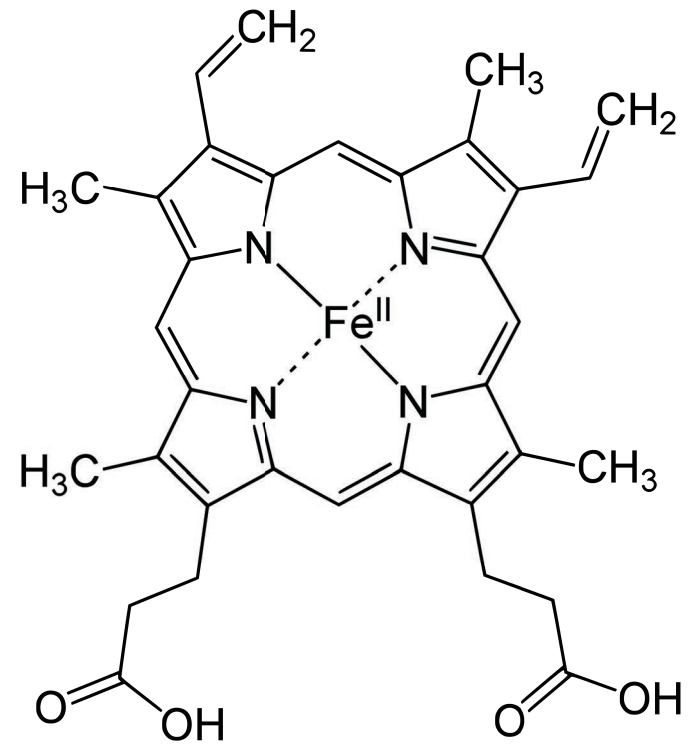


O : sp -Hybridization

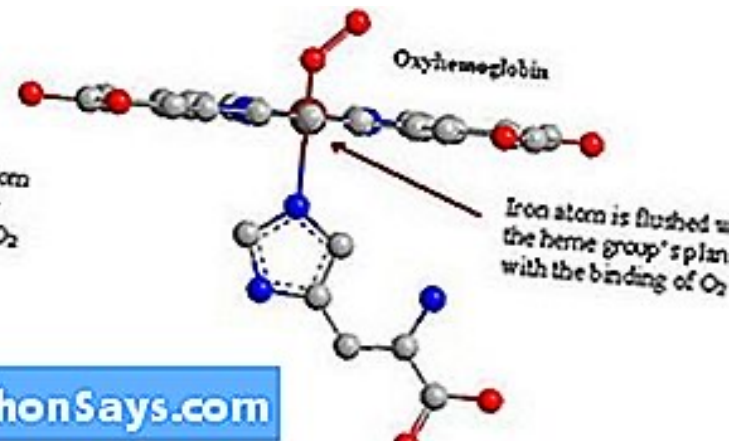
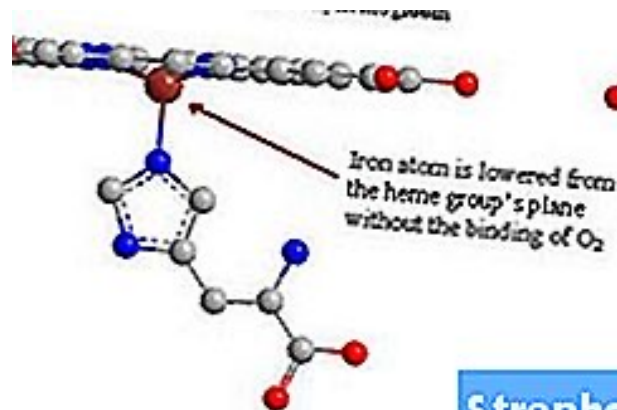




ヘモグロビン (タンパク質)

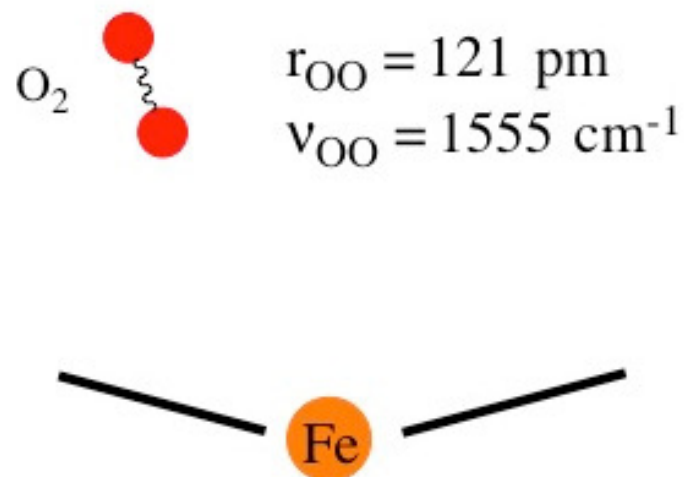


ヘムb (Fe^{2+} ポルフィリン錯体)



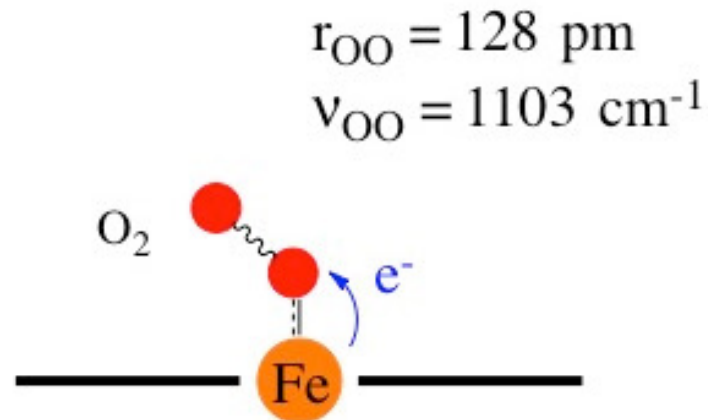
空気中の酸素分子

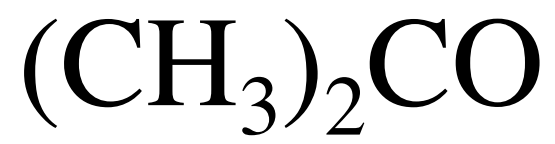
Free oxygen



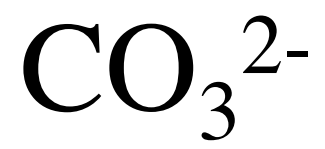
ヘモグロビンに結合した酸素分子

Fe-bound oxygen

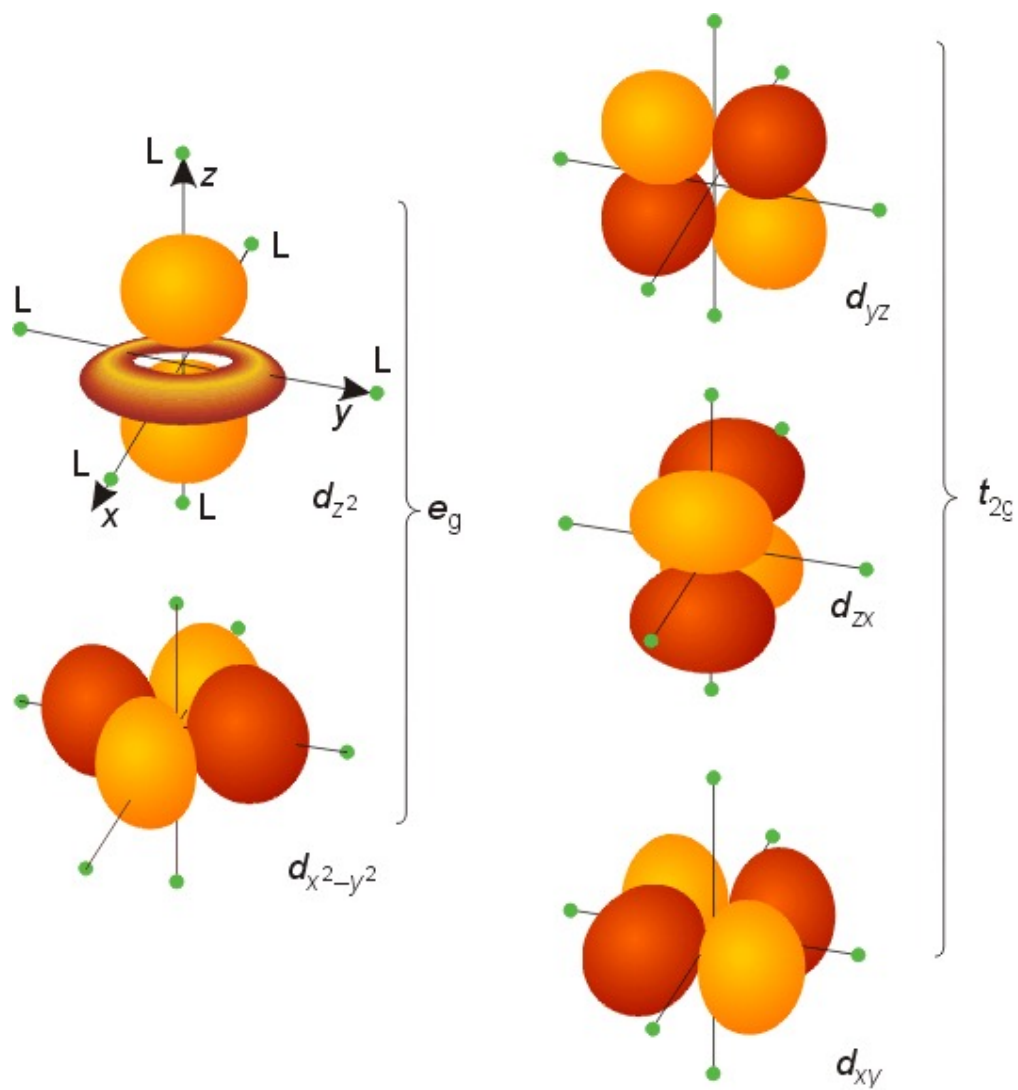


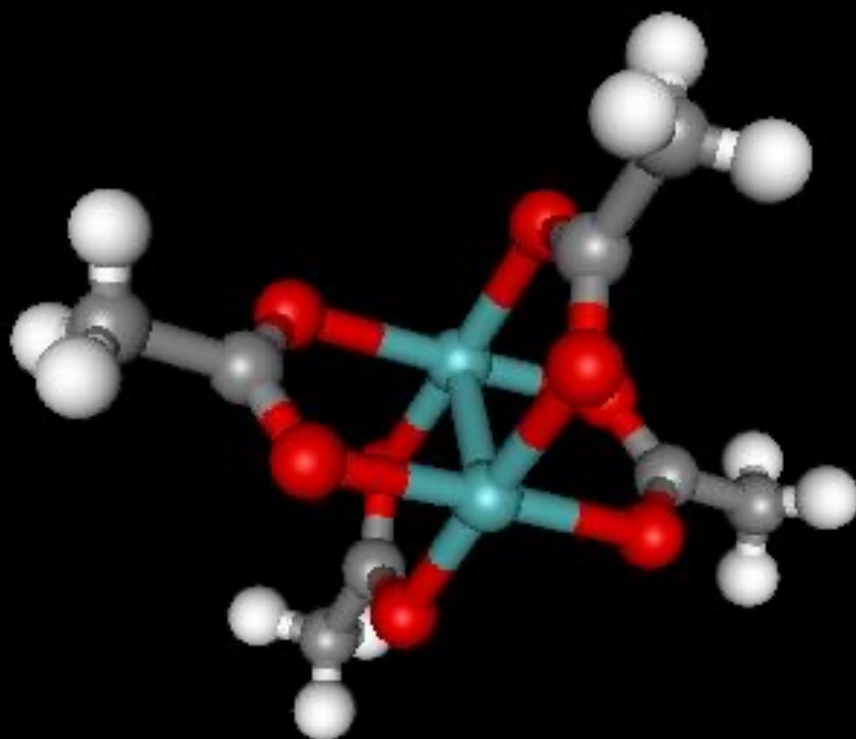


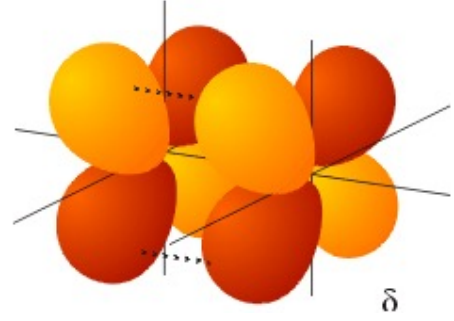
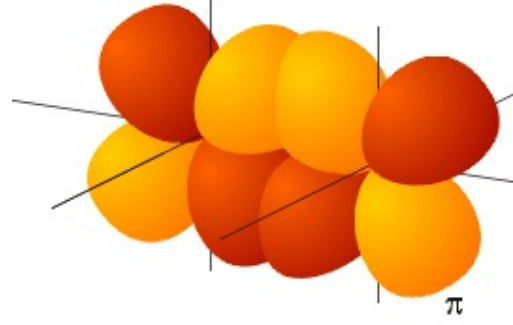
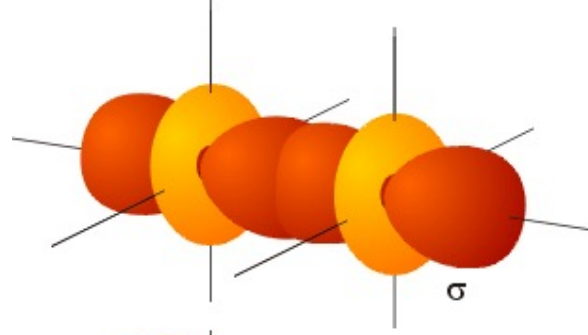
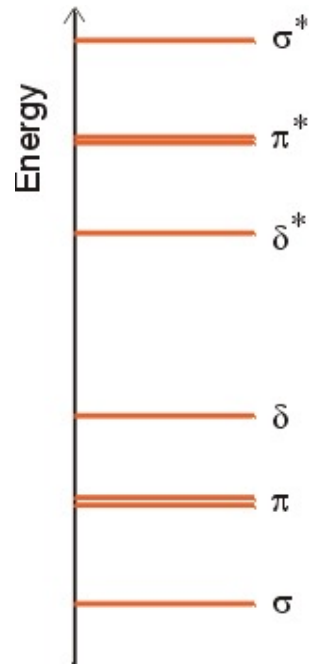












π 結合

配位結合 $N \rightarrow H$

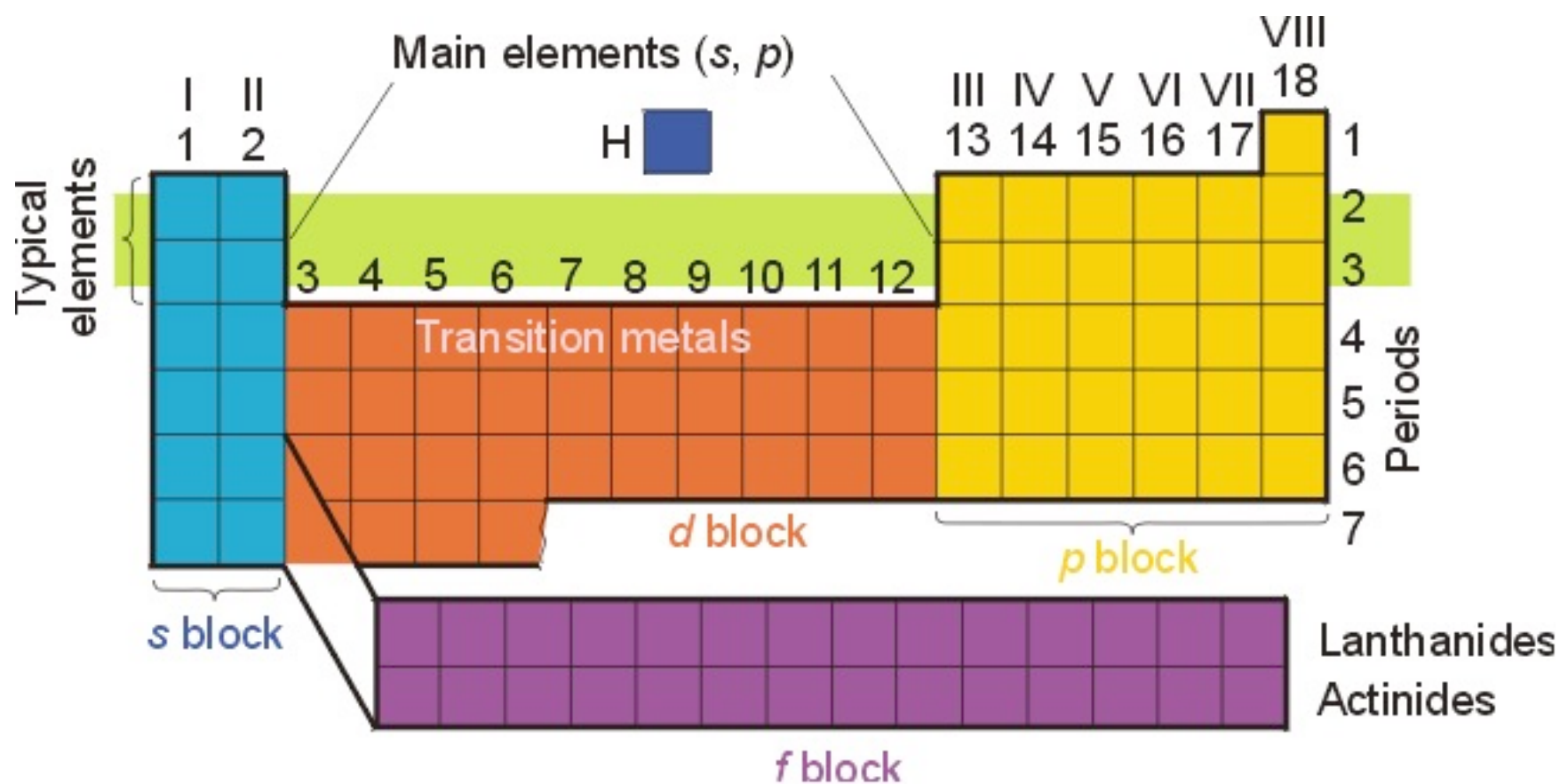
分子軌道論から

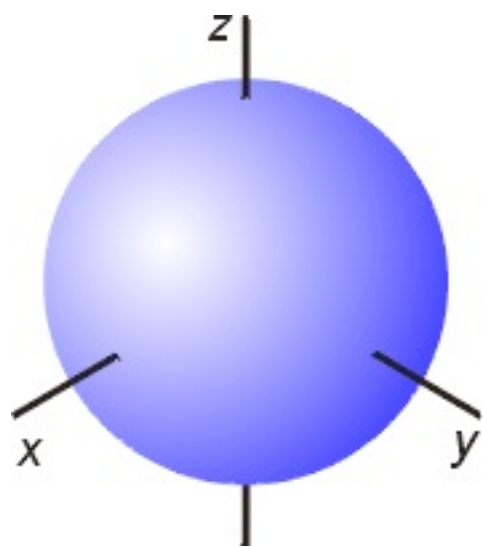
IUPAC Periodic Table of the Elements

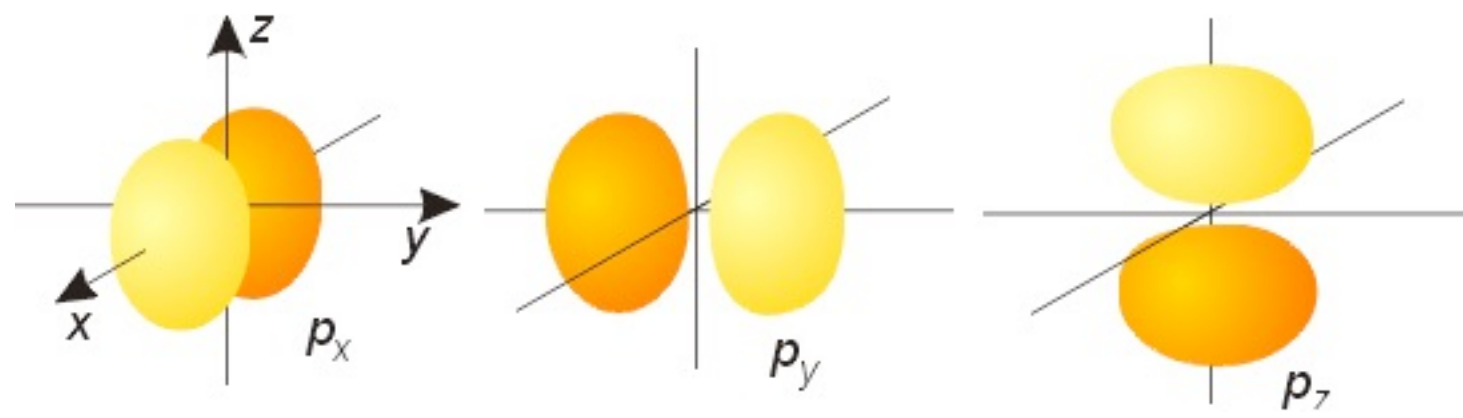
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen 1.007 94(7)																	2 He helium 4.002 602(2)
3 Li lithium 6.941(2)	4 Be beryllium 9.012 182(3)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.0067(2)	8 O oxygen 15.9994(3)	9 F fluorine 18.998 4032(5)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.989 770(2)	12 Mg magnesium 24.3050(6)											13 Al aluminium 26.981 538(2)	14 Si silicon 28.0855(3)	15 P phosphorus 30.973 761(2)	16 S sulfur 32.065(5)	17 Cl chlorine 35.453(2)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955 910(8)	22 Ti titanium 47.867(1)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938 049(9)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 200(9)	28 Ni nickel 58.6934(2)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.409(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.64(1)	33 As arsenic 74.921 60(2)	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(1)	39 Y yttrium 88.905 85(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 38(2)	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium [97.9072]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.905 50(2)	46 Pd palladium 106.42(1)	47 Ag silver 107.8682(2)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(3)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.760(1)	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.904 47(3)	54 Xe xenon 131.293(6)
55 Cs caesium 132.905 45(2)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.9479(1)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.217(3)	78 Pt platinum 195.078(2)	79 Au gold 196.966 55(2)	80 Hg mercury 200.59(2)	81 Tl thallium 204.3833(2)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.980 38(2)	84 Po polonium [209.9824]	85 At astatine [209.9871]	86 Rn radon [222.0176]
87 Fr francium [223.0197]	88 Ra radium [226.0254]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [261.1088]	105 Db dubnium [262.1141]	106 Sg seaborgium [266.1219]	107 Bh bohrium [264.12]	108 Hs hassium [277]	109 Mt meitnerium [268.1388]	110 Ds darmstadtium [269]	111 Uuu unununium [272]	112 Uub ununbium [285]		114 Uuq ununquadium [289]		116 Uuh ununhexium [289]		
			57 La lanthanum 138.9055(2)	58 Ce cerium 140.116(1)	59 Pr praseodymium 140.907 65(2)	60 Nd neodymium 144.24(3)	61 Pm promethium [144.9127]	62 Sm samarium 150.36(3)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925 34(2)	66 Dy dysprosium 162.500(1)	67 Ho holmium 164.930 32(2)	68 Er erbium 167.259(3)	69 Tm thulium 168.934 21(2)	70 Yb ytterbium 173.04(3)	71 Lu lutetium 174.967(1)
			89 Ac actinium [227.0277]	90 Th thorium 232.0381(1)	91 Pa protactinium 231.036 88(2)	92 U uranium 238.028 91(3)	93 Np neptunium [237.0482]	94 Pu plutonium [244.0642]	95 Am americium [243.0614]	96 Cm curium [247.0704]	97 Bk berkelium [247.0703]	98 Cf californium [251.0796]	99 Es einsteinium [252.0830]	100 Fm fermium [257.0951]	101 Md mendelevium [258.0984]	102 No nobelium [259.1010]	103 Lr lawrencium [262.1097]

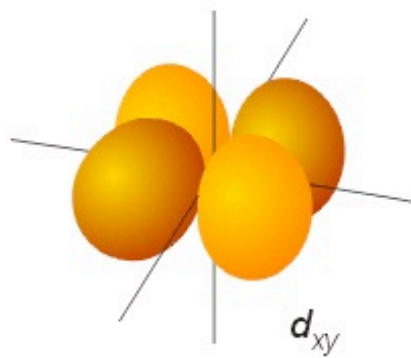
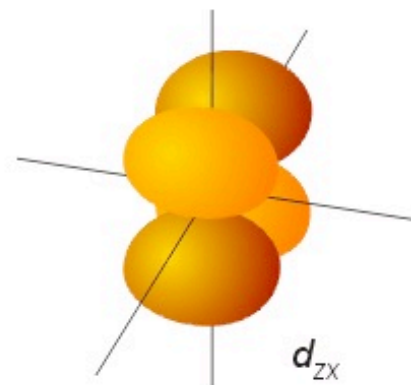
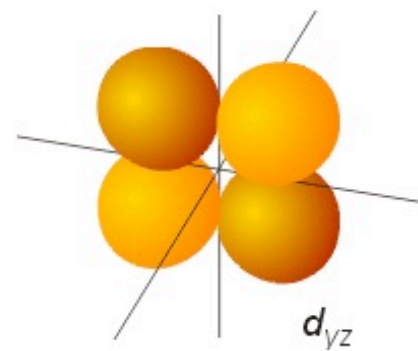
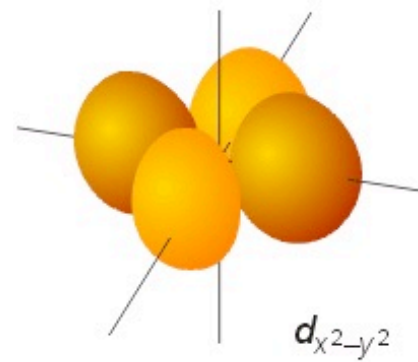
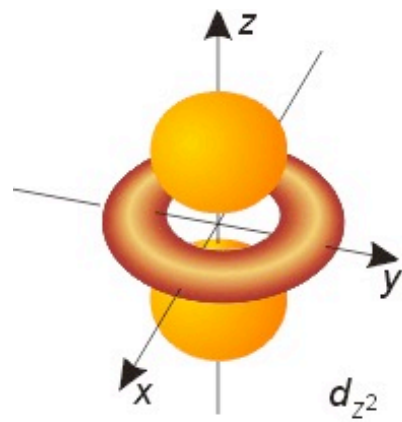
Notes

- IUPAC alternative names or spelling exist for the elements aluminium (aluminum) and caesium (cesium) and, in special circumstances, sodium (natrium), potassium (kalium), iron (ferrum), copper (cuprum), silver (argentum), tin (stannum), antimony (stibium), tungsten (wolfram), gold (aurum), mercury (hydrargyrum), and lead (plumbum).
- Relative atomic masses ('atomic weights') of elements with no IUPAC assigned standard values are listed between square brackets. IUPAC 2001 standard values are given for other elements, with uncertainties in the last figure in parentheses [R. Loss, Pure Appl. Chem. 75, 1107-1122 (2003)].
- Element with atomic number 111 has not yet been named. The IUPAC provisional name is shown.
- Claims for the existence of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have not been recognized by IUPAC as of August 2003.

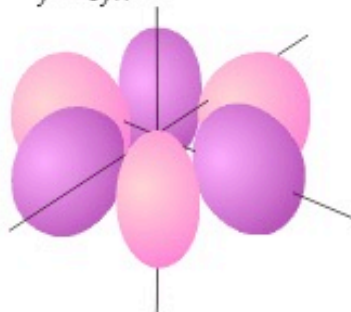




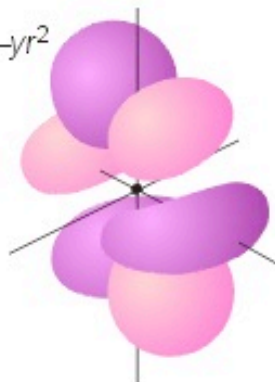




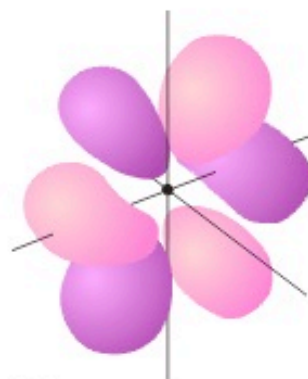
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



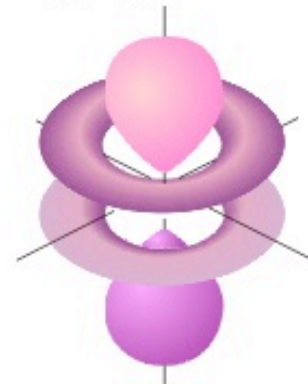
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



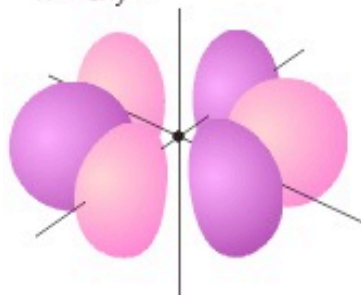
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



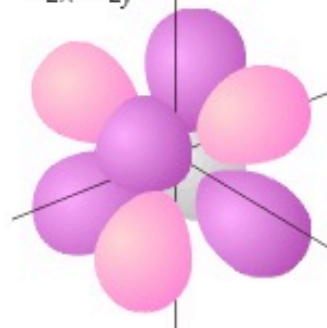
$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



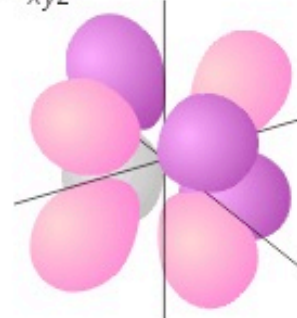
$$4f_{x^3-3xy^2}$$

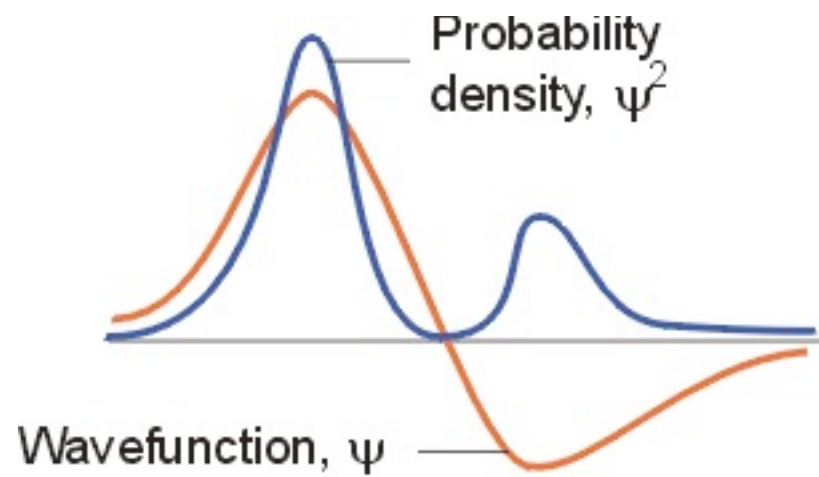


$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$





Probability
density

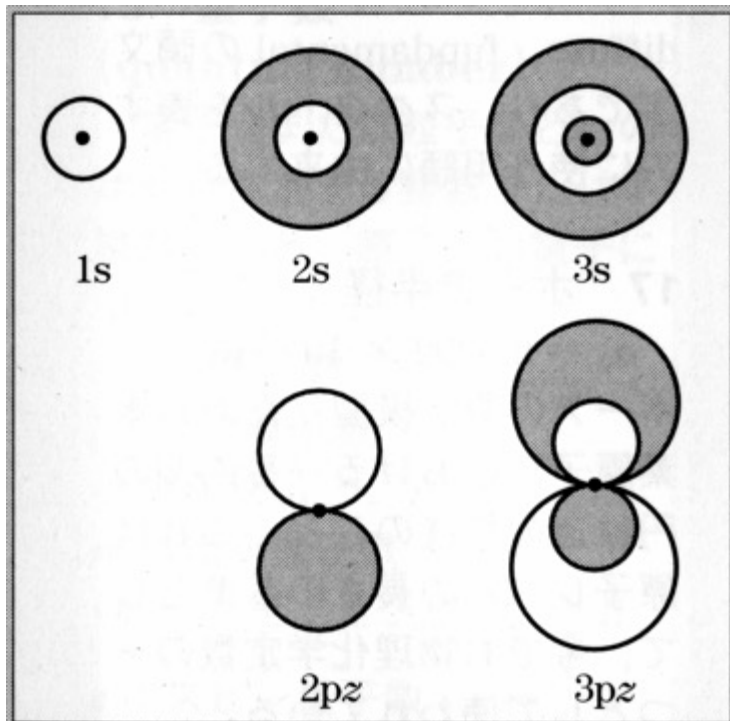
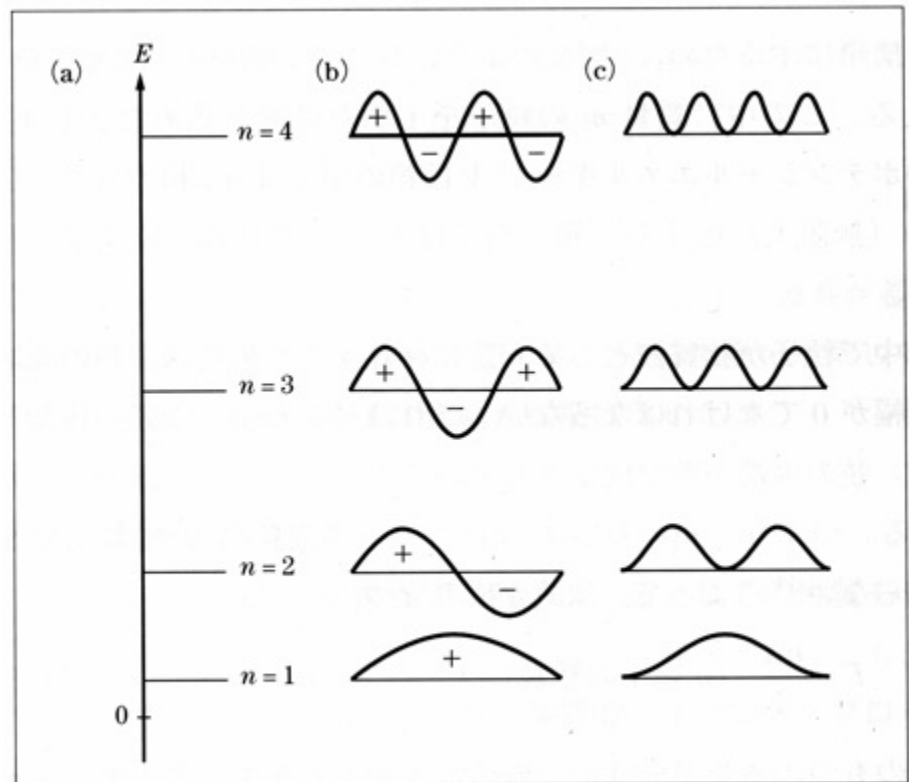


図6 軌道の空間分布の模式図
(白は正、黒は負、中央の黒丸は原子核)



一次元の箱の中の粒子

(a) エネルギー準位, (b) 波動関数 Ψ , (c) 存在密度 $|\Psi|^2$

$$c = v \times \lambda$$

$$E = h \times v = h \times \frac{c}{\lambda}$$

c : 光速、 h : プランク定数

v : 振動数、 λ : 波長

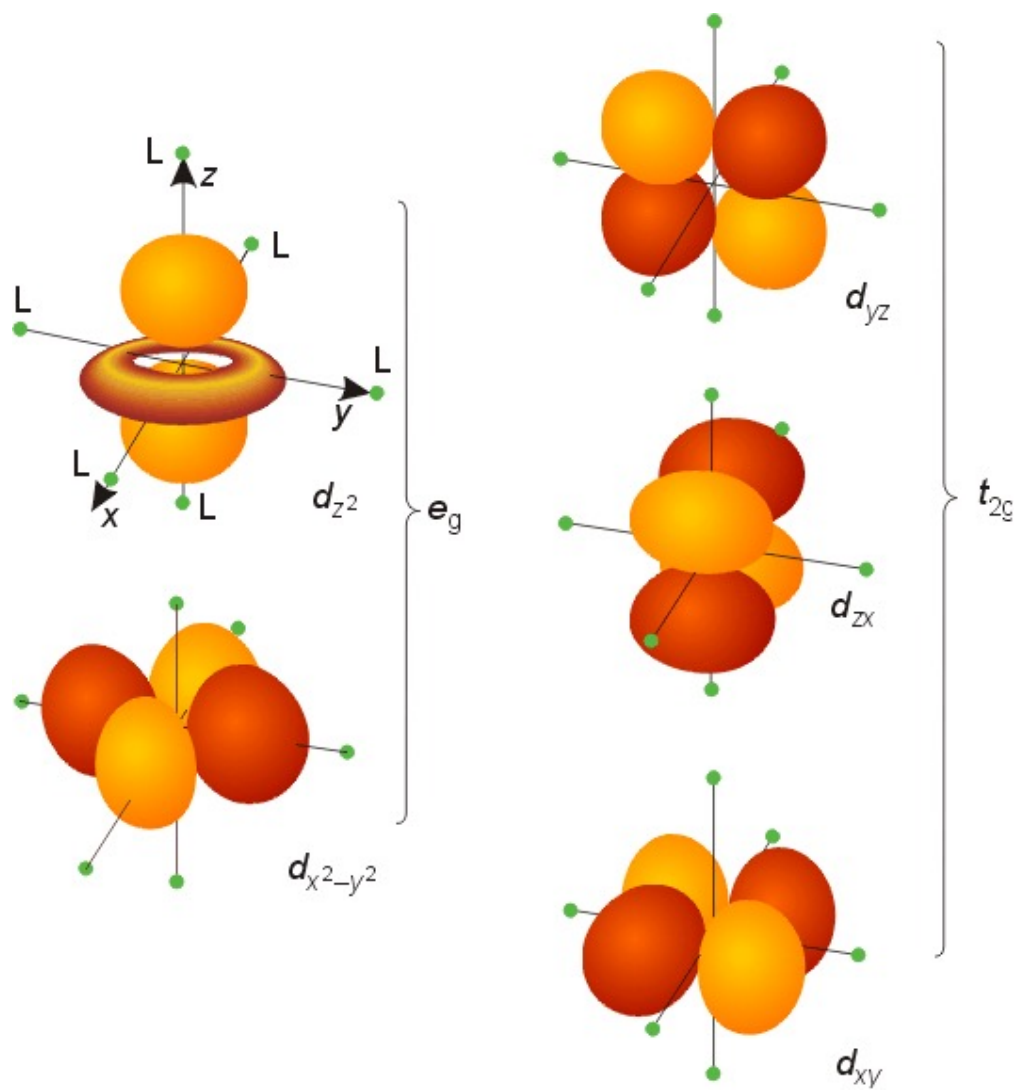
炭素(C)とケイ素(Si)の違い

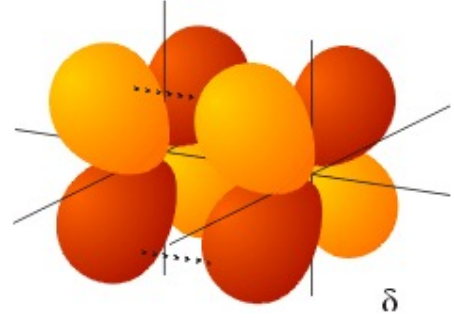
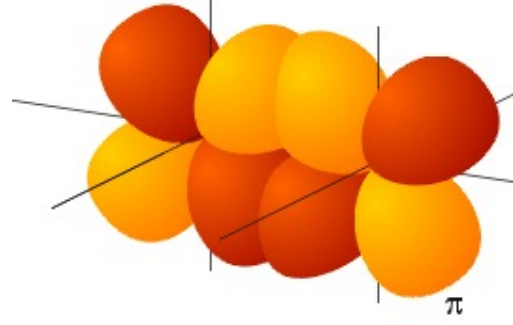
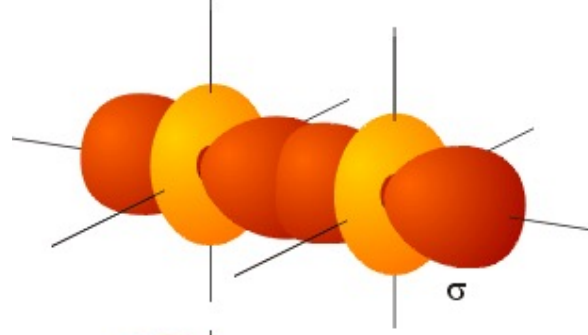
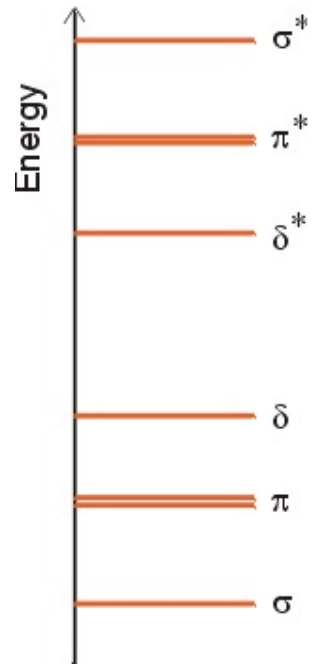
C: 多重結合性(二重、三重結合)

Si: 単結合(多重結合は希)

C: $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$

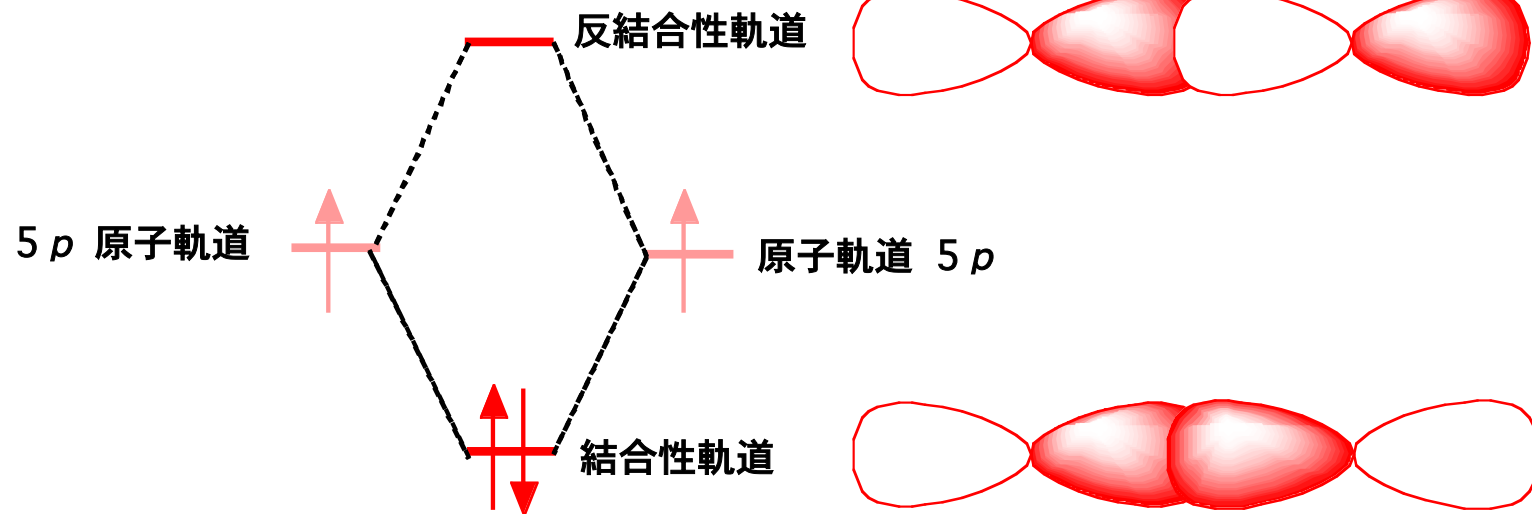
Si: $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$





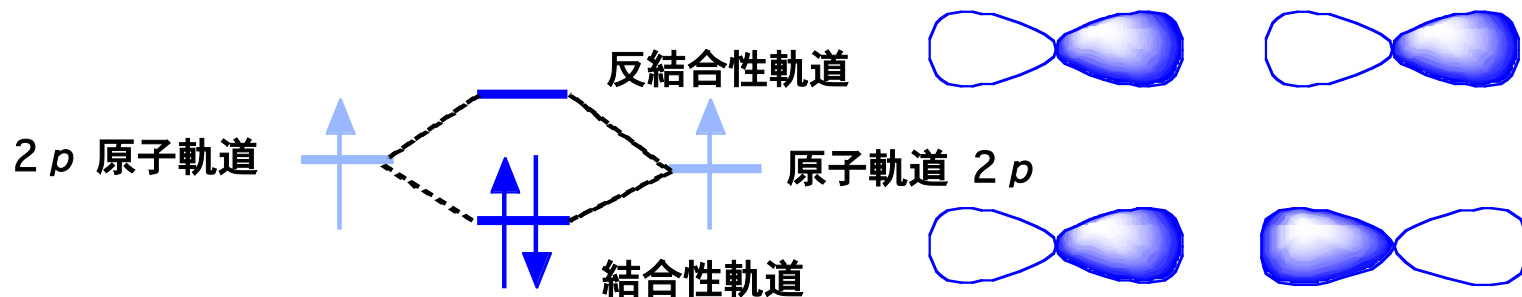
軌道（波動関数）の広がり

共有結合性：大 (I_2)



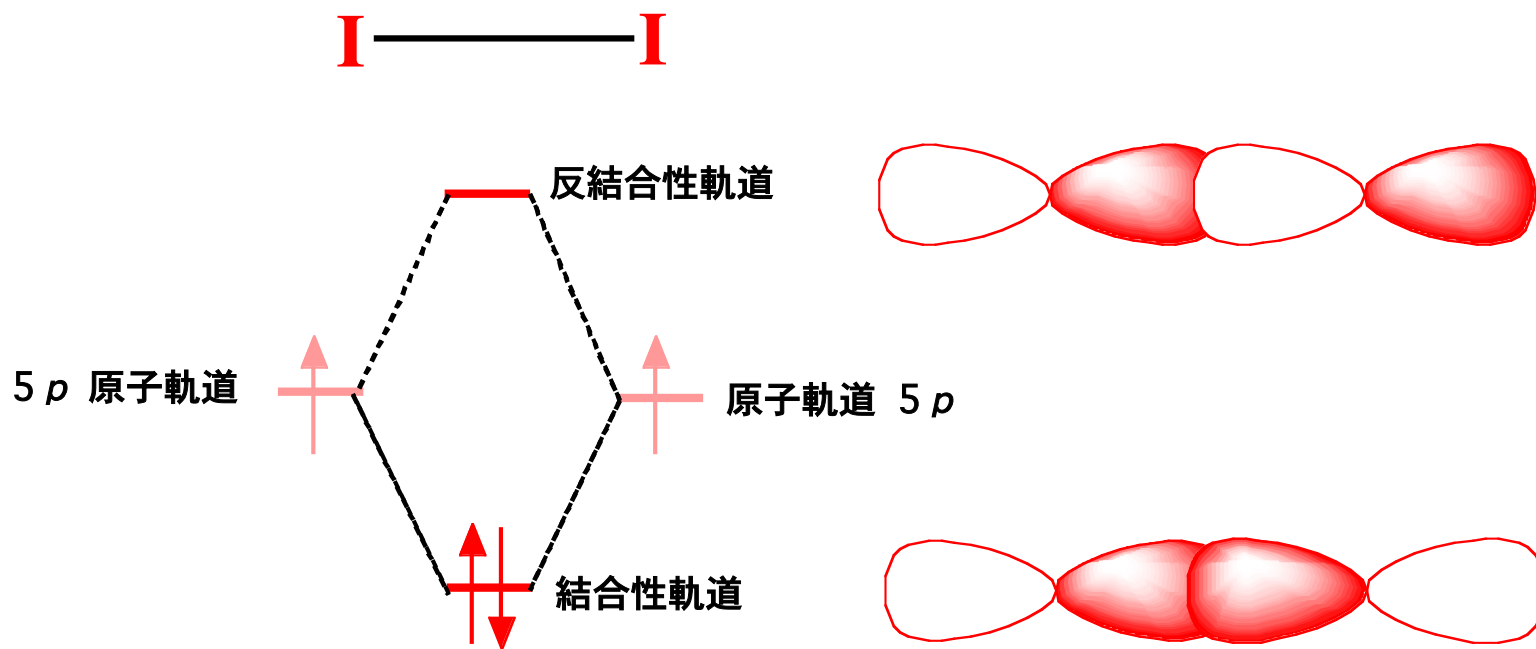
軌道（波動関数）の広がり

共有結合性：小 (F_2)



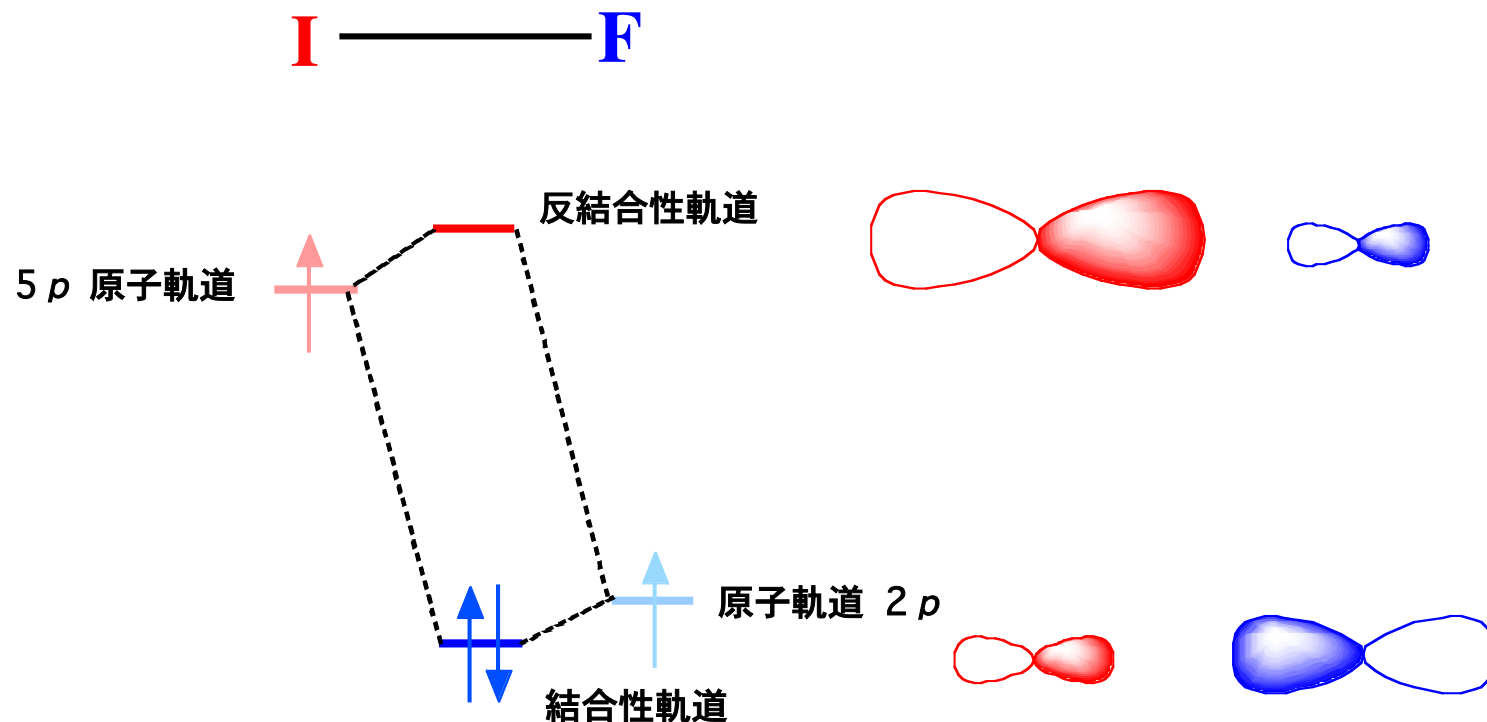
軌道（波動関数）のエネルギー差

共有結合性：大 (I_2)



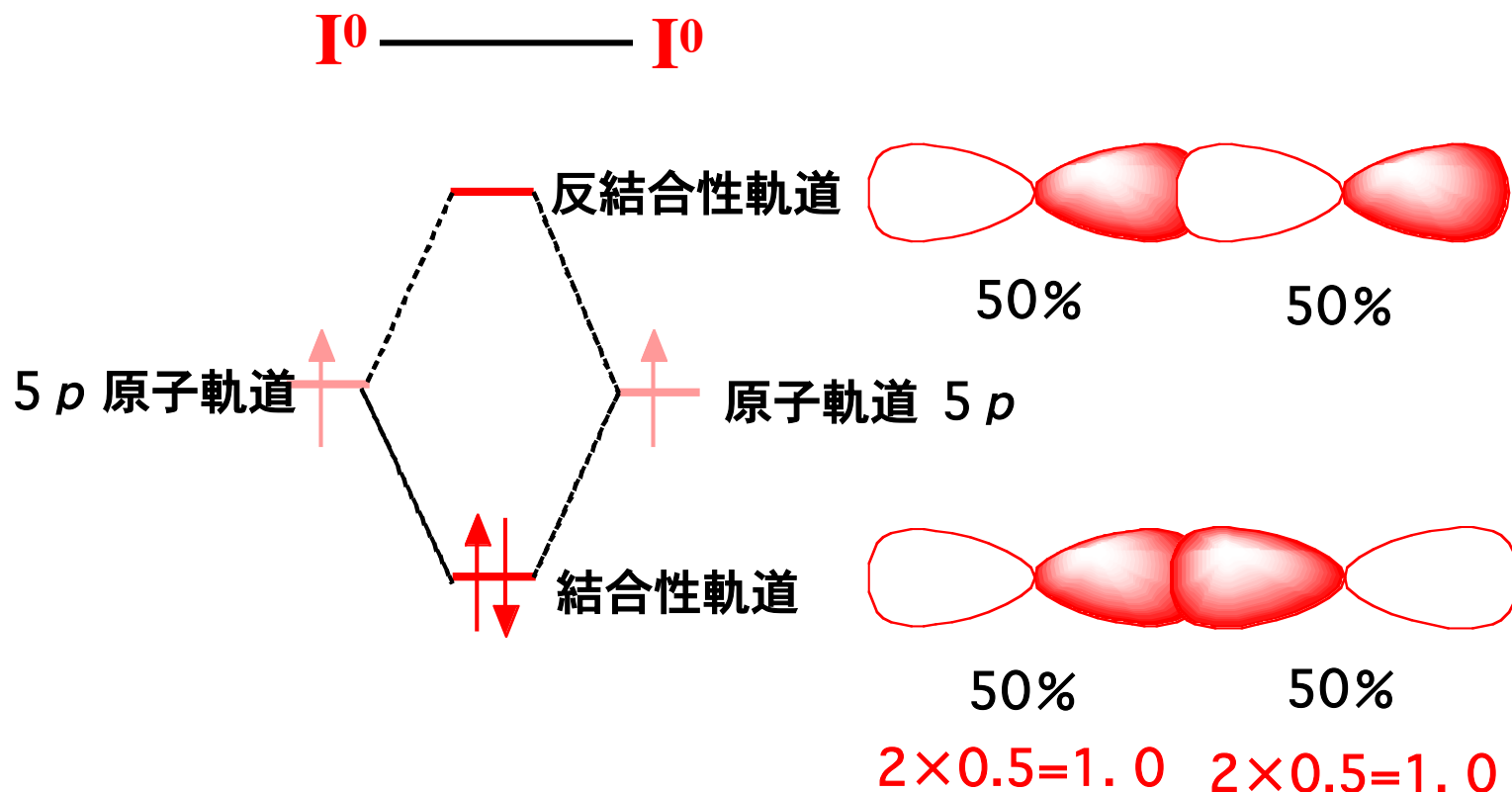
軌道（波動関数）のエネルギー差

共有結合性：小 (I-F)



無極性と極性

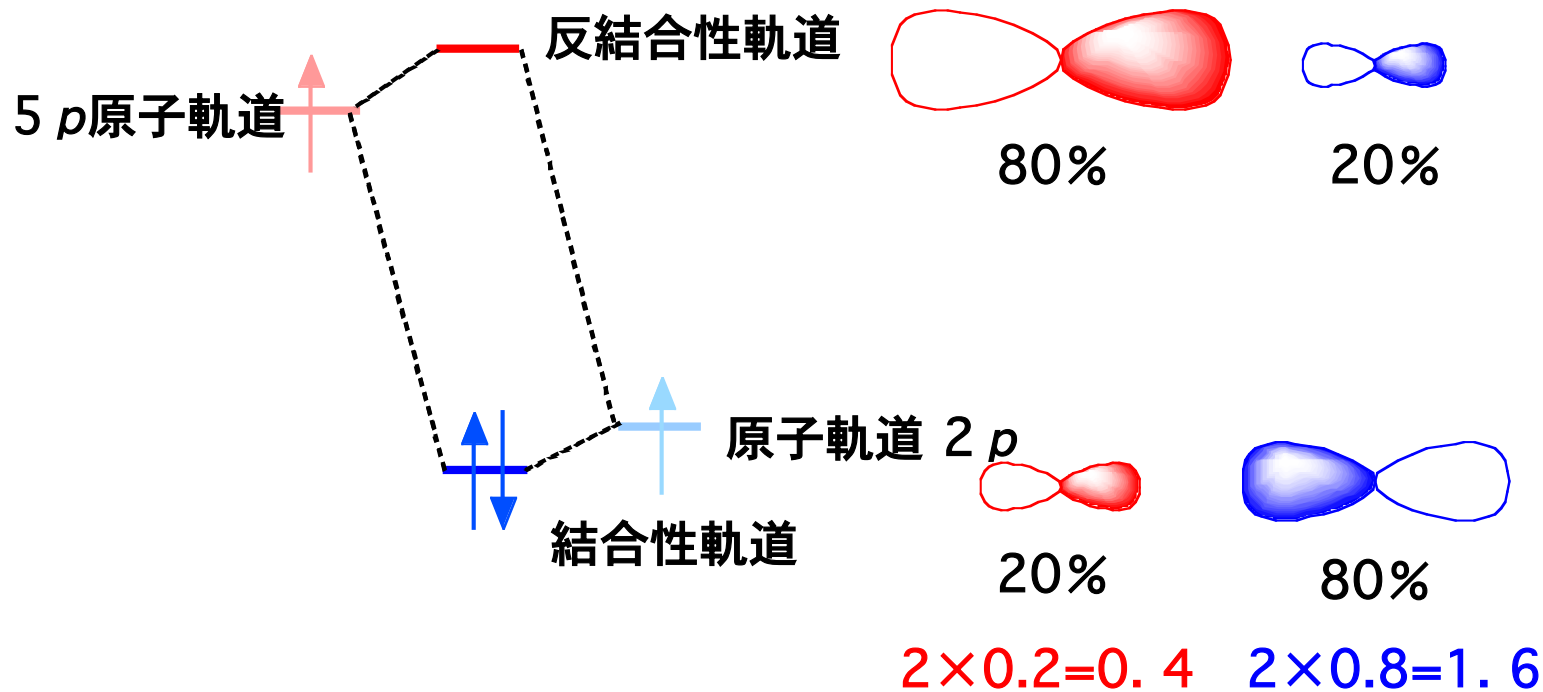
極性：無 (I_2)



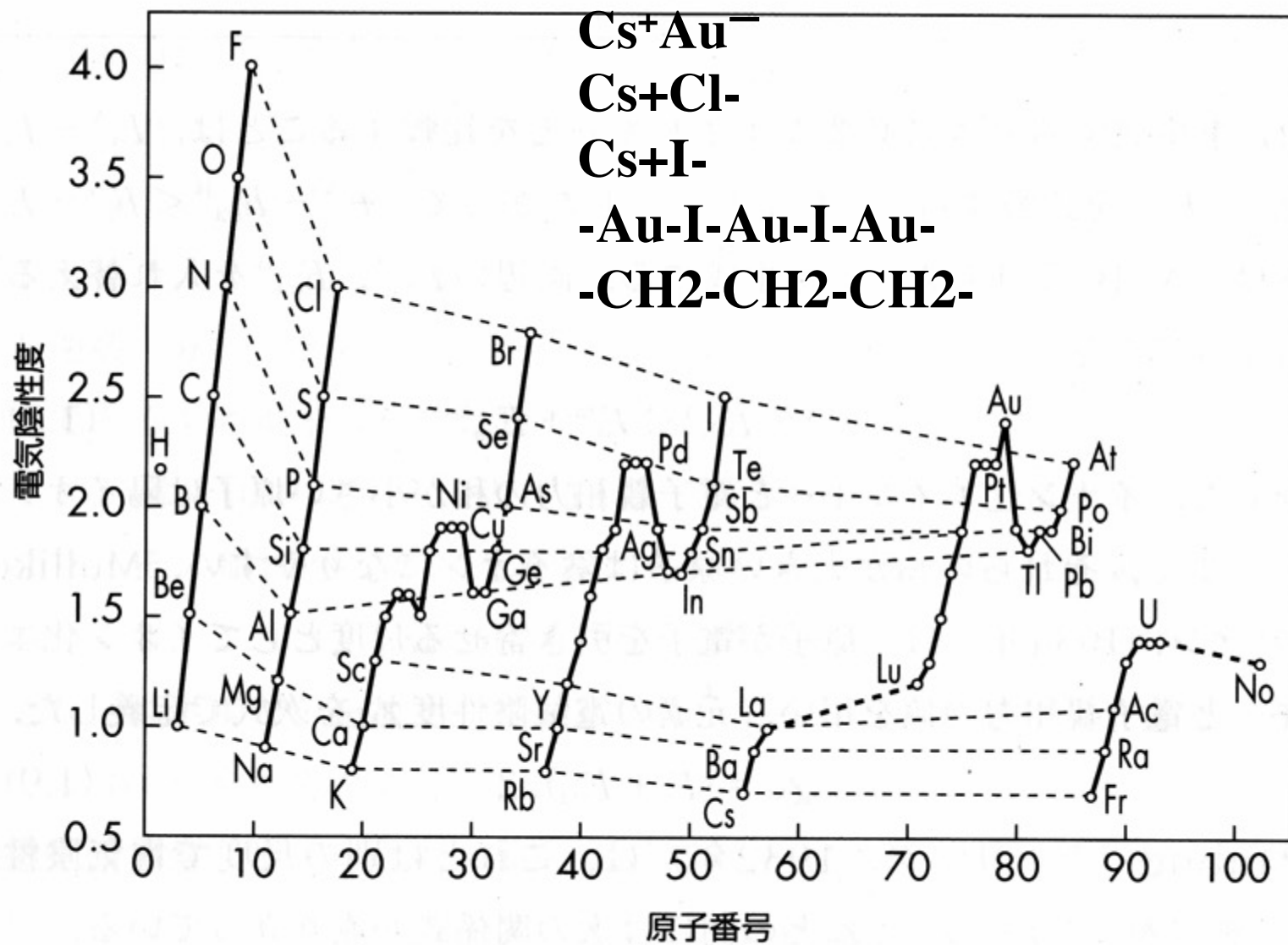
無極性と極性

極性：有 (I-F)

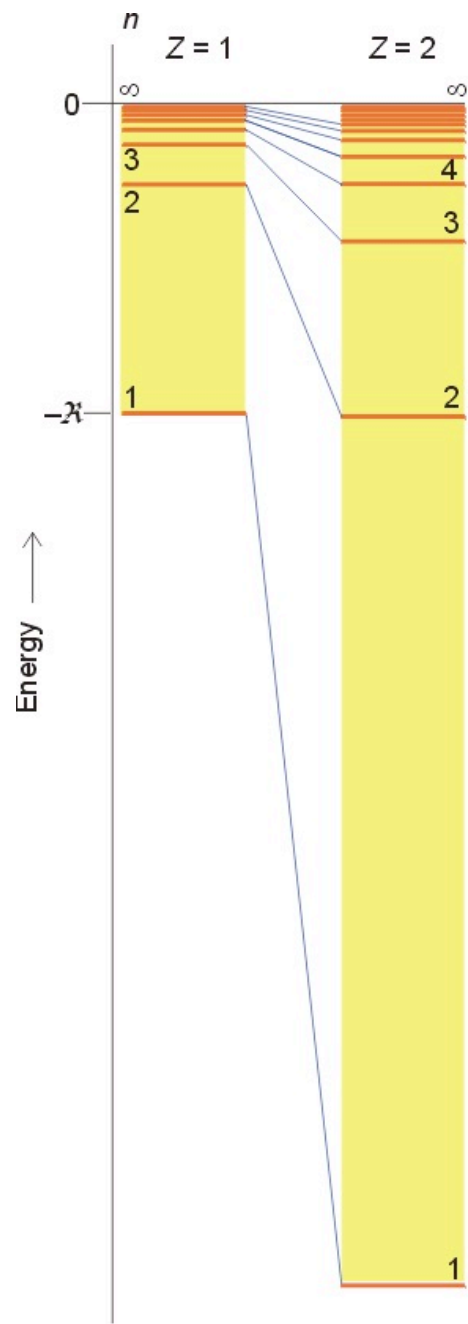
I^{0.6+} ————— F^{0.6-}



原子軌道間のエネルギー差があれば、
結合には必ず極性が生じる



電気陰性度の周期性.



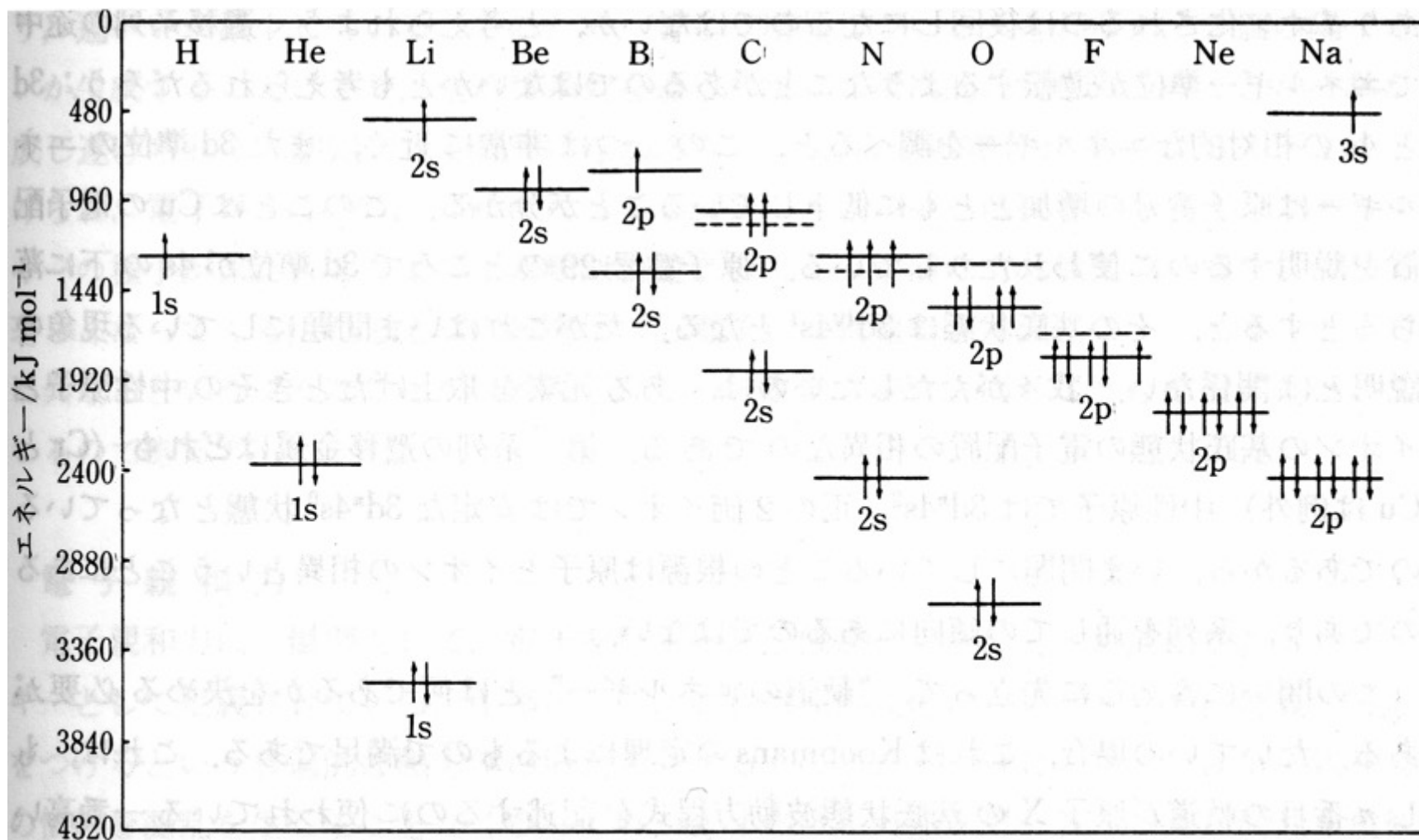
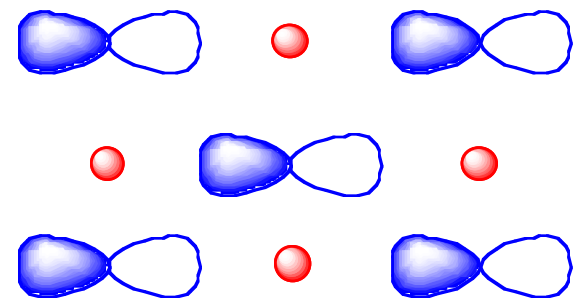
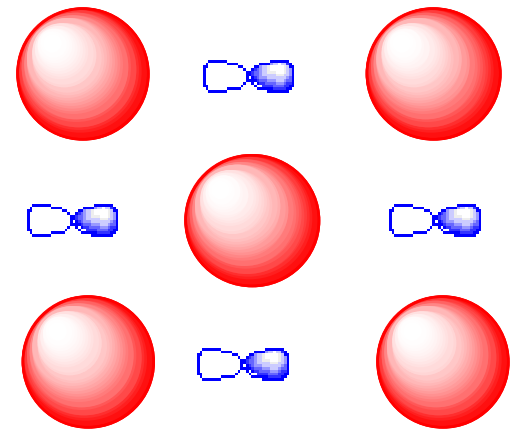
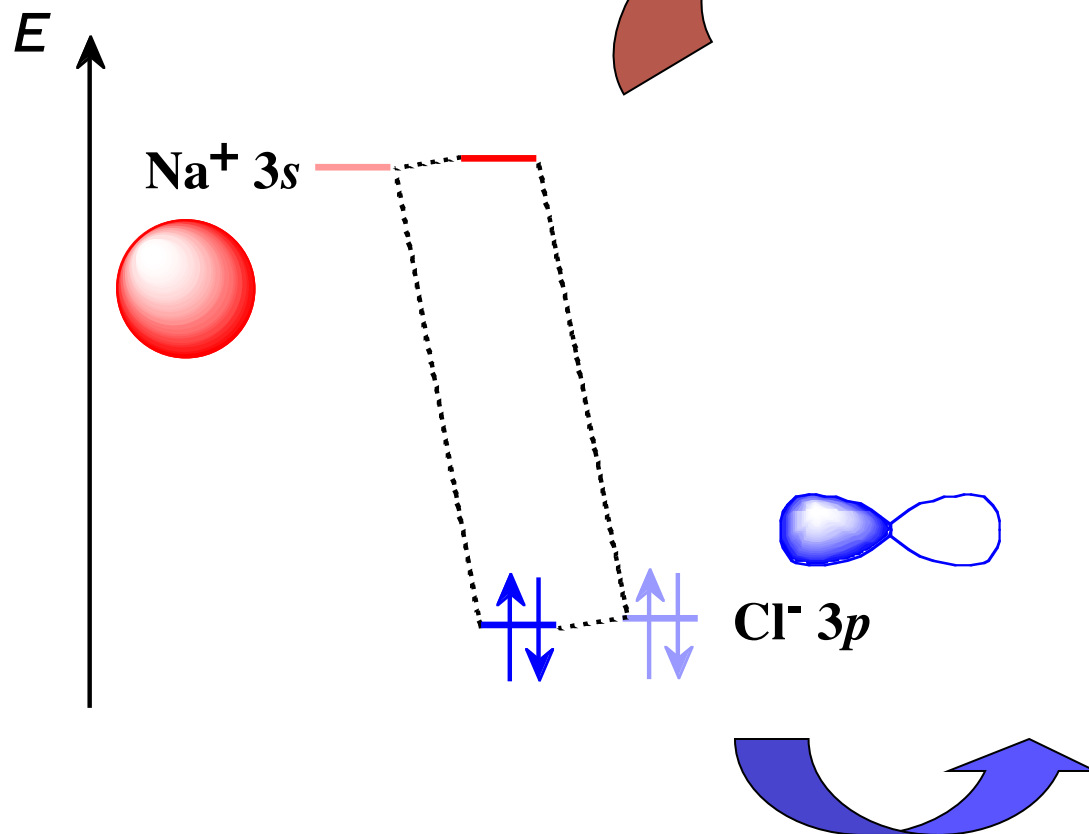
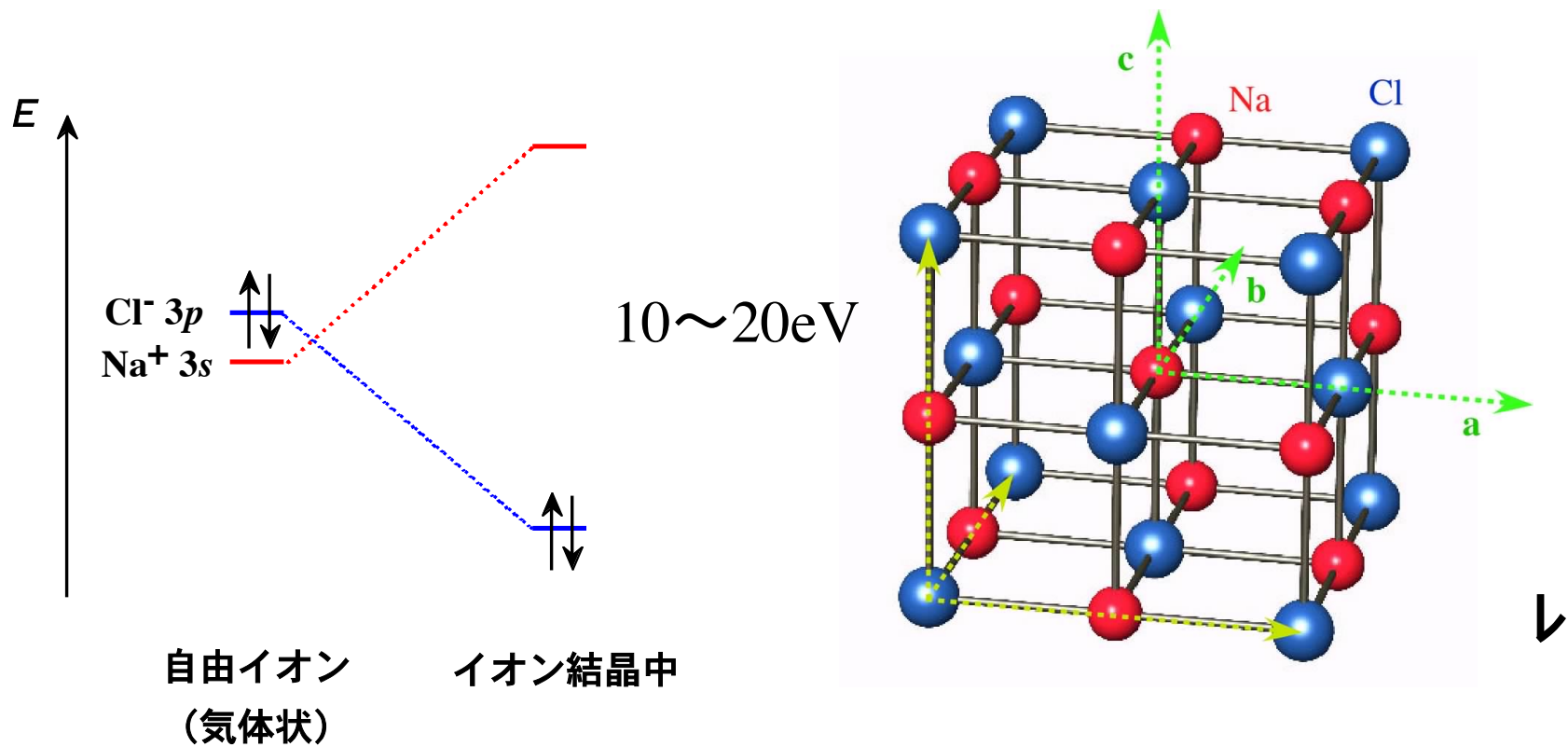


図 2・14 水素からナトリウムまでの軌道エネルギーの相対値。実線は一電子軌道エネルギーを示す。点線は実測されたイオン化エネルギーを示す。後者は電子-電子の相互作用のため実線で示されたものと異なっている

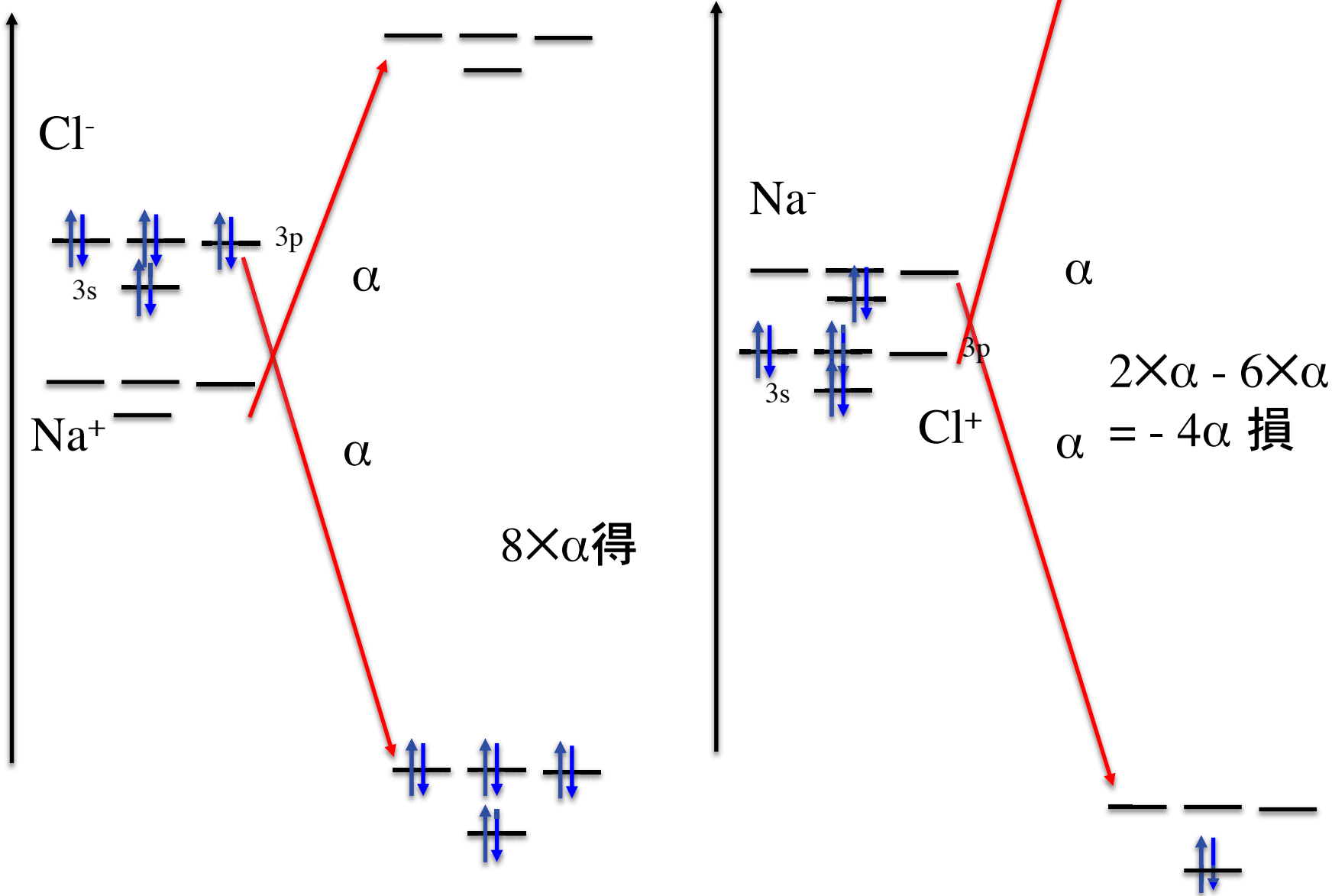
イオン結合：
静電相互作用（クーロン相互作用）



イオン結合：
静電相互作用（クーロン相互作用）



イオン結合：
静電相互作用（クーロン相互作用）



電子の位置エネルギーを支配する要因

1. 電子が感じるプラスの有効核電荷
(原子核に陽子が何個いるか、邪魔する電子の数)
2. 隣の原子からのプラスの有効核電荷(共有結合、金属結合)
3. マーデルングポテンシャル(+、-) (静電ポテンシャル: イオン結合)
4. 人為的に電場(電位)をかける。電子デバイス、FET

電荷移動相互作用(charge-transfer interaction)とは？

電荷移動錯体(charge-transfer complex; CT complex)

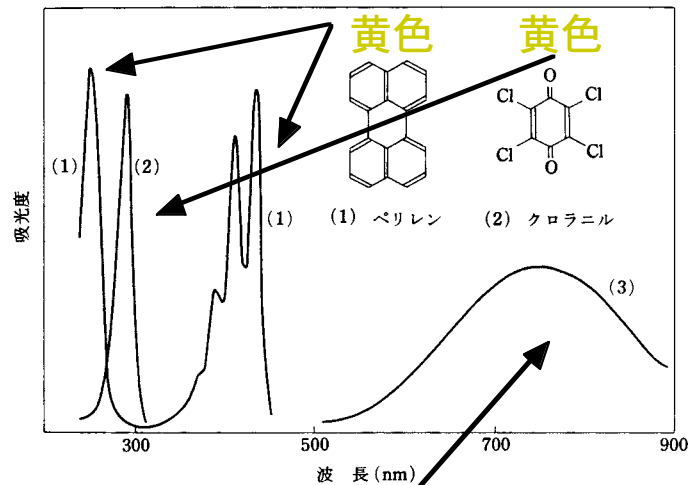


図 3.24 (1) ペリレン, (2) クロラニル, (3) ペリレンとクロラニルの1:1混合物の溶液(溶媒はいずれもクロロホルム)の吸収スペクトル。縦軸の吸光度は吸収ピークの形状を明確にするため任意スケールにしてある。とくに、(3)は吸光係数が小さいので、ほかのものにくらべ、数十倍に拡大して描いてある。

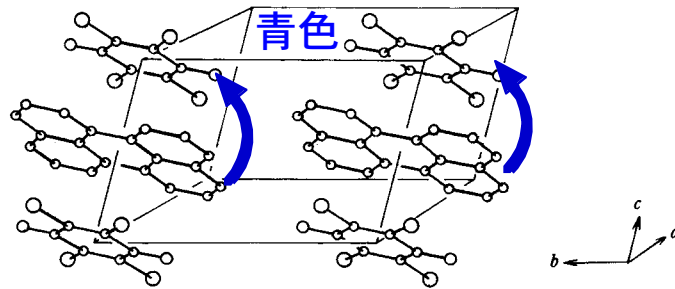
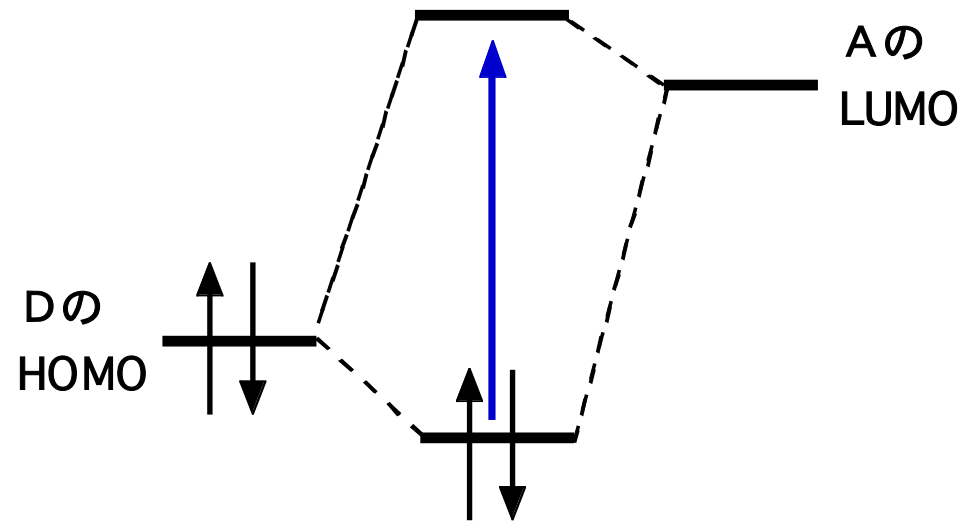


図 3.25 ペリレン-クロラニル錯体(三斜晶系)の結晶構造。
c 軸(成長軸)方向にペリレン分子とクロラニル分子が交互に積み重なっている。

ドナー (D) : 電子供与体 --- ペリレン
アクセプター (A) : 電子受容体 --- クロラニル



金属(metal)、半導体(semiconductor)、
絶縁体(insulator)とは？

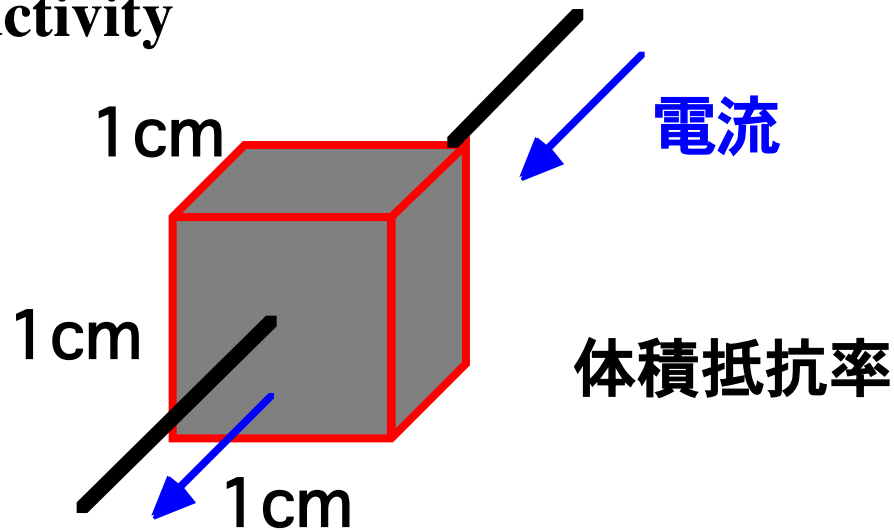
電気抵抗率： ρ ($\Omega \text{ cm}$) Electrical resistivity

電気伝導度： σ ($\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1} = \text{S cm}^{-1}$) = ρ^{-1}

Electrical conductivity

Electrical: 電気の(学術用語)

Electric: 電気の(一般用語)

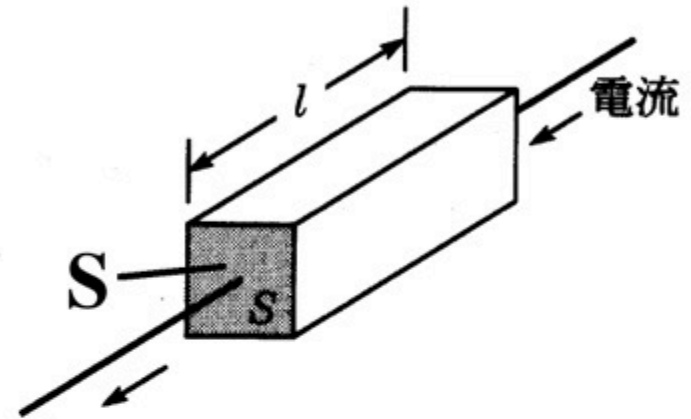
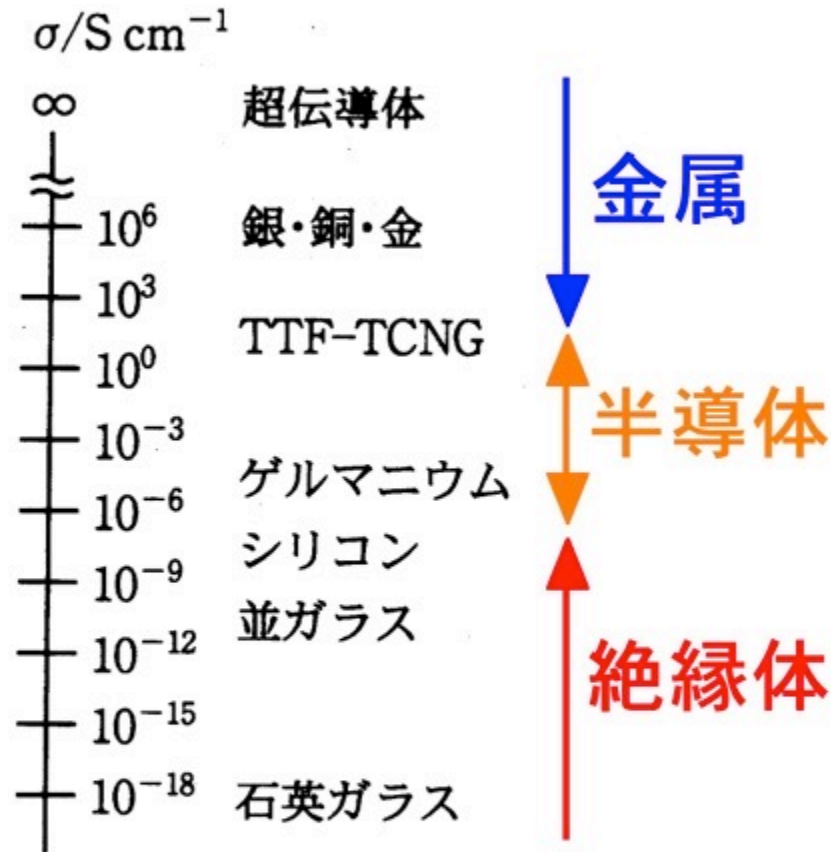


伝導体(conductor)、伝導性(conductivity)
学術用語

電導体、電導性、導電性
新聞とかの社会的用語

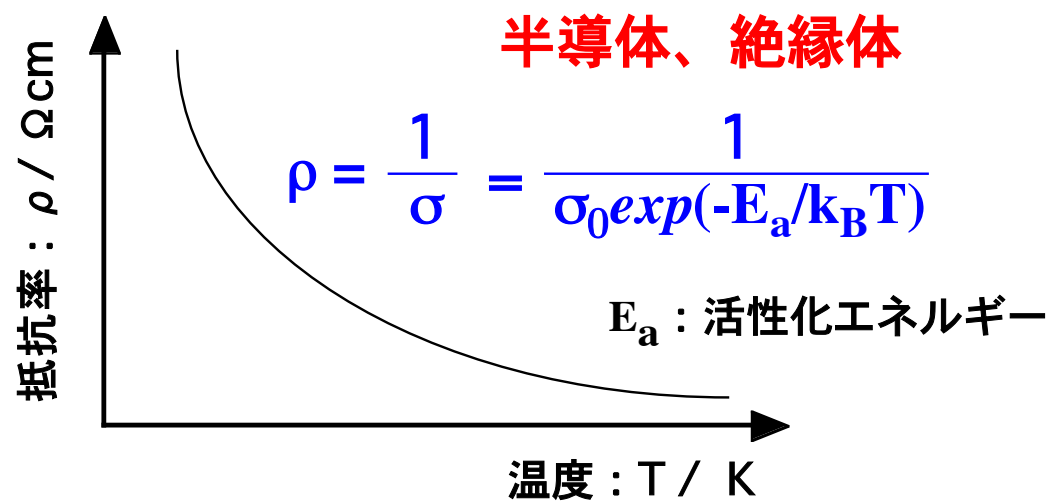
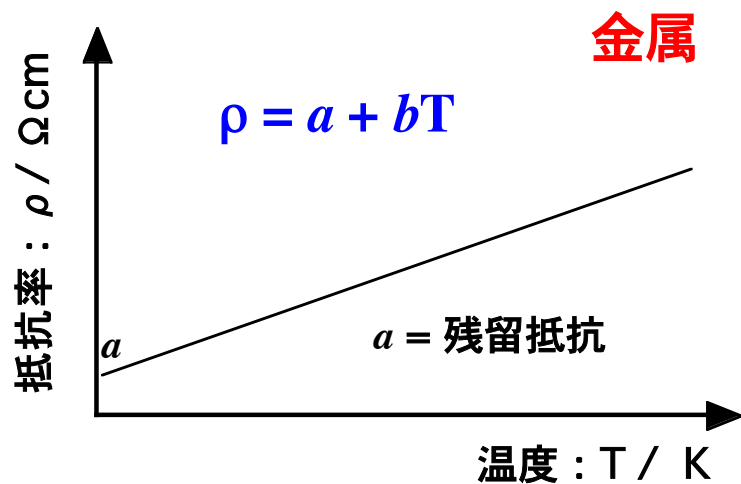
熱を運ぶのは、自由電子と格子振動(phonon)

抵抗(R): Resistance



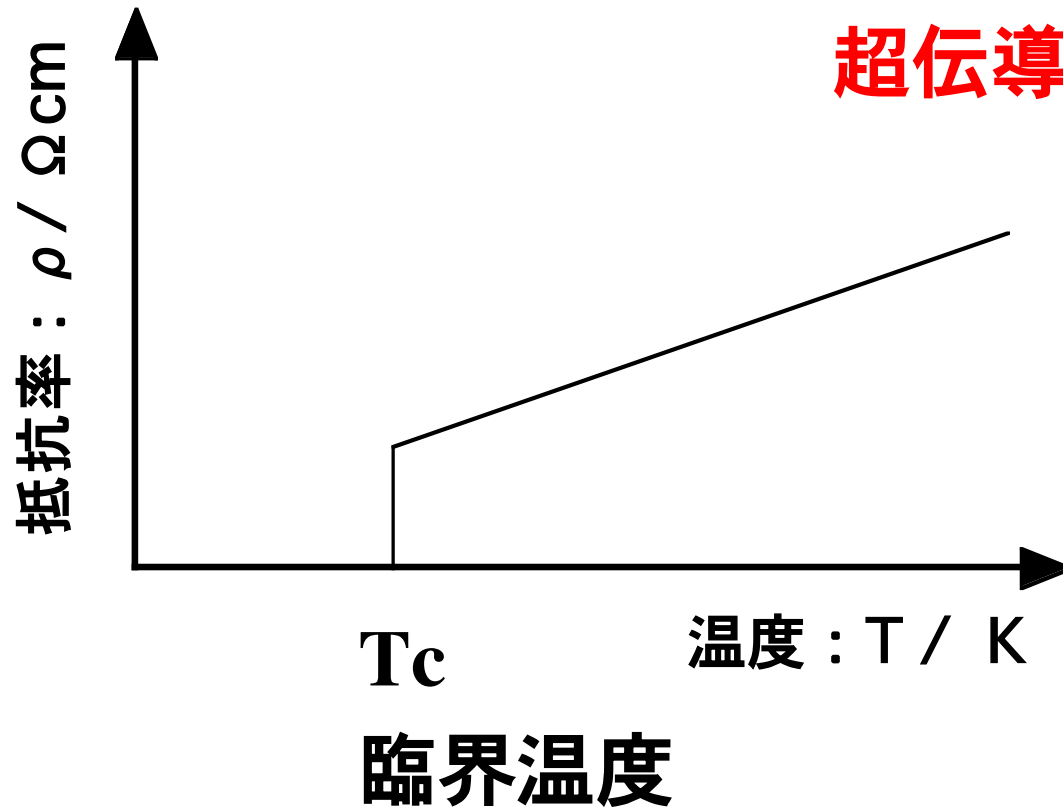
$$\rho = R \times \frac{S}{l}$$
$$= \frac{V}{I} \times \frac{S}{l}$$

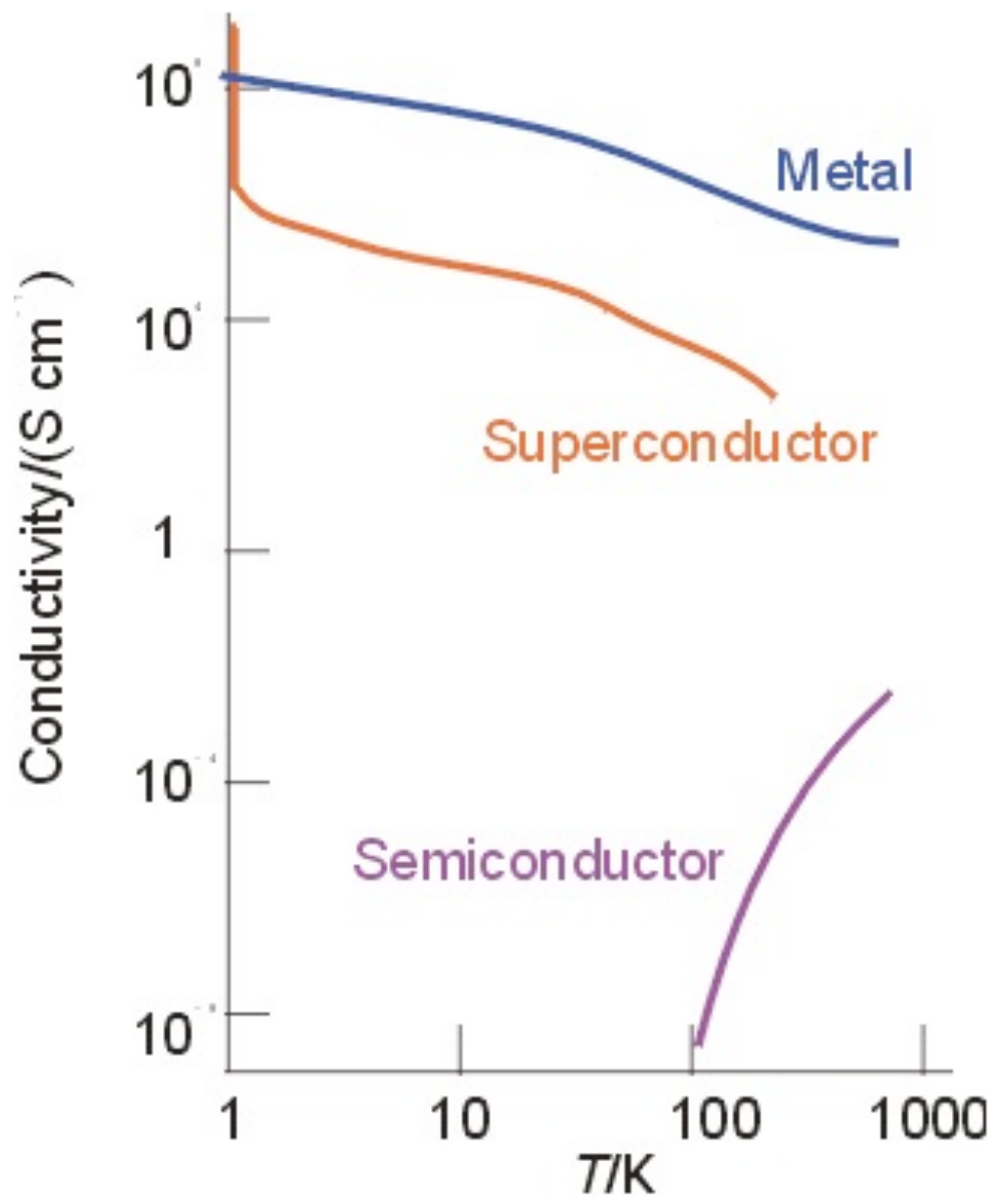
絶縁体 (insulator) ・電氣的絶縁体
・熱的絶縁体

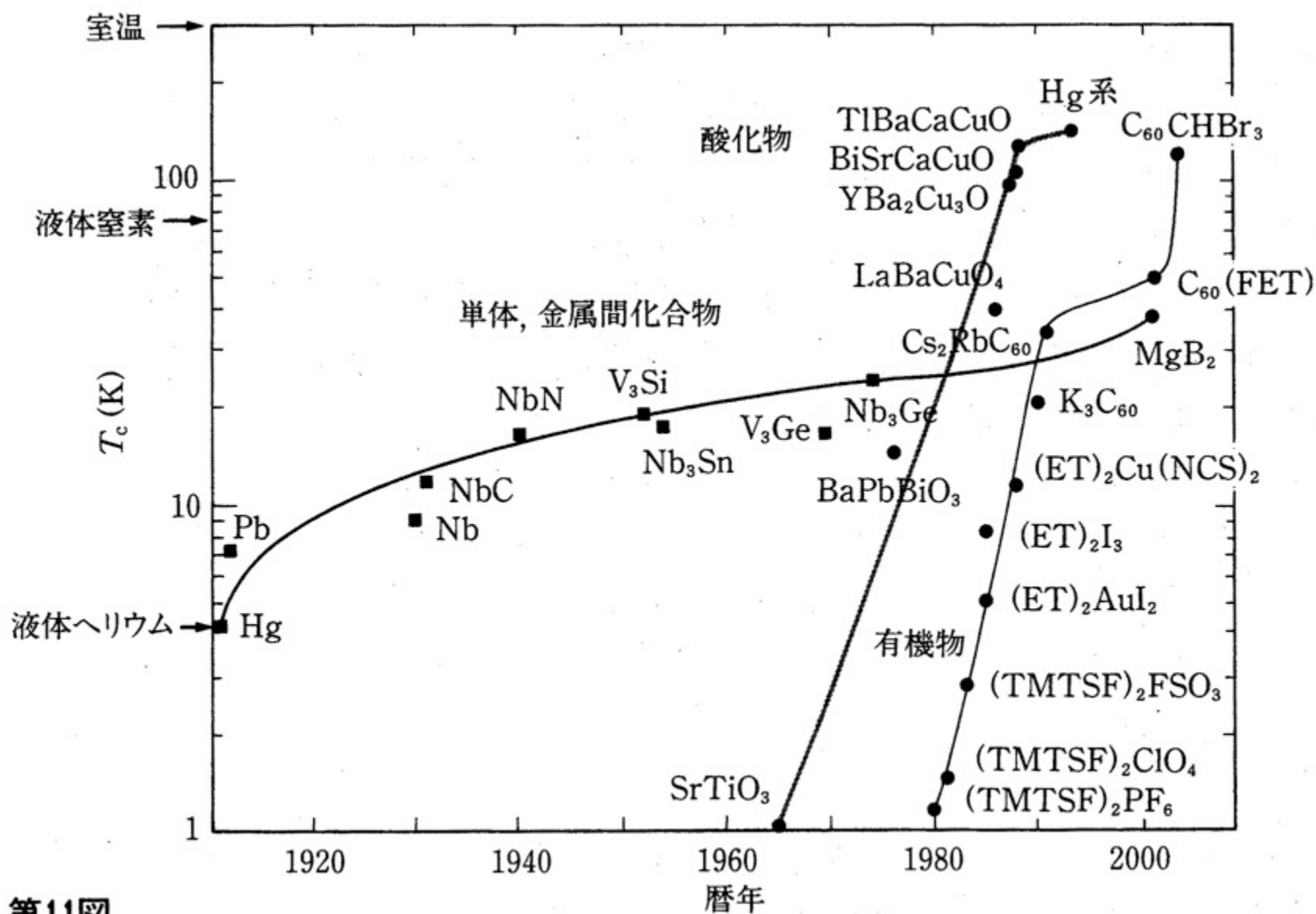


H_2S : 超高压下で、200 Kで超伝導

H_3S^+ : 室温超伝導体も発見されている
とんでもない超高压なので実用化は無理



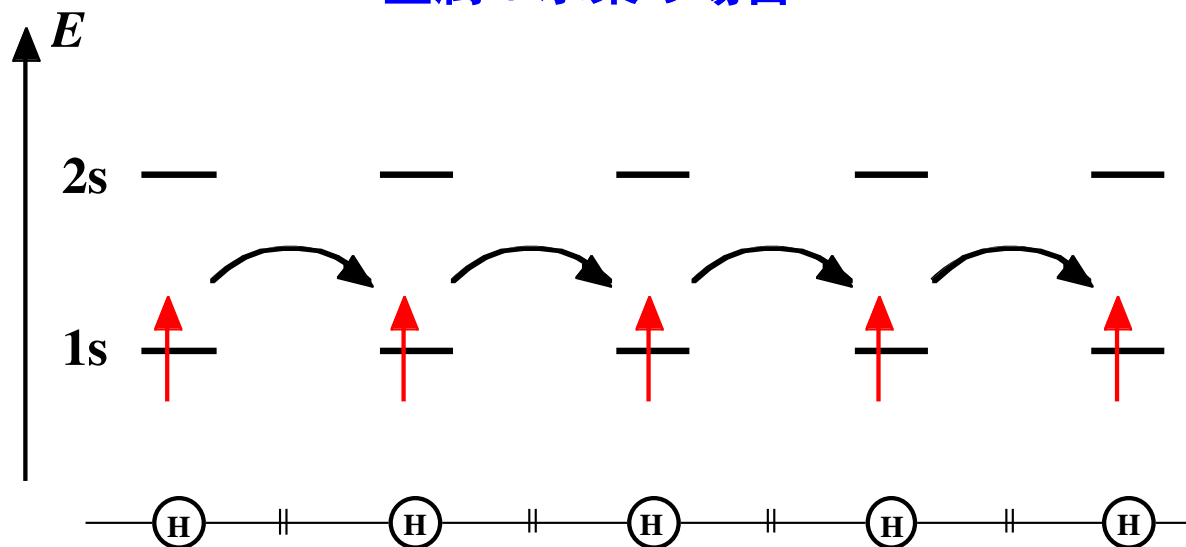




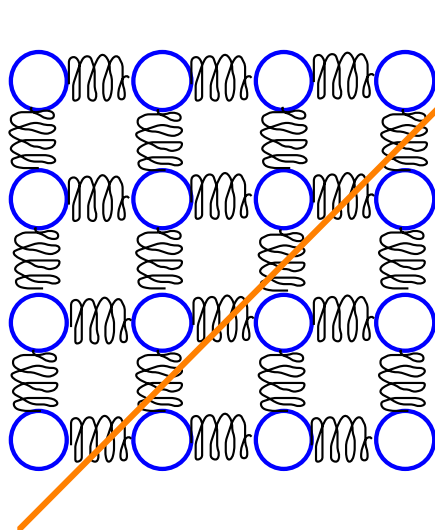
第11図

様々なカテゴリーの物質の超伝導転移温度が年(横軸)とともに上昇する様子。

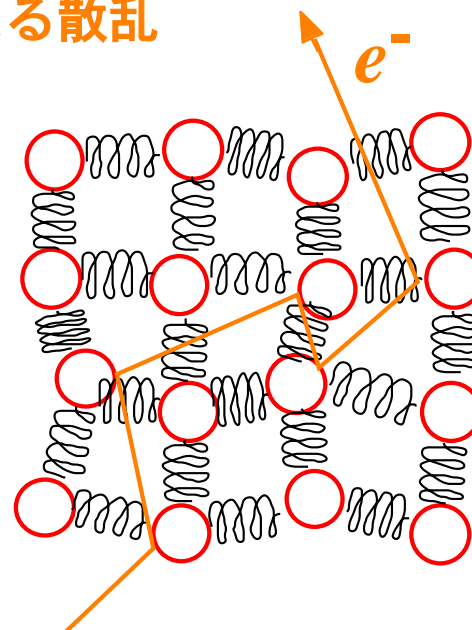
金属：水素の場合



格子振動による散乱

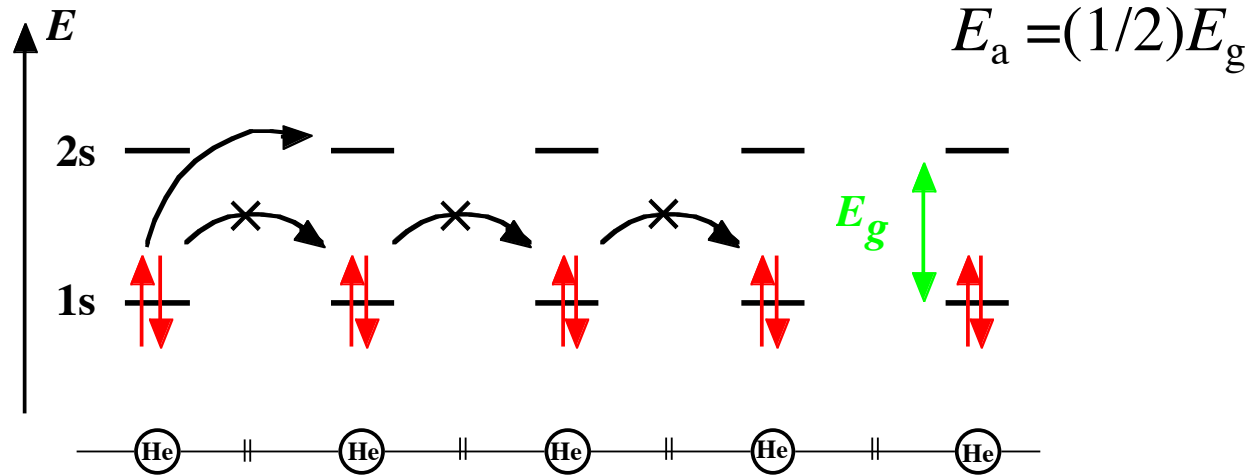


低温 小



高温 大

半導体：ヘリウムの場合



伝導度： $\sigma = n e \mu$

n ：キャリアー数

e ：電気素量

μ ：移動度

E_g の存在：熱活性型

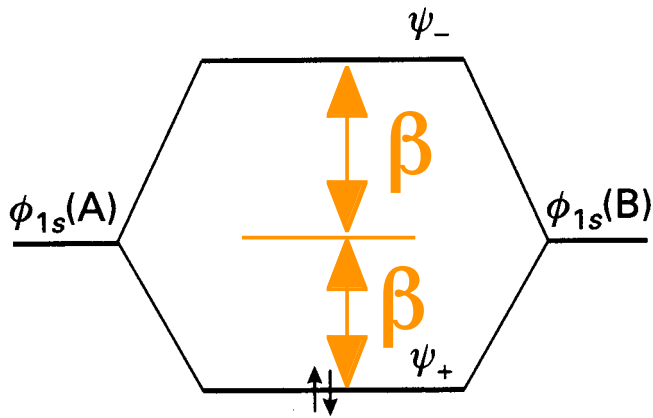
キャリアー数

低温：少

高温：多

バンドとは

(1) H_2

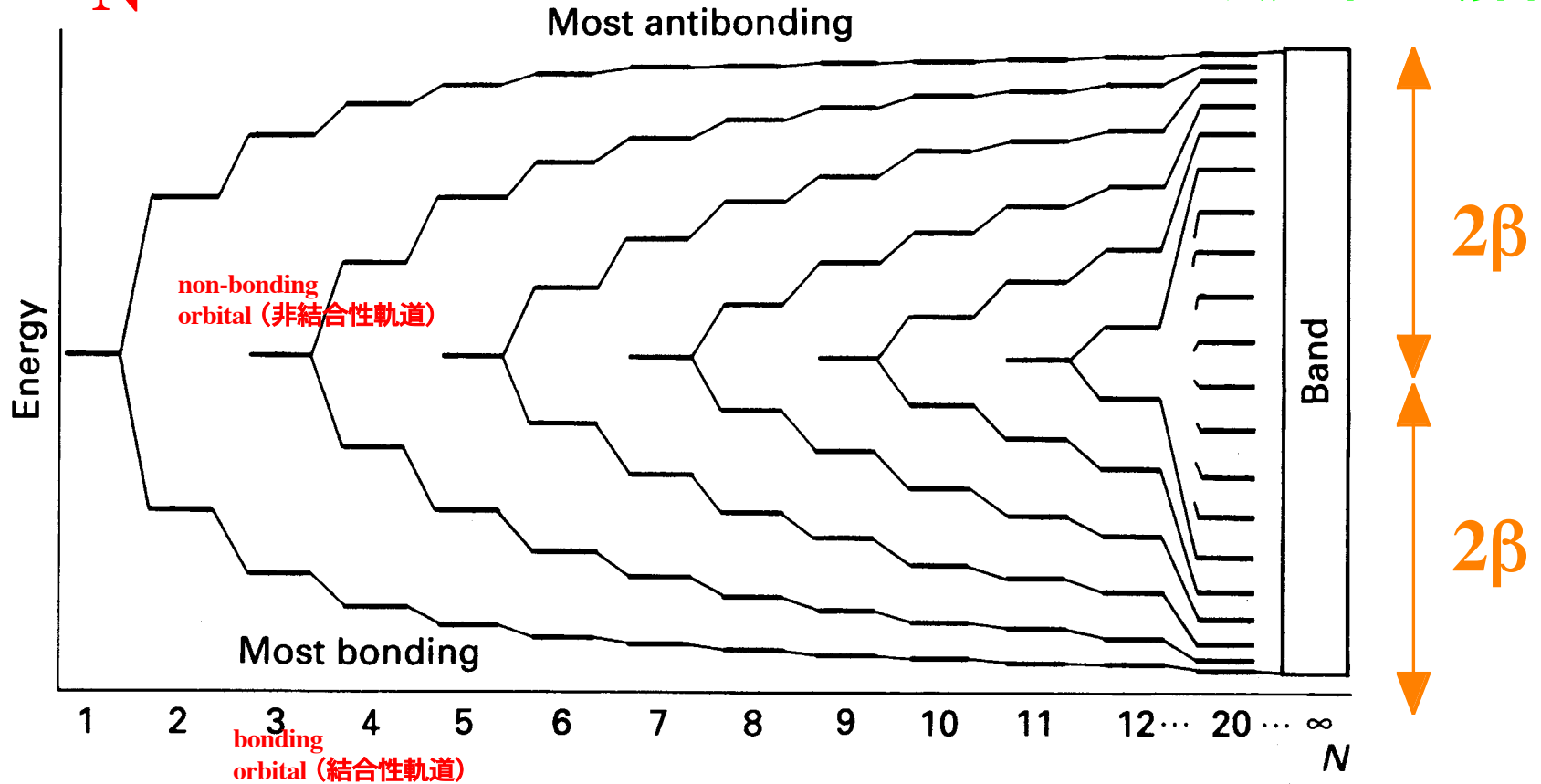


β : 相互作用(共鳴)積分

(2) H_N ($N=1 \sim \infty$)

antibonding
orbital (反結合性軌道)

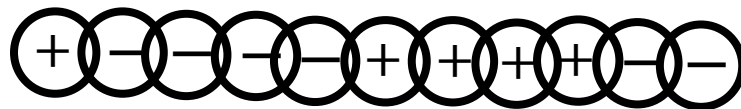
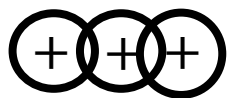
一次元系の場合



エネルギー帯

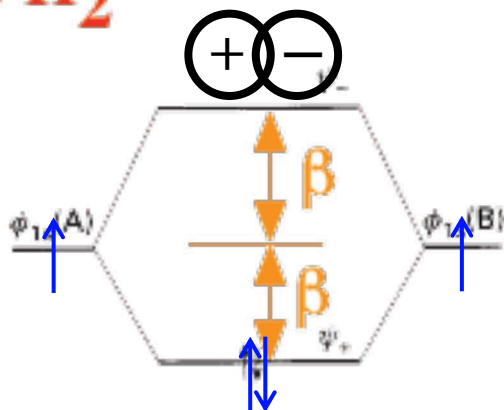
分子軌道と結晶軌道(バンド)

共有結合と金属結合の本質は同じ

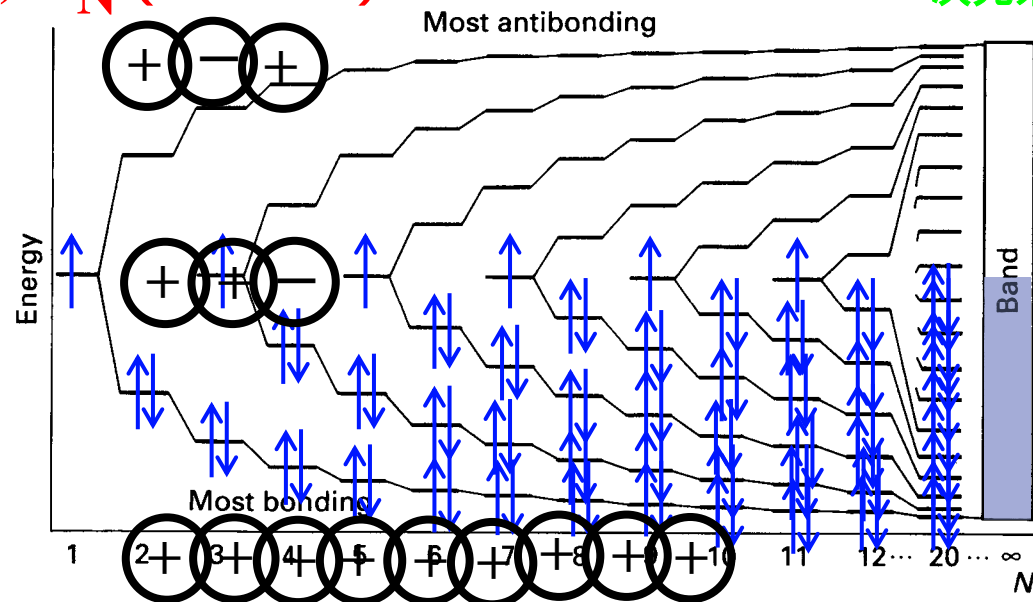


遍歴

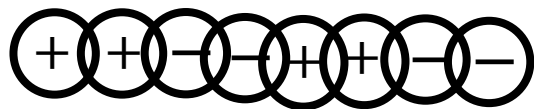
(1) H_2



(2) H_N ($N=1 \sim \infty$)

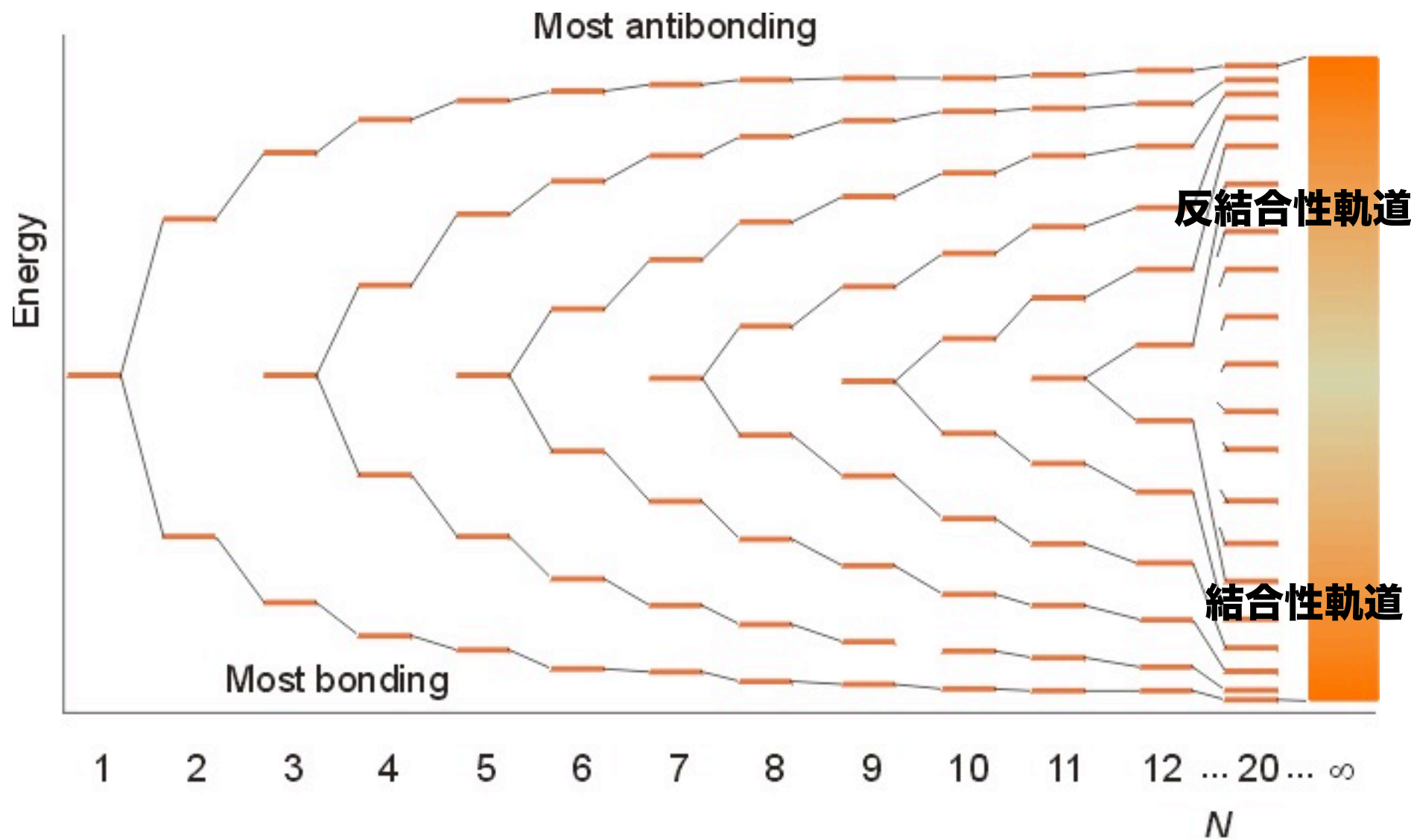


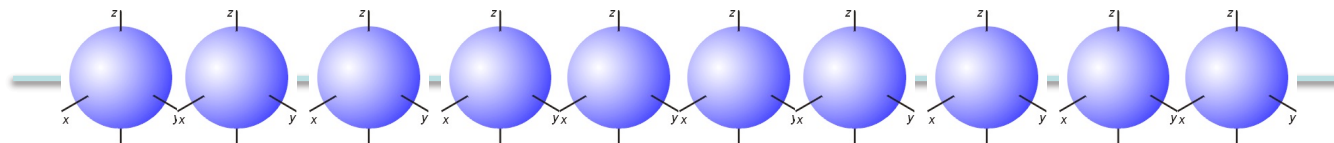
一次元系の場合



β : 共鳴積分 (= t : 移動積分)







Most antibonding



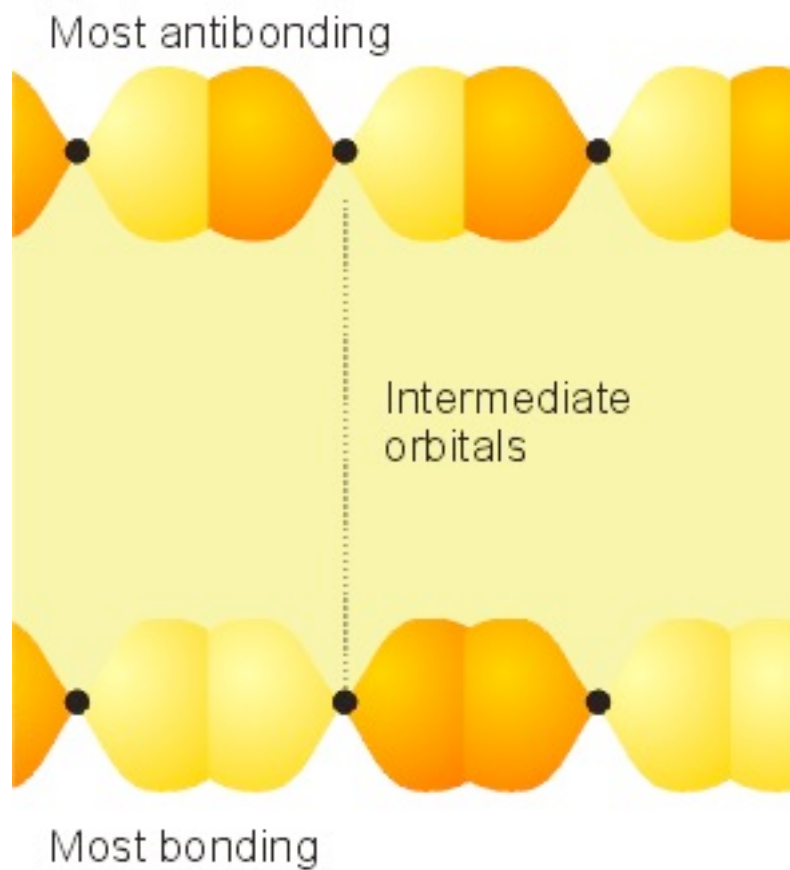
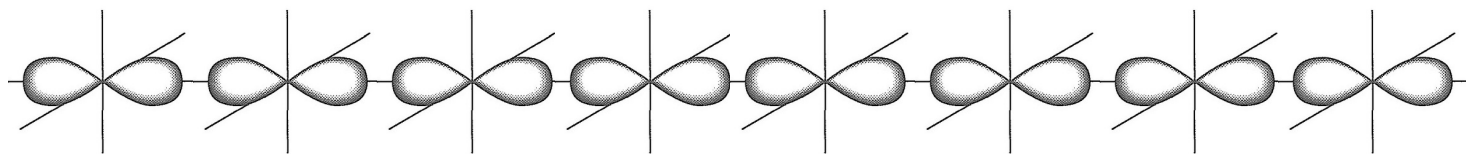
逆位相

Intermediate
orbitals



同位相

Most bonding

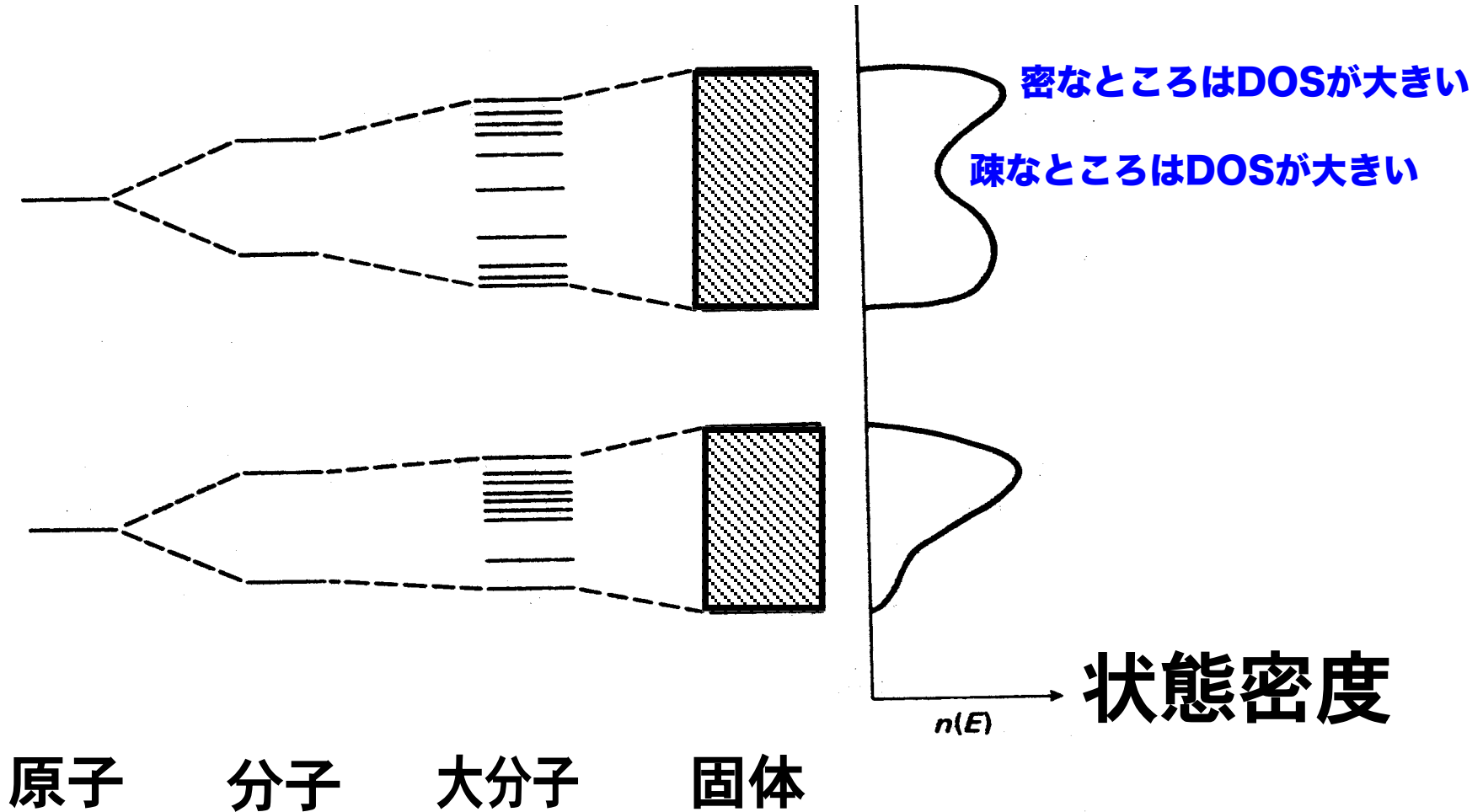


同位相 (足し算)

逆位相 (引き算)

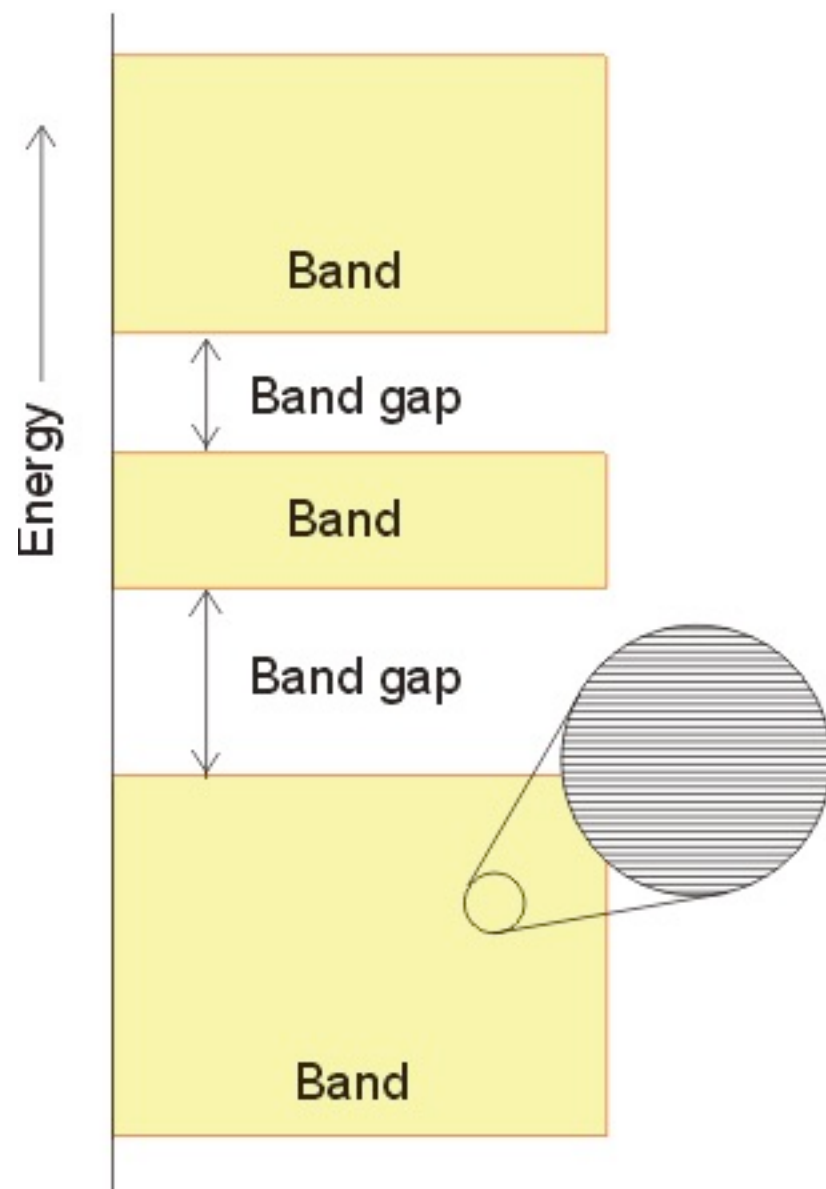
状態密度 : DOS (Density Of States)

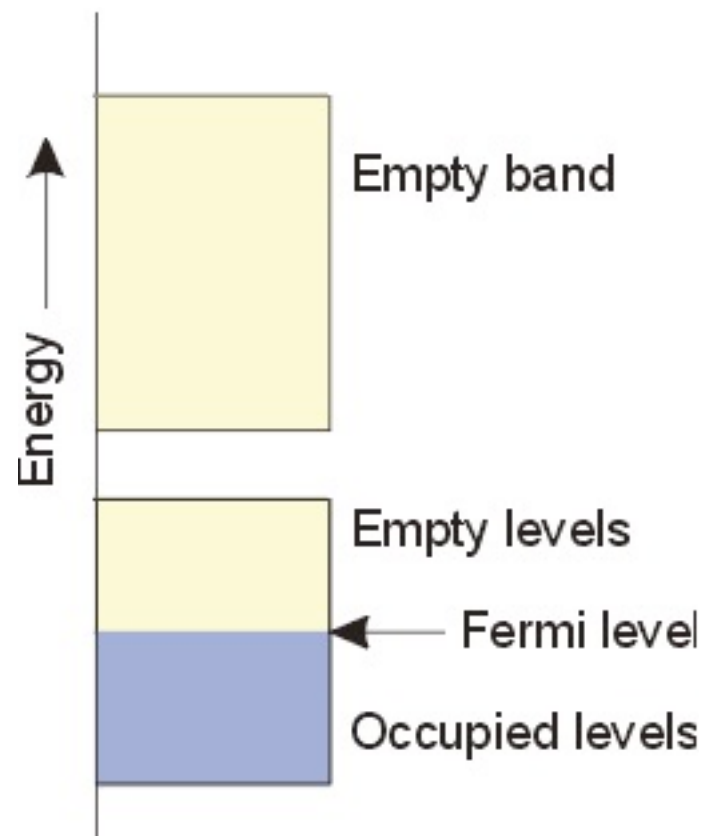
単位エネルギーあたりの状態数 (分子軌道の数)

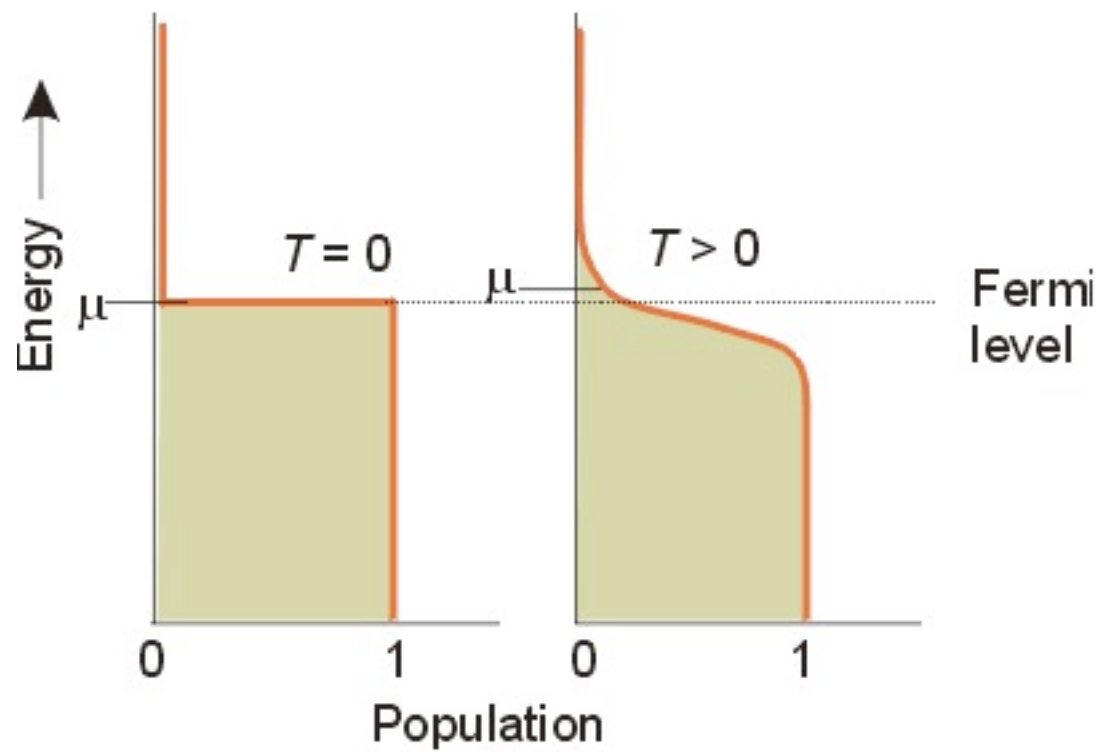


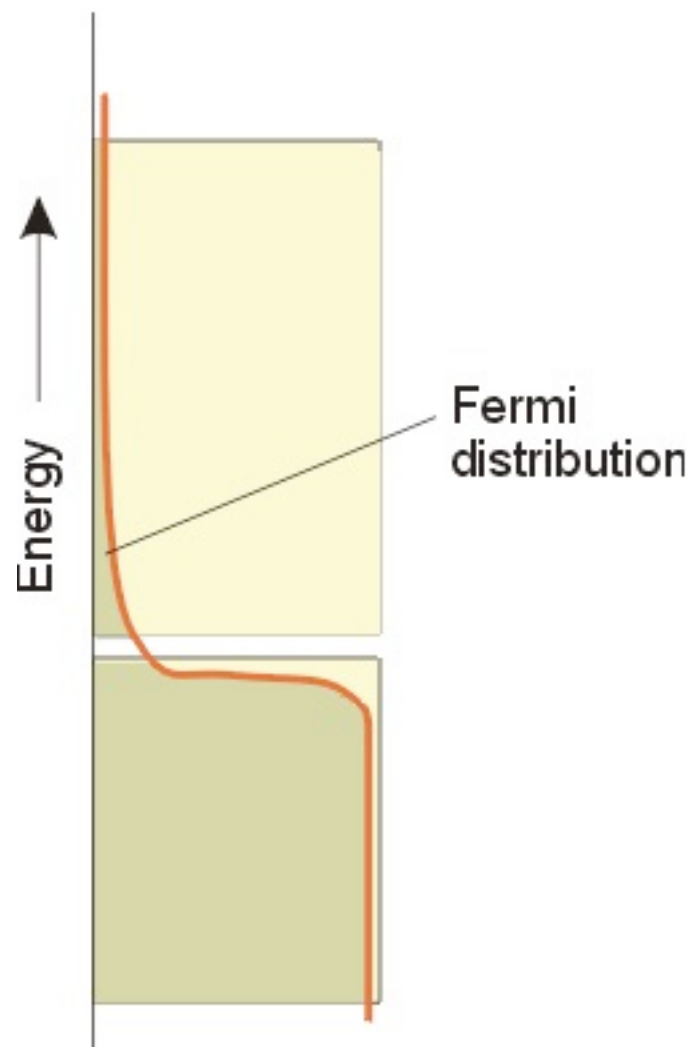
エネルギー帯（バンド）といえども、分子軌道（結晶軌道）の集まり

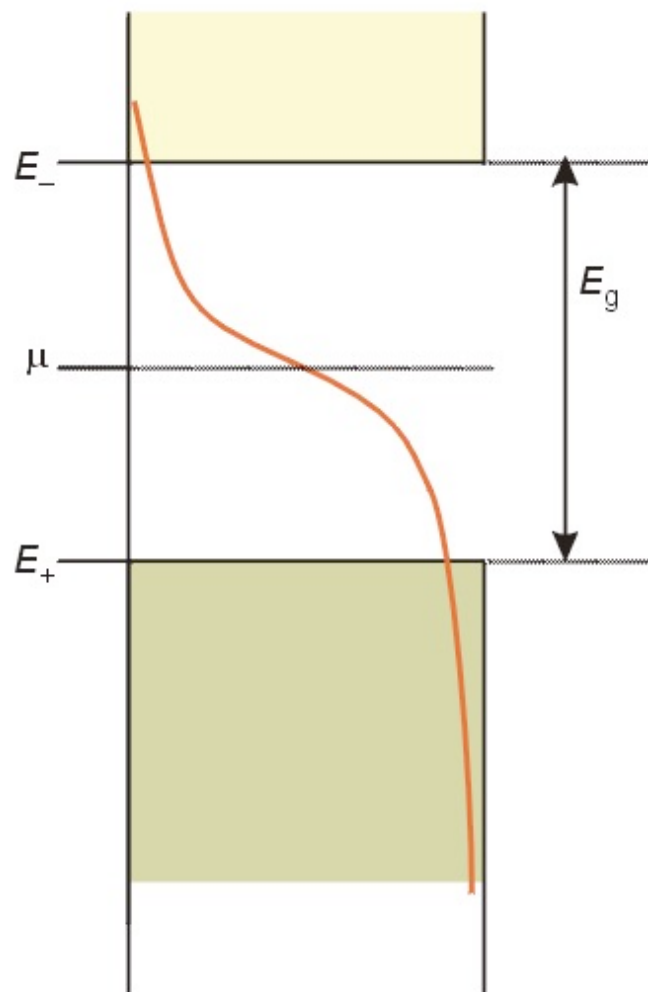




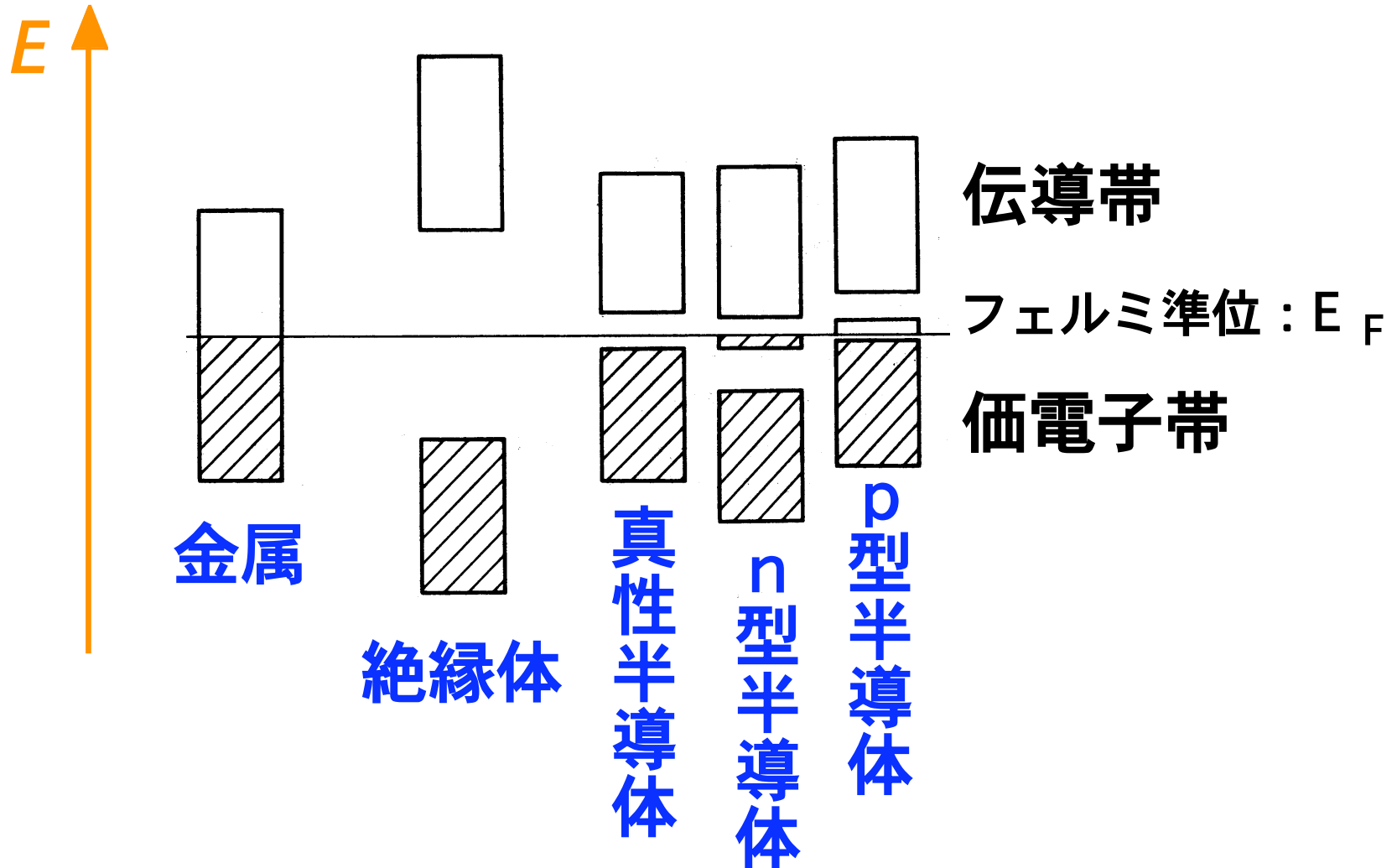




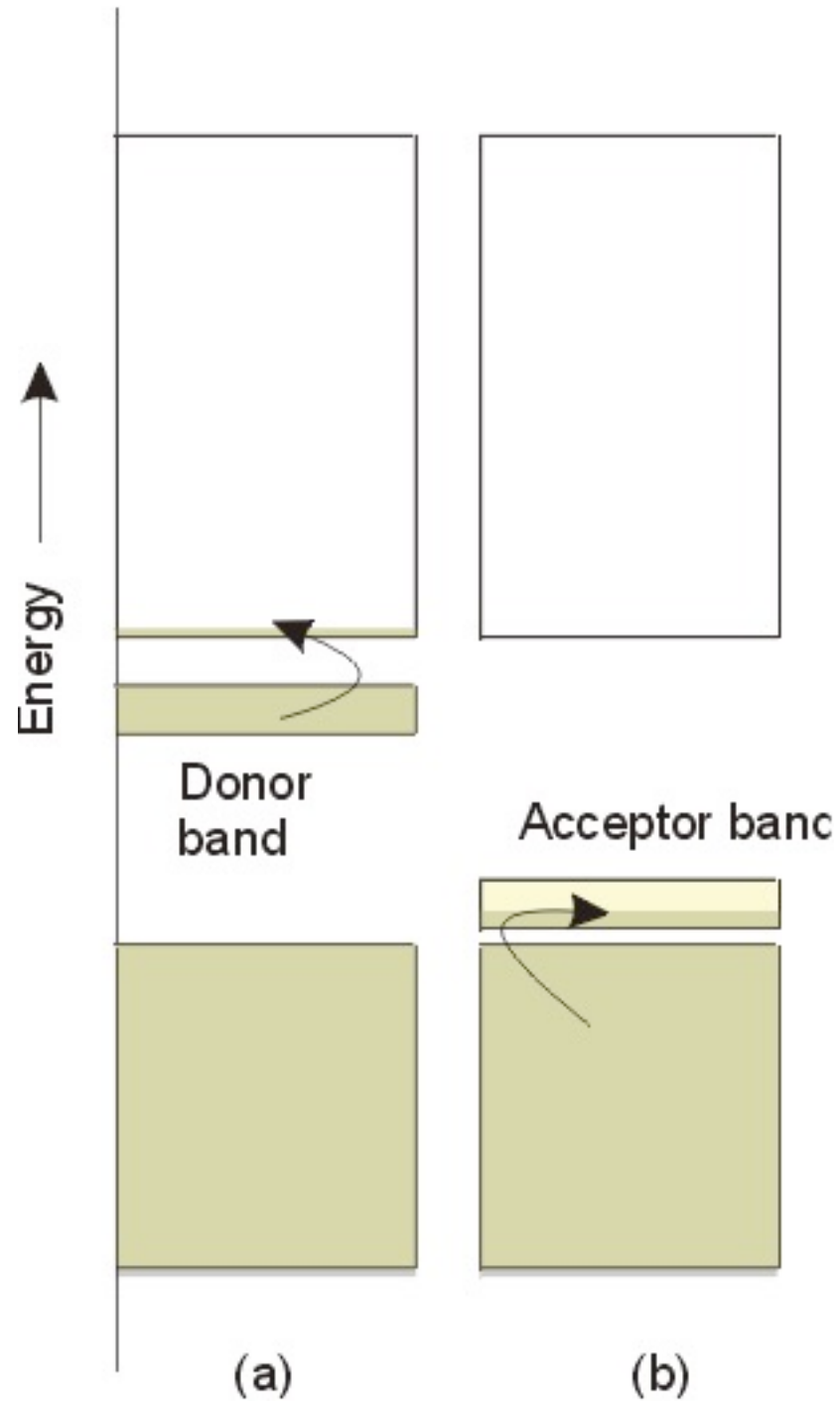




絶導体はギャップが大きい
 $C = 5.5 \text{ eV}$, $\text{AlN} = 6.3 \text{ eV}$



半導体は比較的ギャップが小さい
 $\text{Si} = 1.11 \text{ eV}$, $\text{Ge} = 0.67 \text{ eV}$

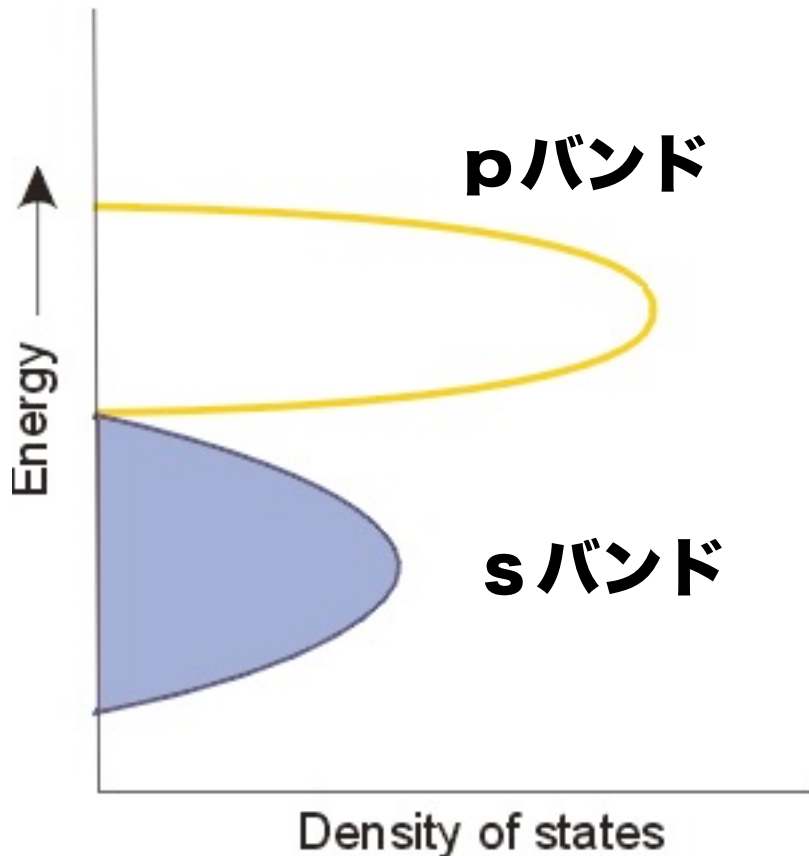


IUPAC Periodic Table of the Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H hydrogen 1.007 94(7)																	2 He helium 4.002 602(2)
3 Li lithium 6.941(2)	4 Be beryllium 9.012 162(3)											5 B boron 10.811(7)	6 C carbon 12.0107(8)	7 N nitrogen 14.0067(2)	8 O oxygen 15.9994(3)	9 F fluorine 18.998 4032(5)	10 Ne neon 20.1797(6)
11 Na sodium 22.989 770(2)	12 Mg magnesium 24.3050(6)											13 Al aluminium 26.981 538(2)	14 Si silicon 28.0855(3)	15 P phosphorus 30.973 761(2)	16 S sulfur 32.065(5)	17 Cl chlorine 35.453(2)	18 Ar argon 39.948(1)
19 K potassium 39.0983(1)	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.955 910(8)	22 Ti titanium 47.867(1)	23 V vanadium 50.9415(1)	24 Cr chromium 51.9961(6)	25 Mn manganese 54.938 049(9)	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 200(9)	28 Ni nickel 58.6934(2)	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.409(4)	31 Ga gallium 69.723(1)	32 Ge germanium 72.64(1)	33 As arsenic 74.921 60(2)	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.4678(3)	38 Sr strontium 87.62(1)	39 Y yttrium 88.905 85(2)	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 38(2)	42 Mo molybdenum 95.94(2)	43 Tc technetium [97.9072]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.905 50(2)	46 Pd palladium 106.42(1)	47 Ag silver 107.8682(2)	48 Cd cadmium 112.411(8)	49 In indium 114.818(3)	50 Sn tin 118.710(7)	51 Sb antimony 121.760(1)	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.904 47(3)	54 Xe xenon 131.293(6)
55 Cs caesium 132.905 45(2)	56 Ba barium 137.327(7)	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.9479(1)	74 W tungsten 183.84(1)	75 Re rhenium 186.207(1)	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.217(3)	78 Pt platinum 195.078(2)	79 Au gold 196.966 55(2)	80 Hg mercury 200.59(2)	81 Tl thallium 204.3833(2)	82 Pb lead 207.2(1)	83 Bi bismuth 208.980 38(2)	84 Po polonium [208.9824]	85 At astatine [209.9871]	86 Rn radon [222.0176]
87 Fr francium [223.0197]	88 Ra radium [226.0254]	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium [261.1088]	105 Db dubnium [262.1141]	106 Sg seaborgium [266.1219]	107 Bh bohrium [264.12]	108 Hs hassium [277]	109 Mt meitnerium [268.1388]	110 Ds darmstadtium [269]	111 Uuu unununium [272]	112 Uub ununbium [285]	114 Uuq ununquadium [289]		116 Uuh ununhexium [289]			
			57 La lanthanum 138.9055(2)	58 Ce cerium 140.116(1)	59 Pr praseodymium 140.907 85(2)	60 Nd neodymium 144.24(3)	61 Pm promethium [144.9127]	62 Sm samarium 150.36(3)	63 Eu europium 151.964(1)	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.925 34(2)	66 Dy dysprosium 162.500(1)	67 Ho holmium 164.930 32(2)	68 Er erbium 167.259(3)	69 Tm thulium 168.934 21(2)	70 Yb ytterbium 173.04(3)	71 Lu lutetium 174.967(1)
			89 Ac actinium [227.0277]	90 Th thorium 232.0381(1)	91 Pa protactinium 231.035 88(2)	92 U uranium 238.028 91(3)	93 Np neptunium [237.0482]	94 Pu plutonium [244.0642]	95 Am americium [243.0614]	96 Cm curium [247.0704]	97 Bk berkelium [247.0703]	98 Cf californium [251.0796]	99 Es einsteinium [252.0830]	100 Fm fermium [257.0951]	101 Md mendelevium [258.0984]	102 No nobelium [259.1010]	103 Lr lawrencium [262.1097]

Notes

- IUPAC alternative names or spelling exist for the elements aluminium (aluminum) and caesium (cesium) and, in special circumstances, sodium (natrium), potassium (kalium), iron (ferrum), copper (cuprum), silver (argentum), tin (stannum), antimony (stibium), tungsten (wolfram), gold (aurum), mercury (hydrargyrum), and lead (plumbum).
- Relative atomic masses ('atomic weights') of elements with no IUPAC assigned standard values are listed between square brackets. IUPAC 2001 standard values are given for other elements, with uncertainties in the last figure in parentheses [R. Loss, Pure Appl. Chem. 75, 1107-1122 (2003)].
- Element with atomic number 111 has not yet been named. The IUPAC provisional name is shown.
- Claims for the existence of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have not been recognized by IUPAC as of August 2003.



pバンド

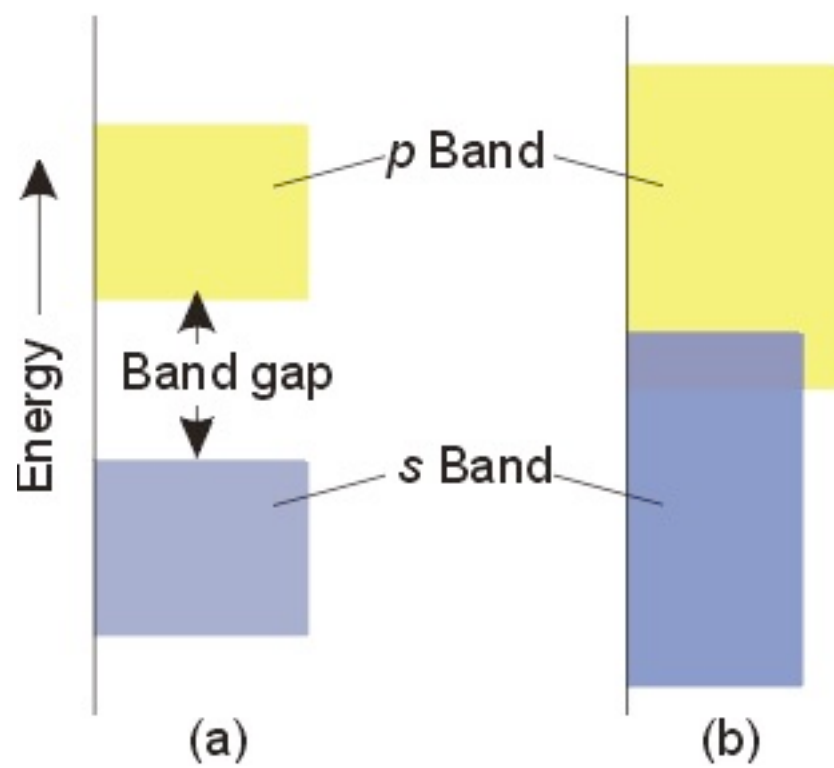
sバンド

sバンドとpバンドは通常重なるので
アルカリ土類金属も金属伝導性を示す

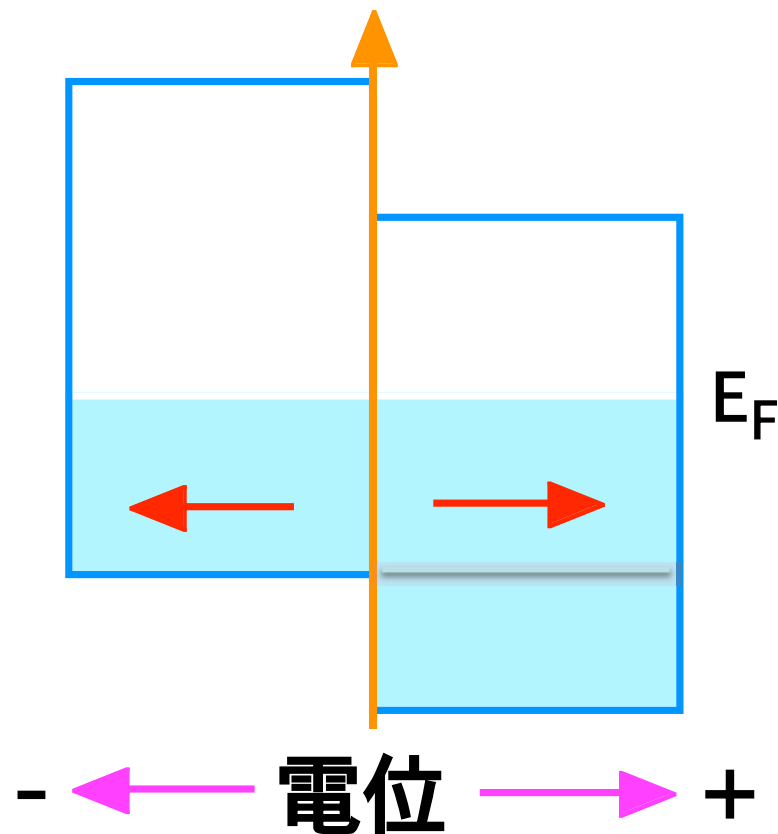
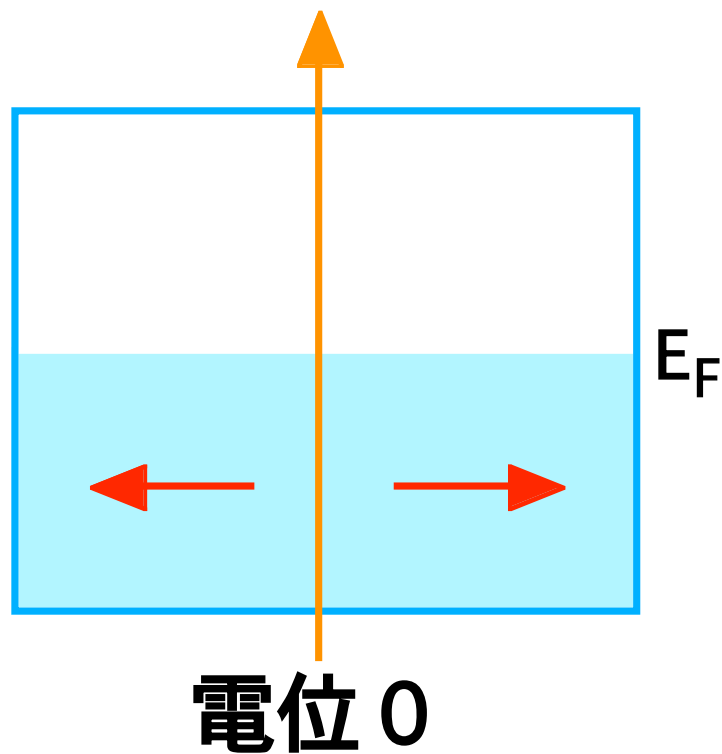
IUPAC Periodic Table of the Elements

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1 H hydrogen (1.007 84(7))																	2 He helium (4.002 602(2))	
3 Li lithium (6.94(12))	4 Be beryllium (9.012 183(2))											5 B boron (10.81(1))	6 C carbon (12.010(7))	7 N nitrogen (14.006(4))	8 O oxygen (15.999 4(3))	9 F fluorine (18.998 4(3))	10 Ne neon (20.179(7))	
11 Na sodium (22.989 7(2))	12 Mg magnesium (24.304(6))											13 Al aluminum (26.981 538(6))	14 Si silicon (28.085(3))	15 P phosphorus (30.973 761(2))	16 S sulfur (32.06(5))	17 Cl chlorine (35.45(2))	18 Ar argon (39.948(1))	
19 K potassium (39.098(1))	20 Ca calcium (40.078(4))	21 Sc scandium (44.955 908(6))	22 Ti titanium (47.88(7))	23 V vanadium (50.941(5))	24 Cr chromium (51.996(1))	25 Mn manganese (54.938 044(3))	26 Fe iron (55.845(2))	27 Co cobalt (58.933 194(9))	28 Ni nickel (58.69(3))	29 Cu copper (63.546(3))	30 Zn zinc (65.408(4))	31 Ga gallium (69.723(1))	32 Ge germanium (72.64(1))	33 As arsenic (74.921 60(3))	34 Se selenium (78.96(2))	35 Br bromine (79.904(1))	36 Kr krypton (83.798(2))	
37 Rb rubidium (85.467(8))	38 Sr strontium (87.62(1))	39 Y yttrium (88.905 84(2))	40 Zr zirconium (91.224(2))	41 Nb niobium (92.906 38(3))	42 Mo molybdenum (95.94(2))	43 Tc technetium (97.907(2))	44 Ru ruthenium (101.07(2))	45 Rh rhodium (102.905 50(2))	46 Pd palladium (106.42(1))	47 Ag silver (107.868(2))	48 Cd cadmium (112.411(8))	49 In indium (114.818(1))	50 Sn tin (118.710(7))	51 Sb antimony (121.757(1))	52 Te tellurium (127.6(3))	53 I iodine (126.904 47(3))	54 Xe xenon (131.29(8))	
55 Cs caesium (132.905 45(3))	56 Ba barium (137.327(7))	lanthanoids		72 Hf hafnium (178.49(3))	73 Ta tantalum (180.947(8))	74 W tungsten (183.84(1))	75 Re rhenium (186.207(1))	76 Os osmium (190.23(3))	77 Ir iridium (192.22(7))	78 Pt platinum (195.078(2))	79 Au gold (196.966 569(5))	80 Hg mercury (200.59(2))	81 Tl thallium (204.383(3))	82 Pb lead (207.2(1))	83 Bi bismuth (208.980 38(2))	84 Po polonium (209)	85 At astatine (209)	86 Rn radon (222)
87 Fr francium (223)	88 Ra radium (226)	actinoids		104 Rf rutherfordium (261)	105 Db dubnium (262)	106 Sg seaborgium (266)	107 Bh bohrium (264)	108 Hs hassium (277)	109 Mt meitnerium (268)	110 Ds darmstadtium (271)	111 Uu ununium (272)	112 Uub ununbium (285)	113 Uuq ununquadium (289)	114 Uuh ununhexium (289)	116 Uuh ununhexium (289)	118 Uuo ununoctium (294)	120 Uuq ununquadium (294)	122 Uuo ununoctium (294)
57 La lanthanum (138.905(2))	58 Ce cerium (140.12(1))	59 Pr praseodymium (140.907 65(2))	60 Nd neodymium (144.24(2))	61 Pm promethium (144.912(7))	62 Sm samarium (150.36(1))	63 Eu europium (151.964(1))	64 Gd gadolinium (157.25(3))	65 Tb terbium (158.925 34(2))	66 Dy dysprosium (162.500(1))	67 Ho holmium (164.930 32(2))	68 Er erbium (167.259(2))	69 Tm thulium (168.934 21(2))	70 Yb ytterbium (173.04(3))	71 Lu lutetium (174.967(1))				
89 Ac actinium (227)	90 Th thorium (232)	91 Pa protactinium (231)	92 U uranium (238)	93 Np neptunium (237)	94 Pu plutonium (244)	95 Am americium (243)	96 Cm curium (247)	97 Bk berkelium (247)	98 Cf californium (251)	99 Es einsteinium (252)	100 Fm fermium (257)	101 Md mendelevium (258)	102 No nobelium (259)	103 Lr lawrencium (262)				

Notes
 - IUPAC alternative names or spelling exist for the elements aluminum (aluminium) and caesium (cesium) and, in special circumstances, sodium (natrium), potassium (kalium), iron (ferrum), copper (cuprum), silver (argentum), tin (stannum), antimony (stibium), tungsten (wolfram), gold (aurum), mercury (hydrargyrum), and lead (plumbum).
 - Relative atomic masses (atomic weights) of elements with no IUPAC assigned standard values are listed between square brackets. IUPAC 2001 standard values are given for other elements, with uncertainties in the last figure in parentheses (R. Lide, Pure Appl. Chem. 75, 1107-1122 (2003)).
 - Element with atomic number 111 has not yet been named. The IUPAC provisional name is shown.
 - Claims for the existence of elements with atomic numbers 112, 114, and 116 have not been recognized by IUPAC as of August 2003.



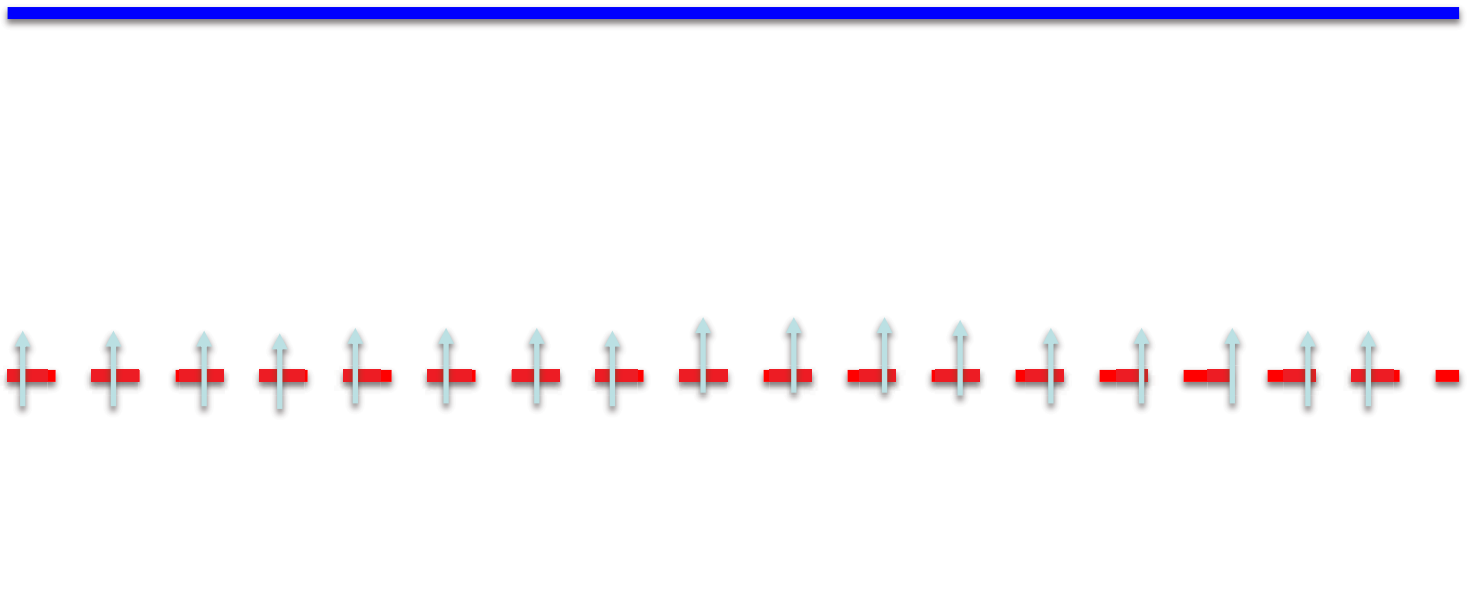
(1) 金属の場合



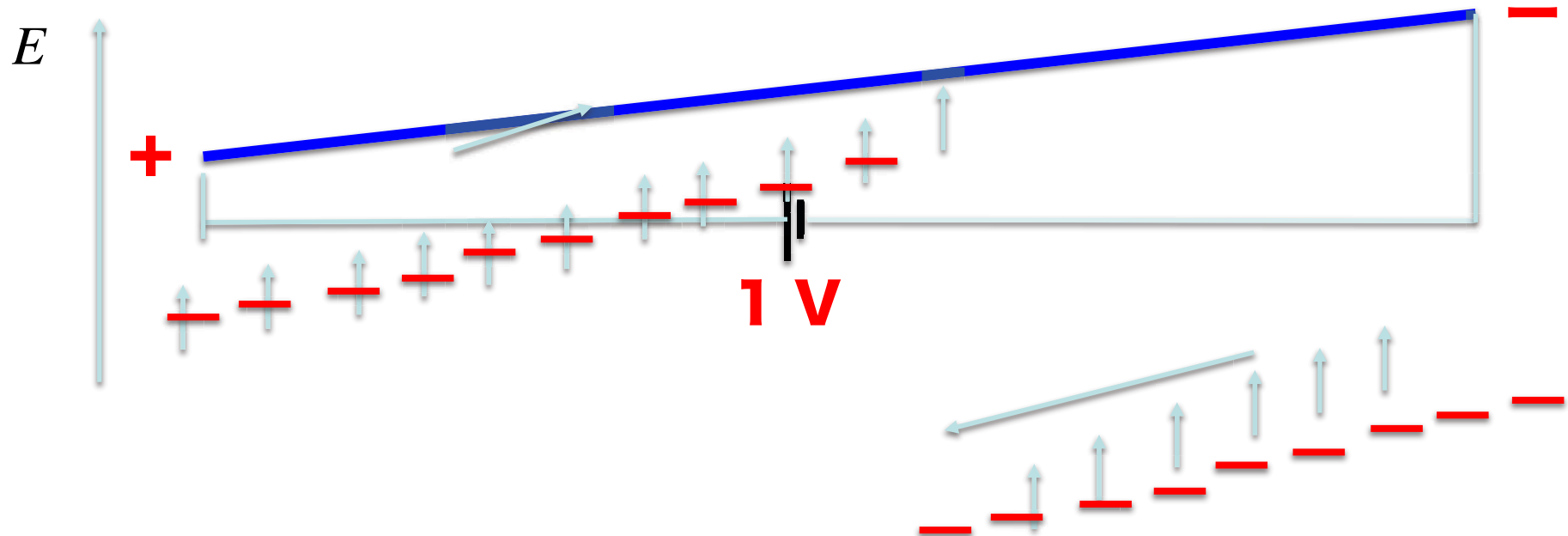
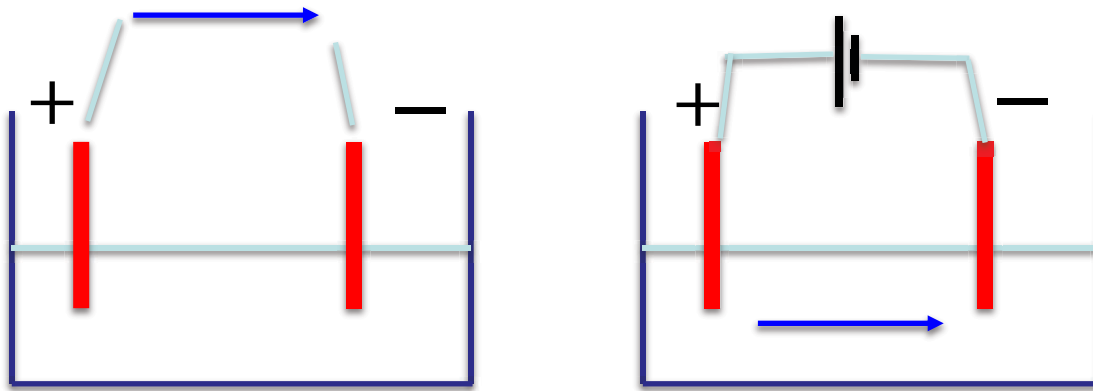
電位をかけるということとは？

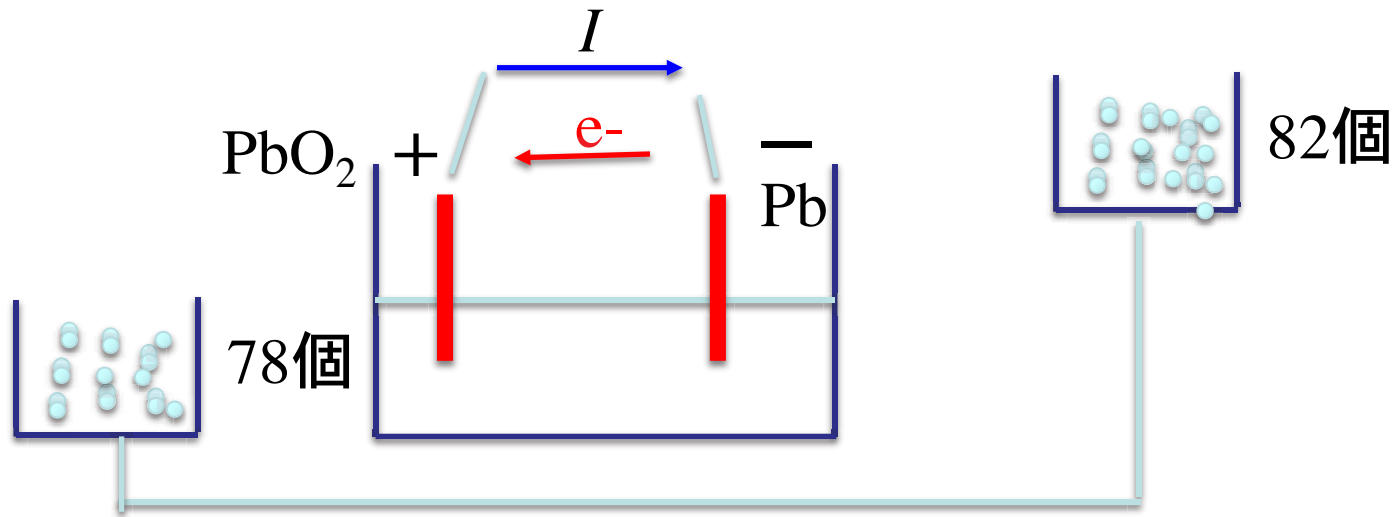
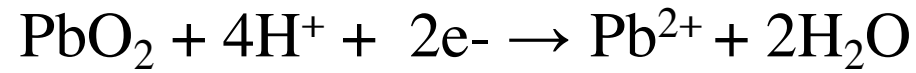
0 V

E

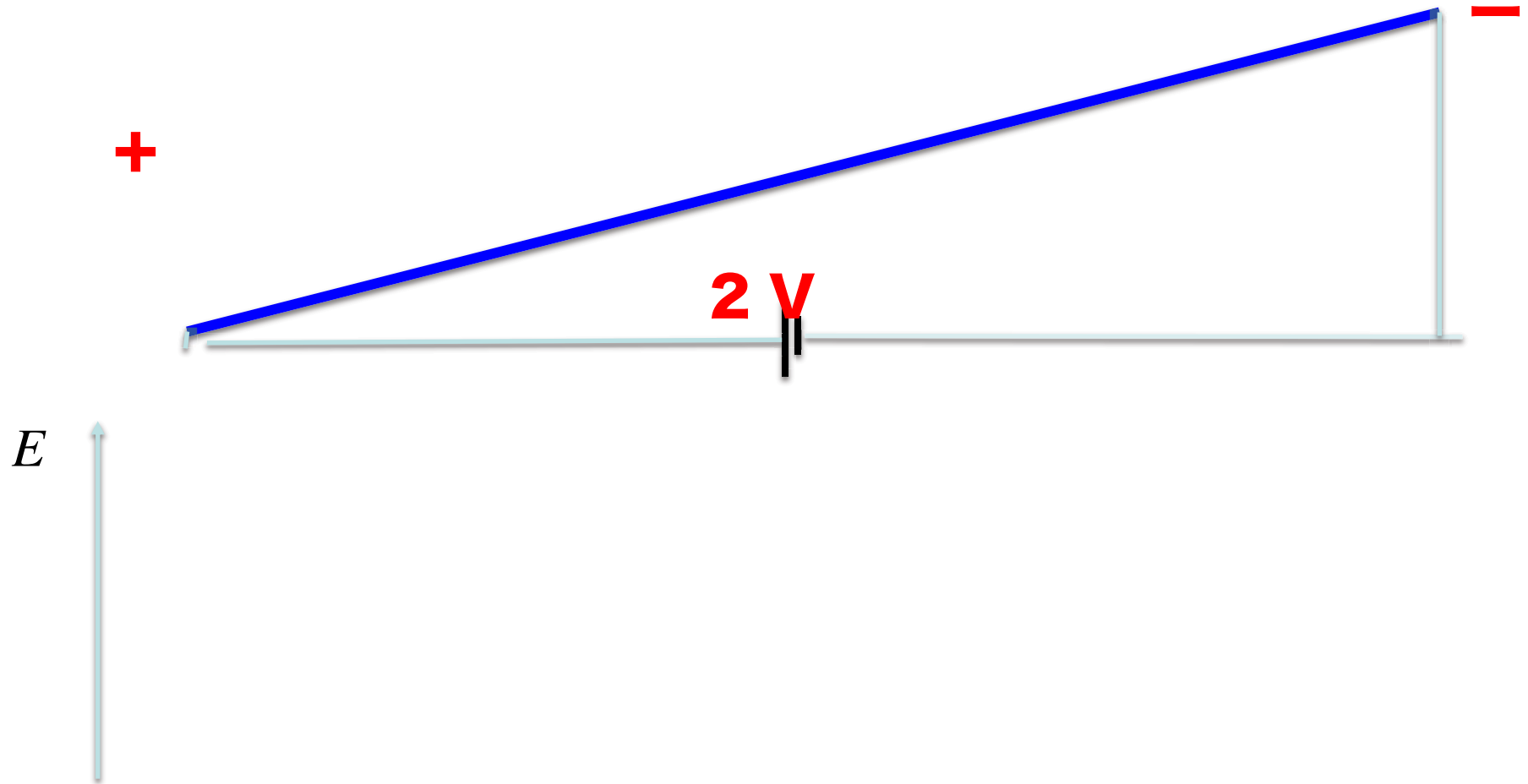


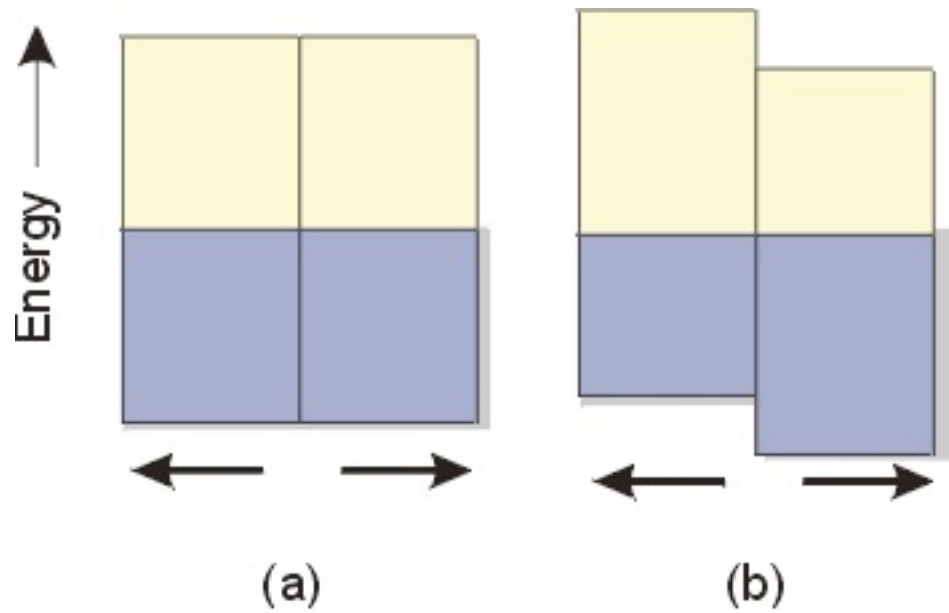
電位をかけるということとは？



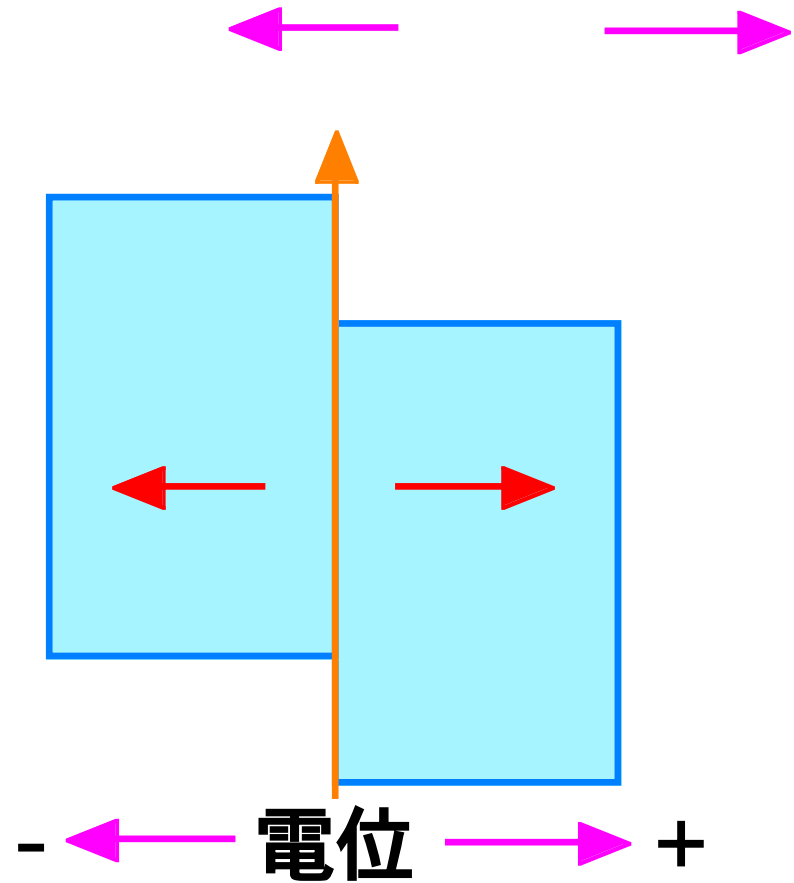


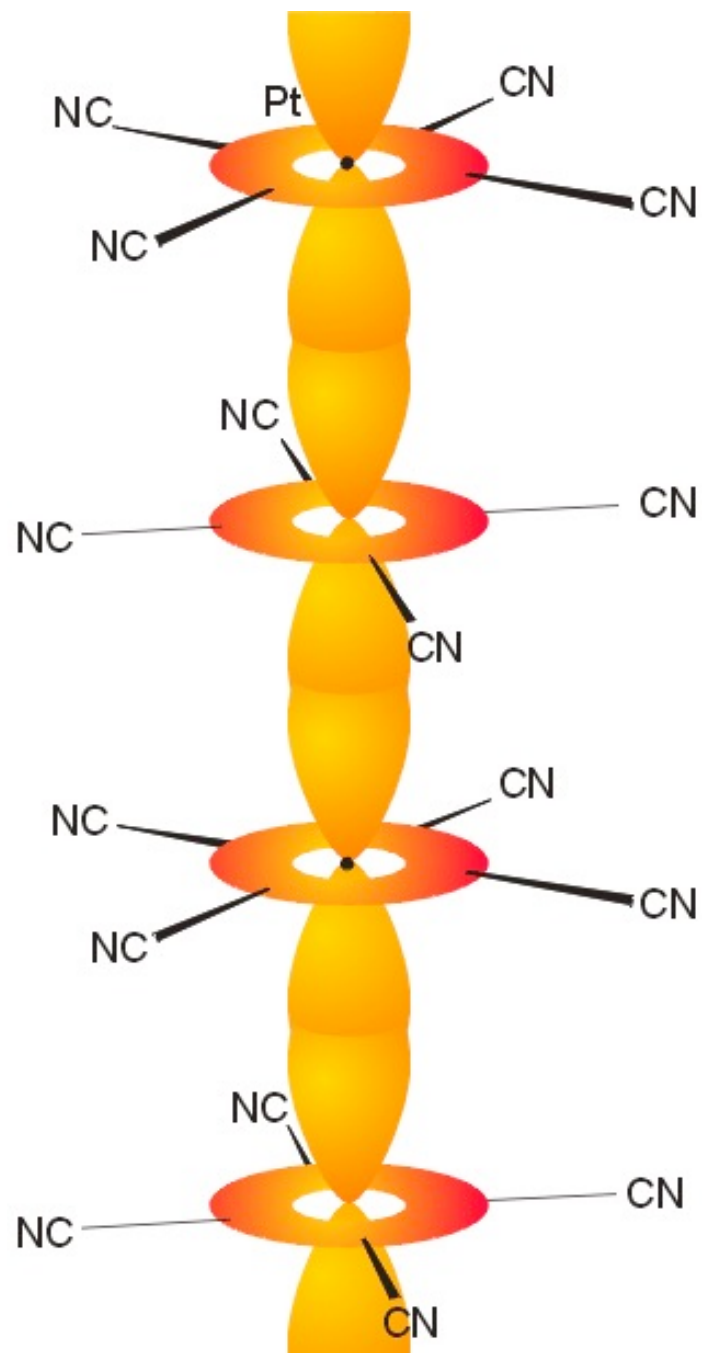
電位をかけると言うことは？

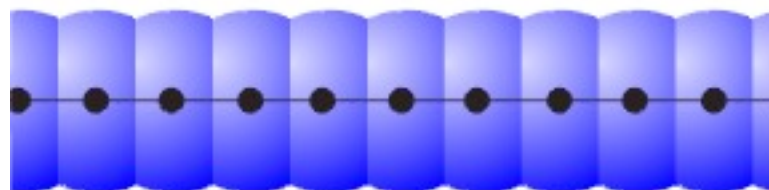




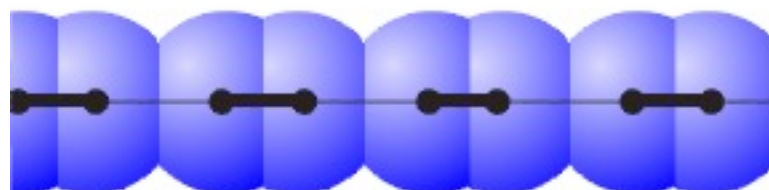
(2) 絶縁体の場合



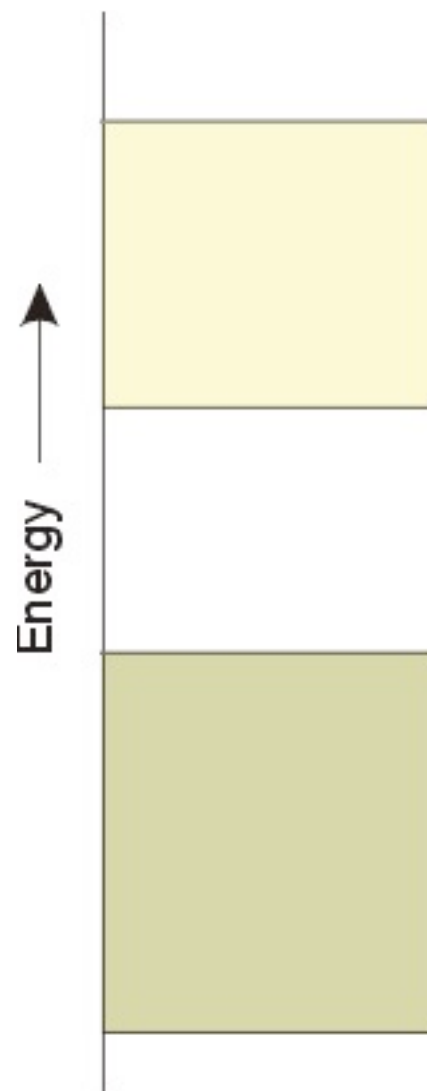


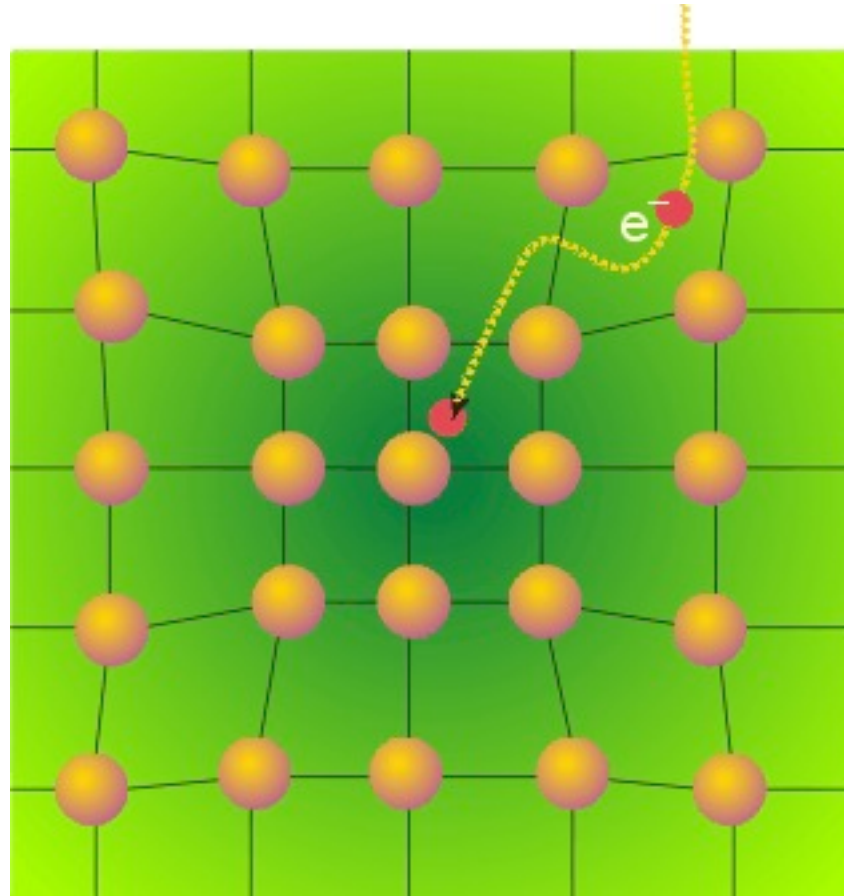


(a)

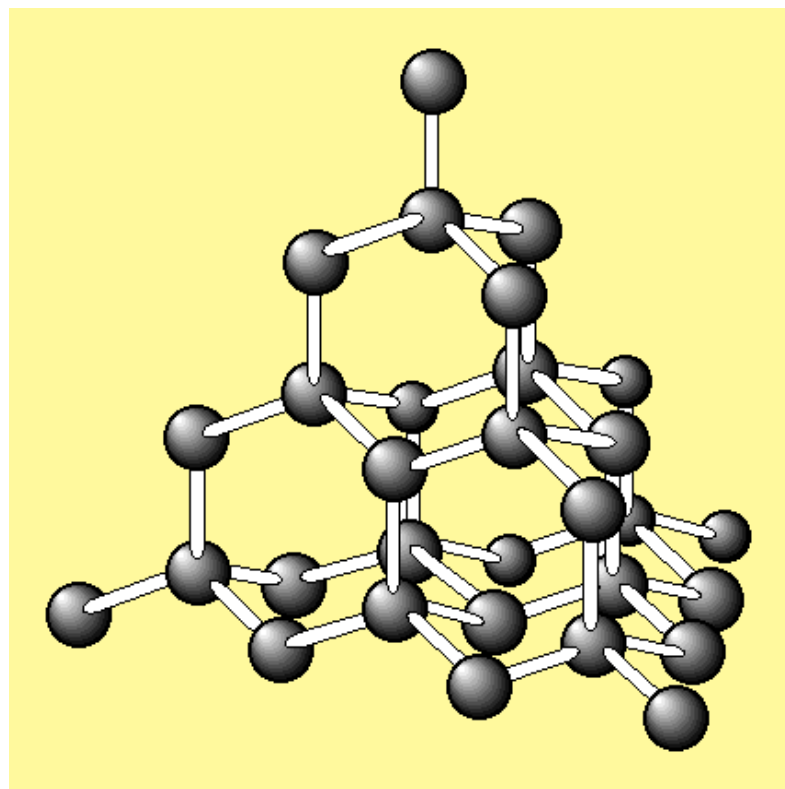


(b)

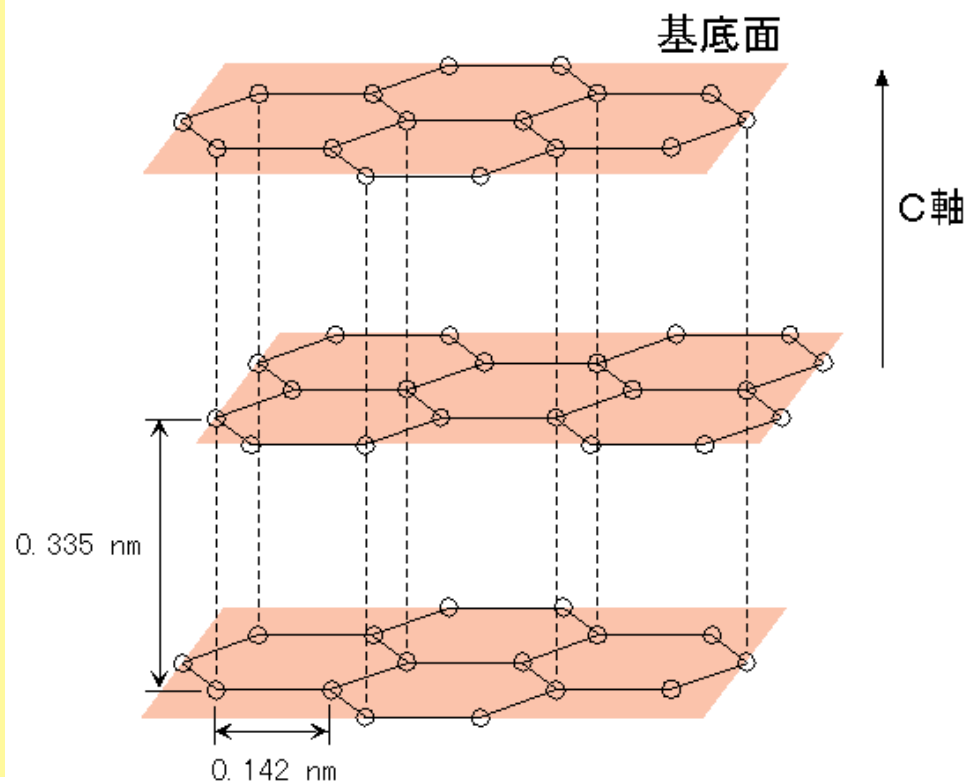




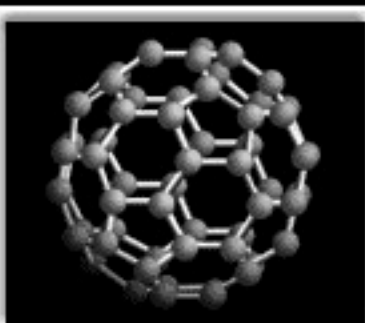
炭素



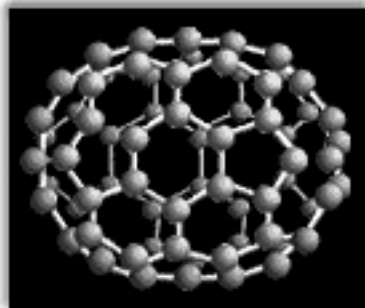
ダイヤモンド



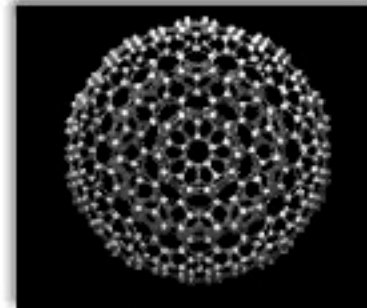
グラファイト



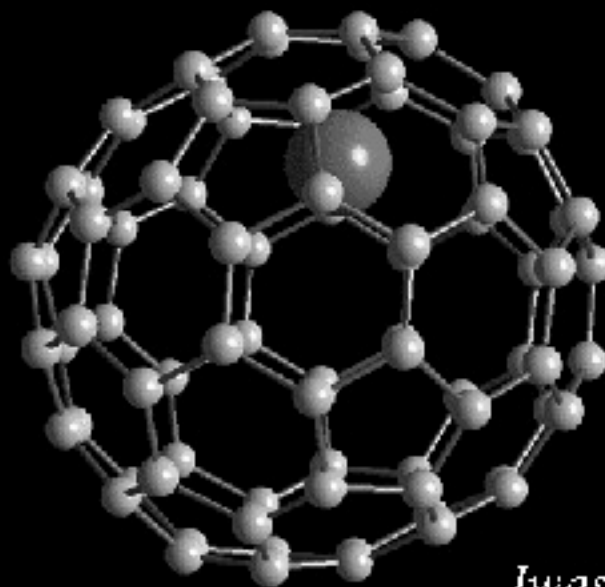
C_{60}



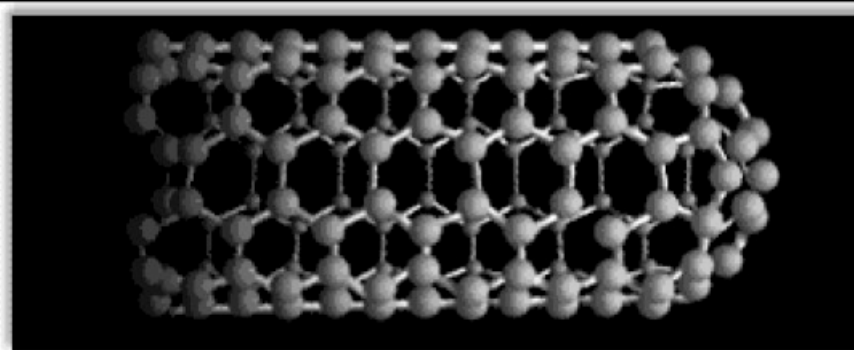
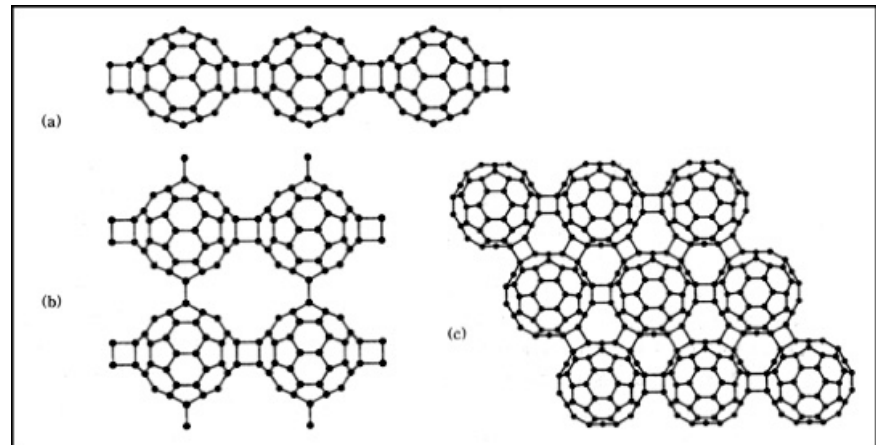
C_{70}



$C_{60}@C_{240}@C_{540}$



Iwasa Lab.



Nanotube

電子供与体（ドナー）と
電子受容体（アクセプター）

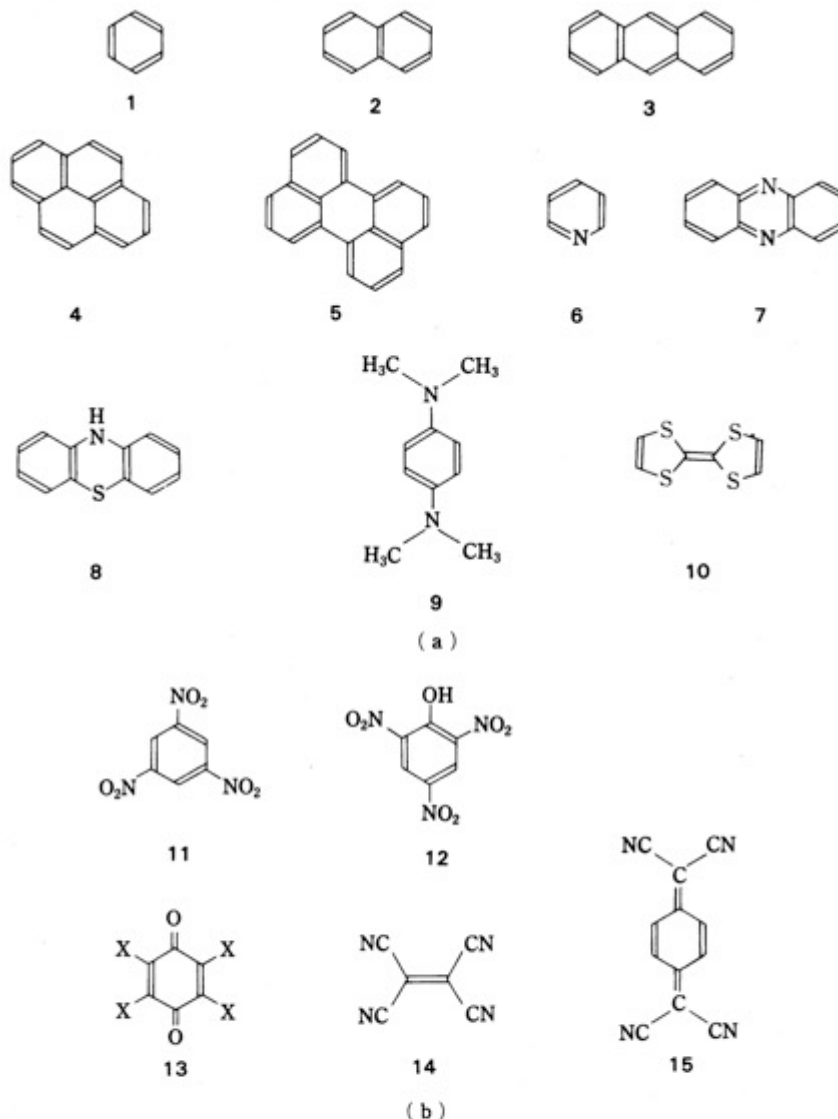


図 3.29 (a) 電子供与体（ドナー）になりやすい分子

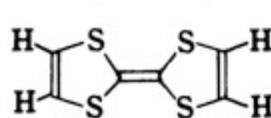
- 1 ベンゼン 2 ナフタレン 3 アントラセン 4 ビレン
5 ペリレン 6 ピリジン 7 フェナジン 8 フェノチアジン
9 *N,N,N',N'*-テトラメチル-*p*-フェニレンジアミン (TMPD)
10 テトラチアフルバレン (TTF)

(b) 電子受容体（アクセプター）になりやすい分子

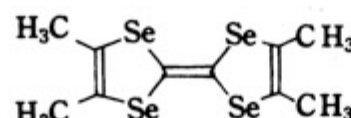
- 11 1, 3, 5-トリニトロベンゼン 12 ピクリン酸
13 $X=Cl$: クロラニルキノン, $X=F$: フルオラニルキノン
14 テトラシアノエチレン (TCNE)
15 7, 7, 8, 8-テトラシアノキノジメタン (TCNQ)

表 5.1 分子性金属, 超伝導体開発の展開

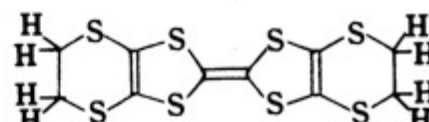
1968	$K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ (KCP) 中心金属 (Pt) の $5d_{z^2}$ での金属-金属結合と電気伝導
1973	TTF-TCNQ 一次元金属 (カラム構造) パイエルス不安定性と電荷密度波 (CDW)
1980	$(TMTSF)_2X$ 有機超伝導体の出現 スピン密度波 (SDW)
1984	$\beta-(BEDT-TTF)_2I_3$ 低- T_c (1.5 K)
1985	$\beta-(BEDT-TTF)_2I_3$ 高- T_c (8 K)
1986	$\theta-(BEDT-TTF)_2I_3$ わが国初の有機超伝導体 (TTF) $[Ni(dmit)_2]_2$ 初めての遷移金属錯体分子を含む超伝導体
1987	$(Me_4N)[Ni(dmit)_2]_2$ π アクセプター分子のみが伝導に関与する超伝導体 $\kappa-(BEDT-TTF)_2I_3$ 層状超伝導体 κ 型分子配列 (DMET) $_2X$ 非対称的ドナーをもつ一連の超伝導体 (R_1, R_2 -DCNQI) $_2Cu$ 配位構造をもつ分子性伝導体
1988	$\kappa-(BEDT-TTF)_2Cu(NCS)_2$ T_c が 10K を越える $\alpha, \alpha'-TTF[Pd(dmit)_2]_2$ $Pd[dmit]_2$ 超伝導体
1990	$\kappa-(BEDT-TTF)_2Cu[N(CN)_2]X$, ($X=Br, Cl$) T_c が 13K に上昇



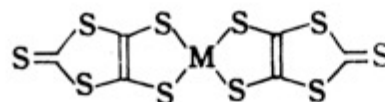
TTF



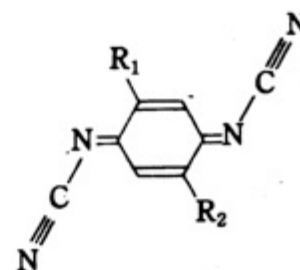
TMTSF



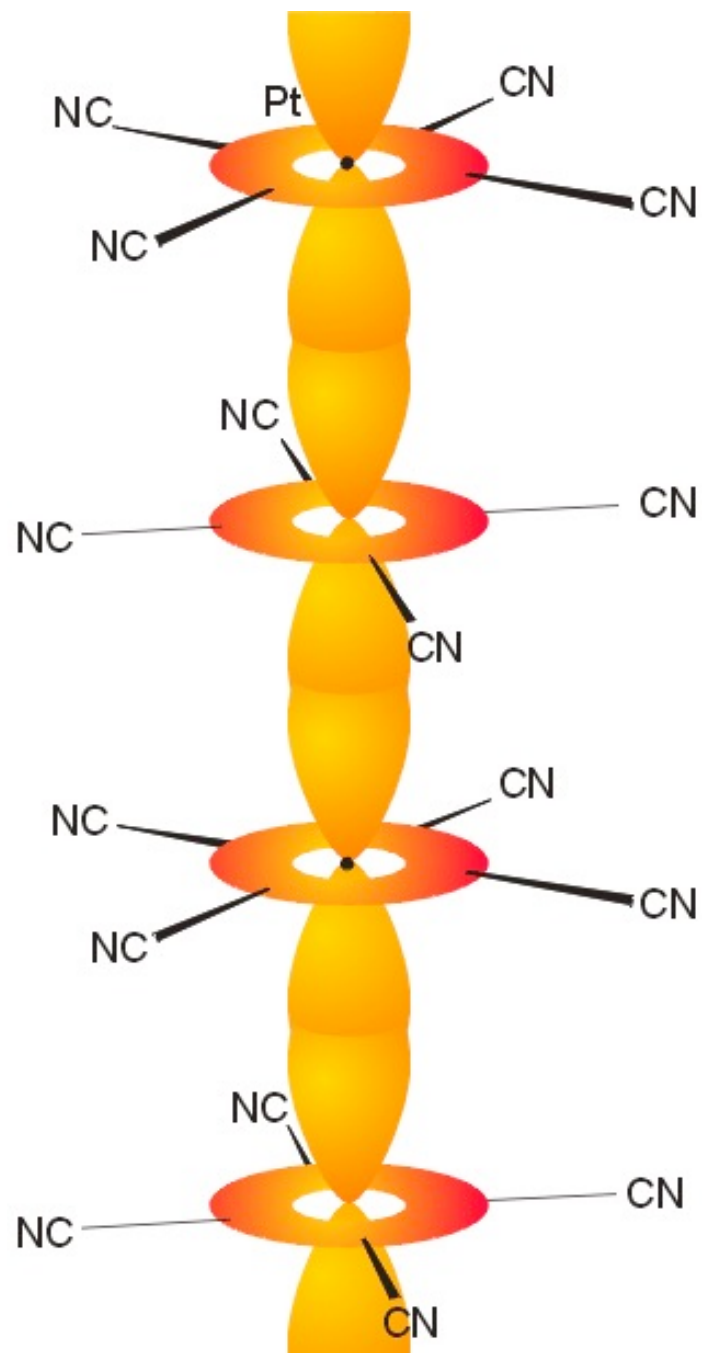
BEDT-TTF, ET とも略称される。



$M(dmit)_2$



R_1R_2 -DCNQI



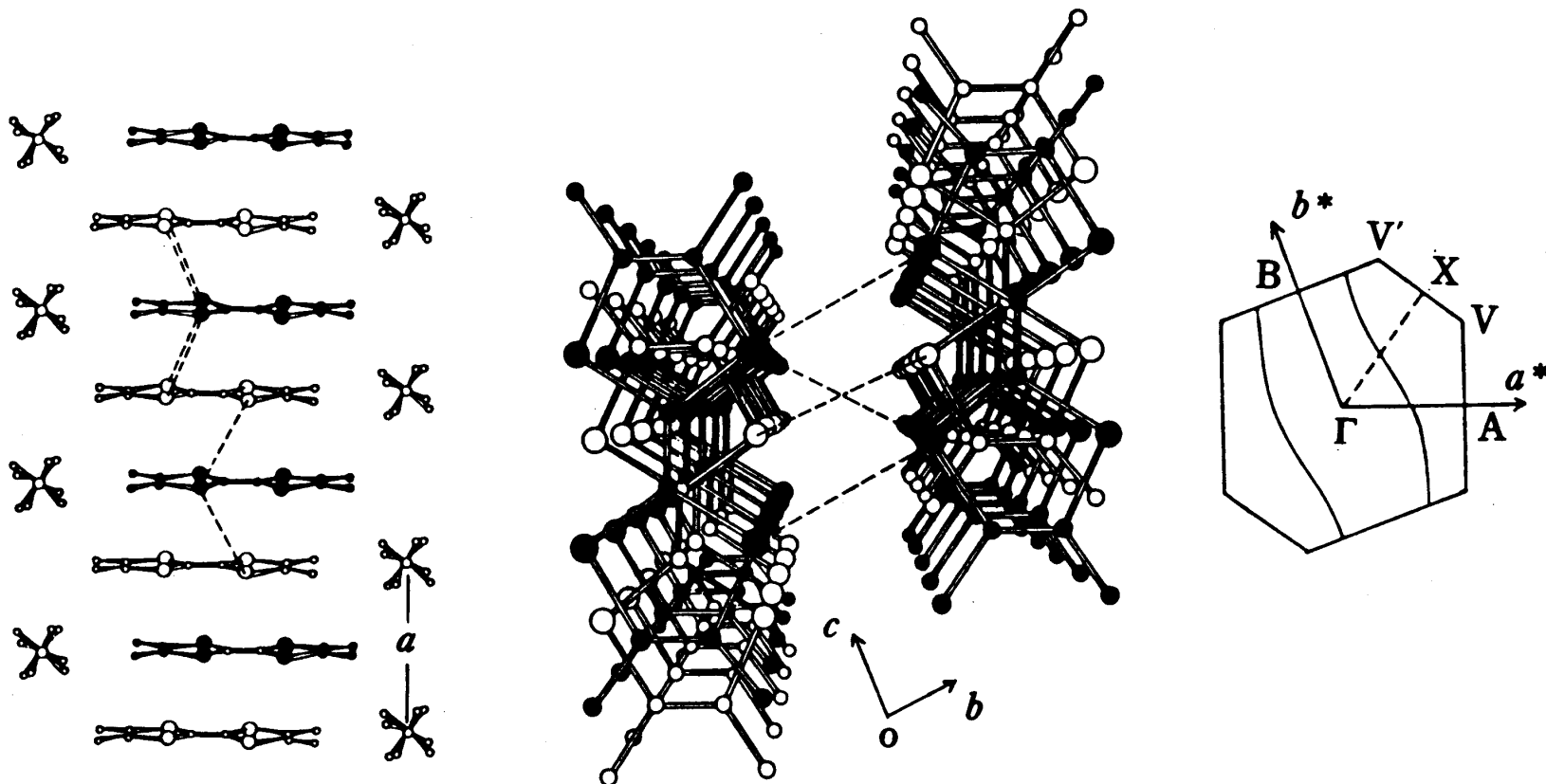


図 5.4 $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ ($=\text{PF}_6, \text{ClO}_4\cdots$) 塩の構造とフェルミ面. 破線はファンデルワールス距離以下の $\text{Se}\cdots\text{Se}$ 距離.

最初の有機超伝導体

国産初の有機超伝導体

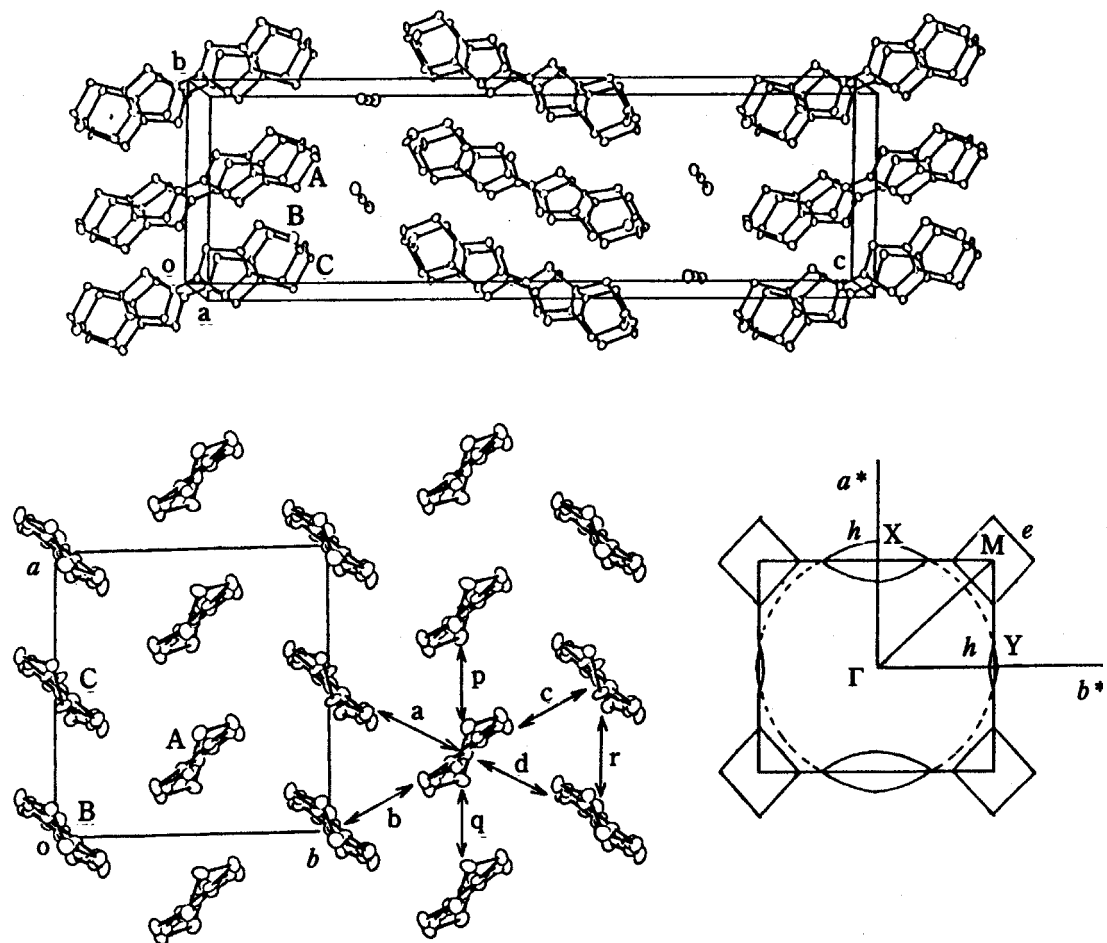


図 5.6 θ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の結晶構造。金属層内分子配列および平均構造とヒュッケル法にもとづくフェルミ面。A, B, C は独立な分子, a, b など独立な分子間相互作用をあらわす。破線は平均化された相互作用についての近似的な円筒フェルミ面の断面(図 5.3 参照)。Y 近傍に小さなホール(h)領域が存在すること以外は実験結果とよくあっている。

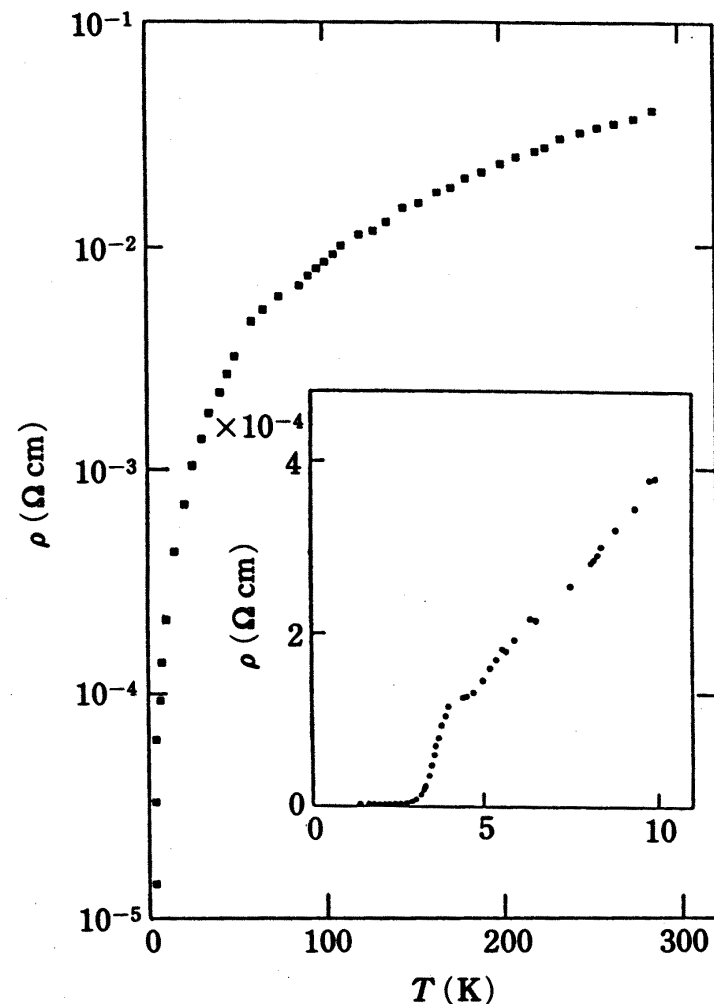
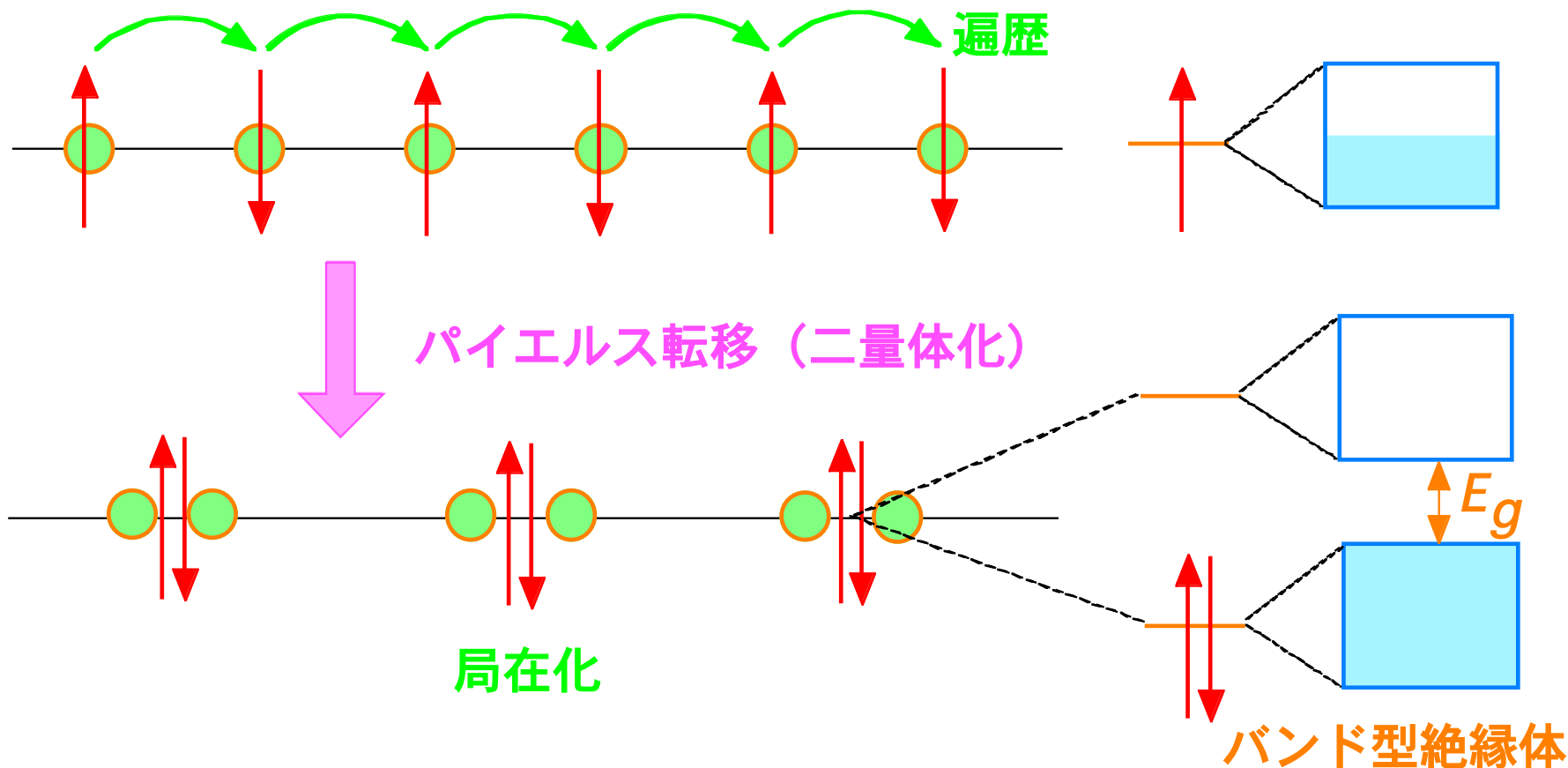


図 5.5 θ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の超伝導転移。
[Chem. Lett., 1986, 791.]

金属-絶縁体転移：M-I 転移

(1) パイエルス転移

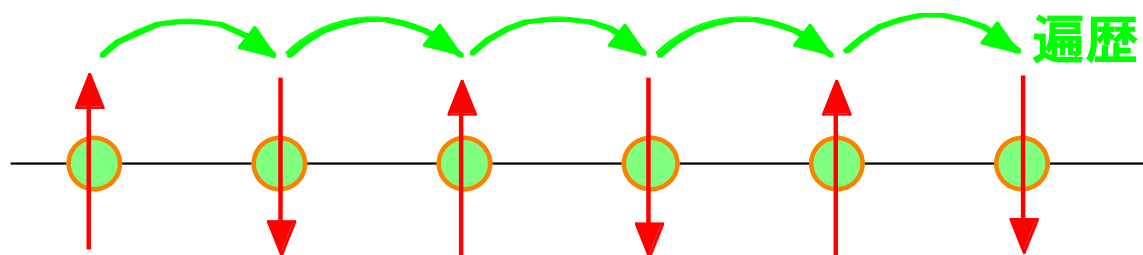
格子歪みに因る（電子-格子相互作用）



金属-絶縁体転移：M-I 転移

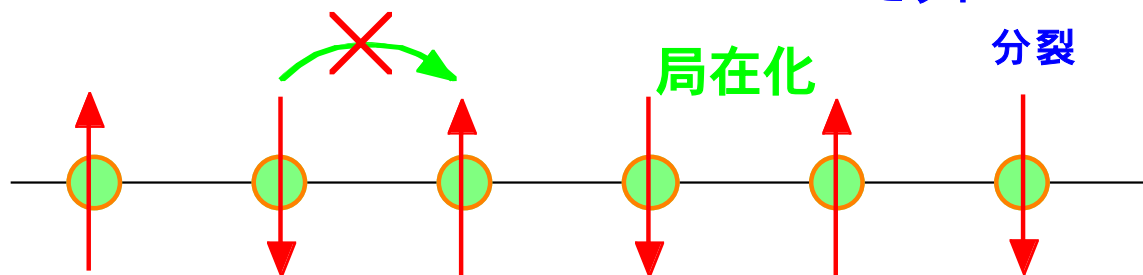
(2) モット転移

電子間反発 U に因る (電子間相互作用)

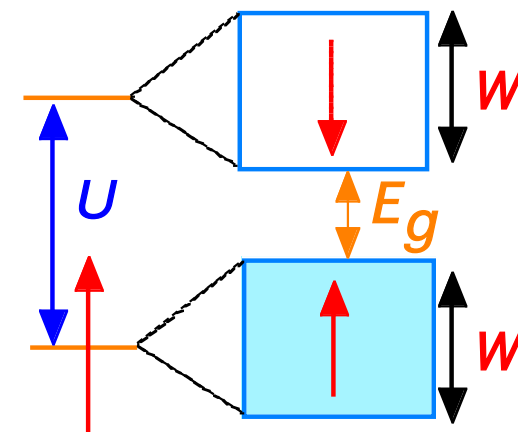
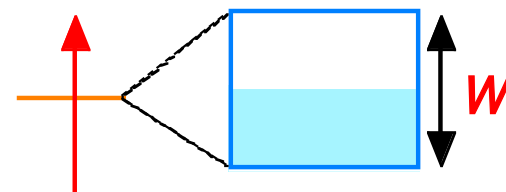


$$U > W$$

モット転移 (格子歪無)



モット・ハバード
分裂



モット型絶縁体

Mott-Hubbard type insulator

ハバードモデル

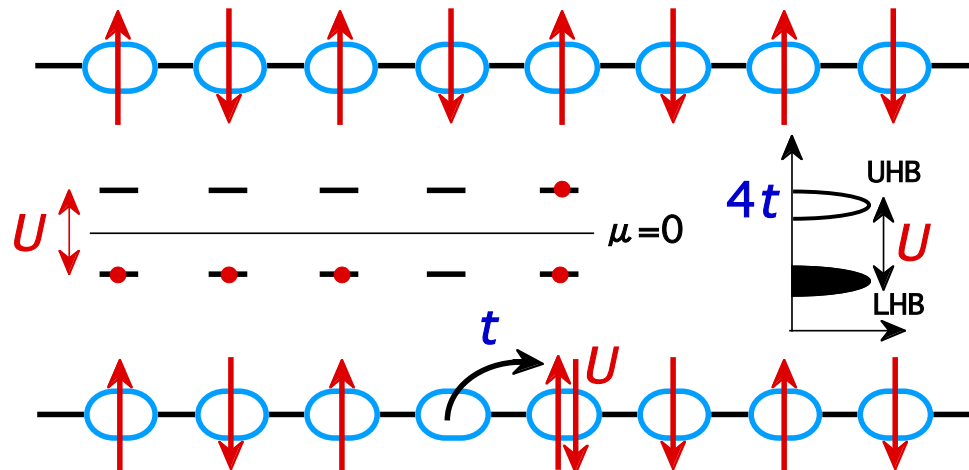
$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{js} c_{is} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

移動積分
(波動性)

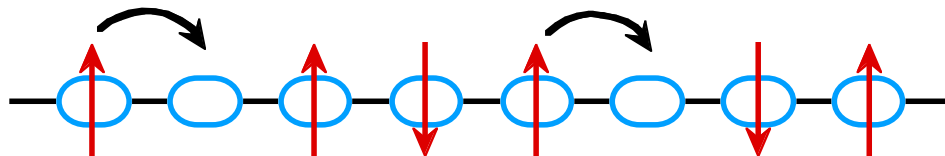
クーロン反発
(粒子性)

$N_e/N=1$ の場合(半充填)

○ 2人掛けの椅子



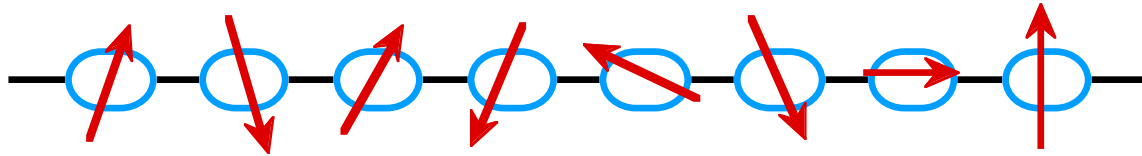
$N_e/N \neq 1$ の場合



$N_e/N=1$ の場合(半充填)

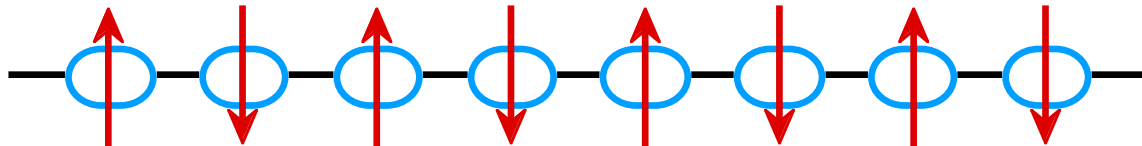
(1) $U > W (\sim 4t)$: モット絶縁体

Magnetic disorder

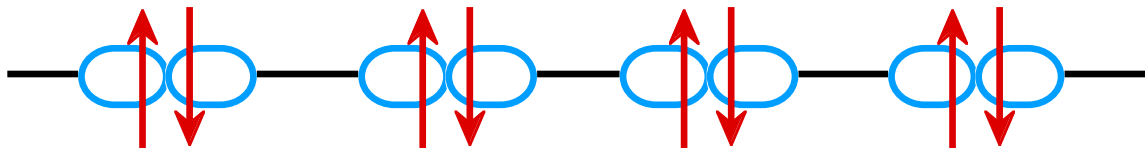


基底状態

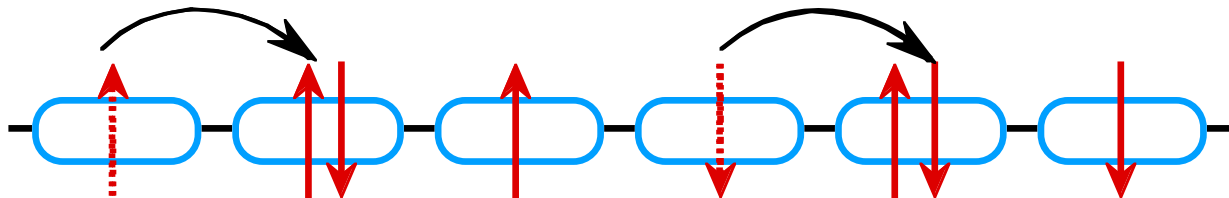
(a) SDW (鎖間相互作用大)



(b) Spin Peierls (鎖間相互作用小)

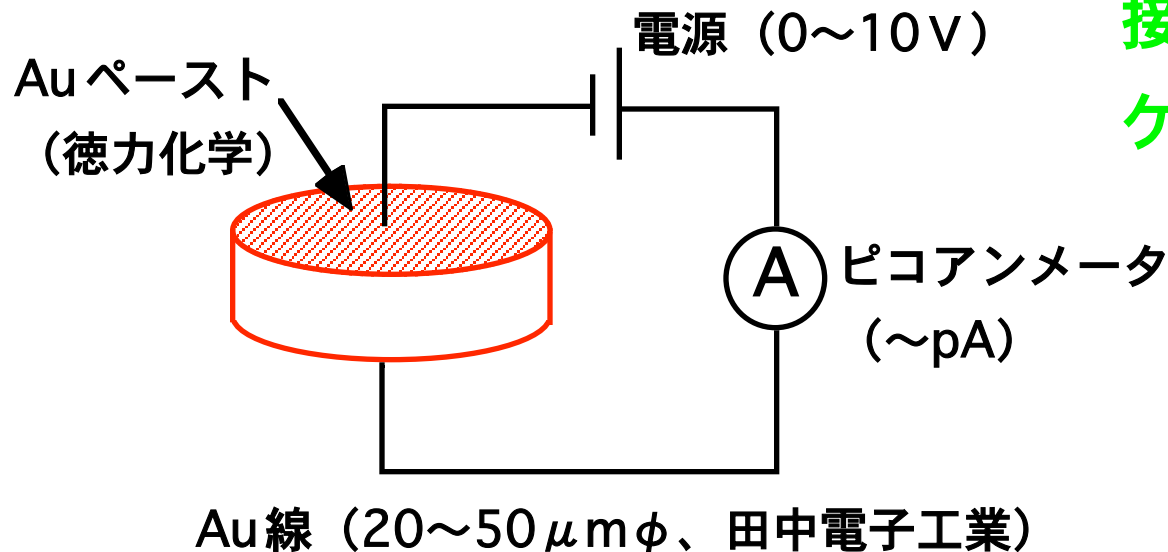


(2) $U < W (\sim 4t)$: 金属



測定方法

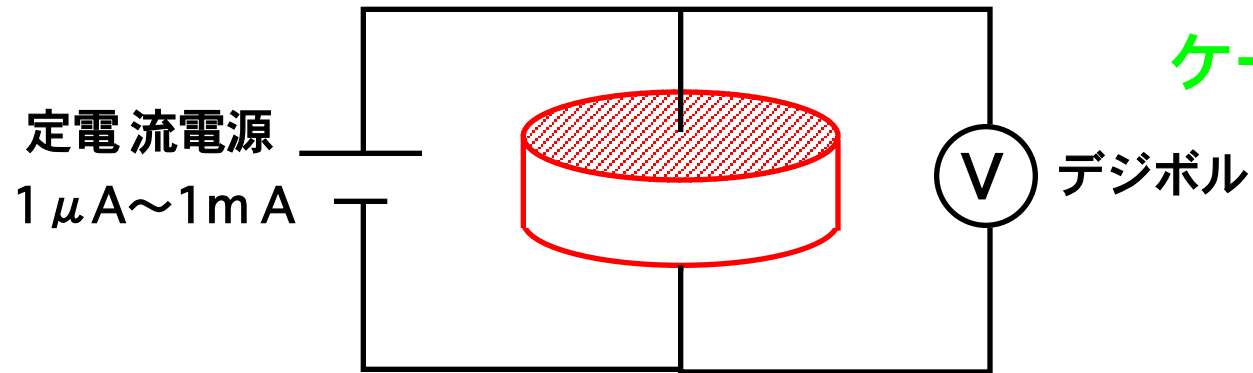
- 二端子法（高抵抗の場合、 $\rho > 10^{-8} \Omega \text{cm}$ ）



接触抵抗：有

ケーブル抵抗：有

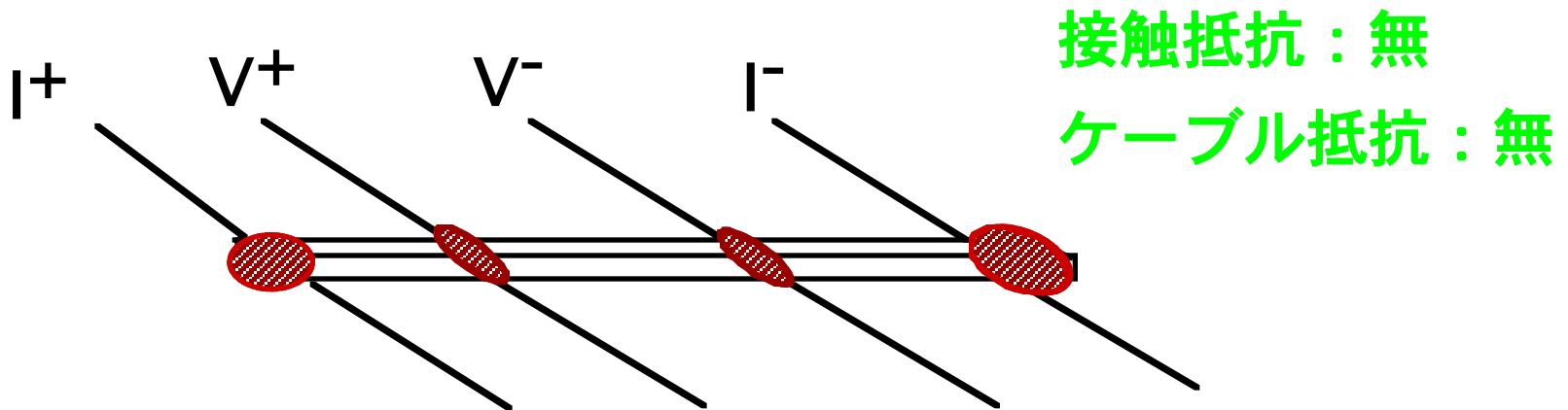
- ・ 擬似四端子法（粉末試料、 $\rho > 10^{-3} \Omega \text{cm}$ ）



接触抵抗：有

ケーブル抵抗：無

- ・ 四端子法（単結晶試料、 $\rho < 10^{-3} \Omega \text{cm}$ ）



金属伝導性錯体を創るには

1. 集積系であること

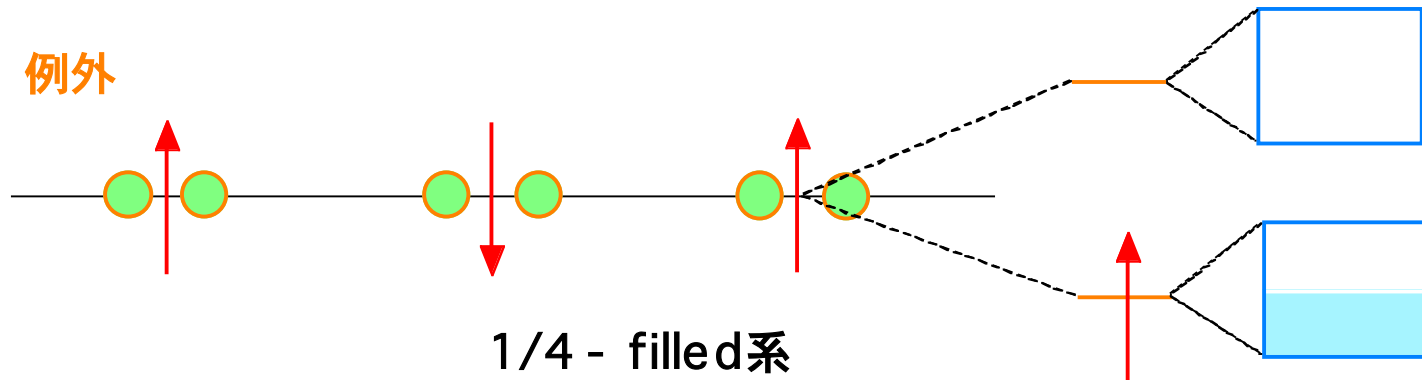
- ・ ディスクリート系では無理
- ・ 架橋配位子を用いる（共有結合ネットワーク）
 - 架橋イオン（ハロゲンイオン、酸素イオン、 π 共役系）
- ・ 短い分子間距離（ファンデルワールスネットワーク）
 - M-M距離 $< 3.0 \text{ \AA}$ 、 π - π 距離 $< 3.4 \text{ \AA}$

2. 不対電子（ラジカル）を有する

- ・ 閉殻構造でない、部分酸化状態、混合原子価状態

3. ユニフォームな構造を有する

- ・ 超周期がない、二量体化していない、構造歪みがない。



金属伝導性錯体を創るには

4. 次元性をあげる

- ・ パイエルス転移を抑制する

5. オンサイトクーロン反発 U を減少させる

- ・ 電子雲拡大、大きい π 共役系、金属間結合

6. フロンティア軌道工学

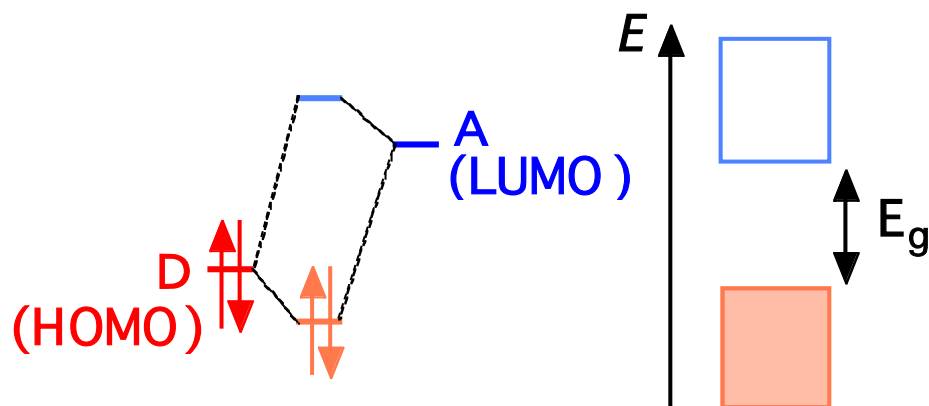
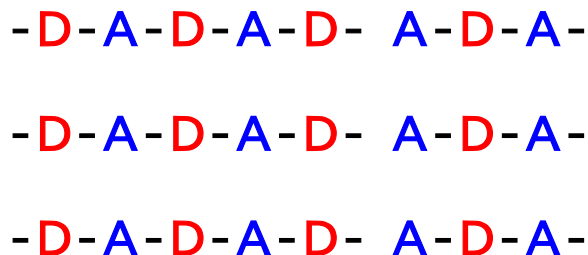
- ・ 結晶工学では駄目、軌道の対称性、直交性の考慮
- ・ 電荷移動型軌道工学（セルフ・ドーピング）
- ・ 架橋型軌道工学（ σ 型架橋、 π 型架橋）
- ・ ダイレクト型軌道工学（外部ドーピング）

7. 努力（物質観）と運（動物的臭覚）

電荷移動 型軌道工学 (セルフ・ドーピング)

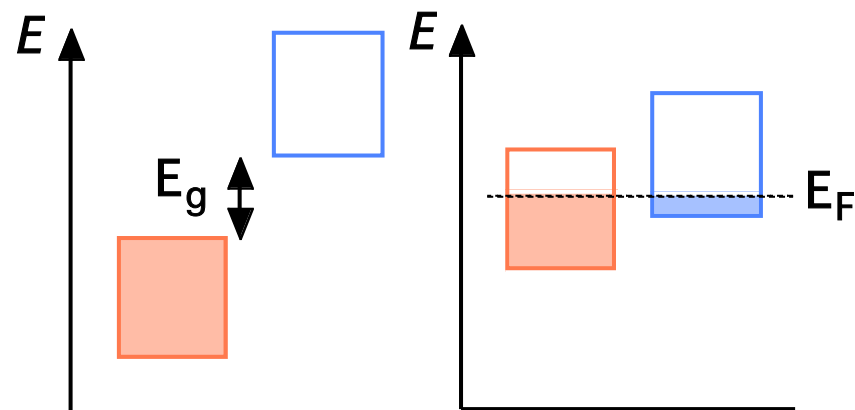
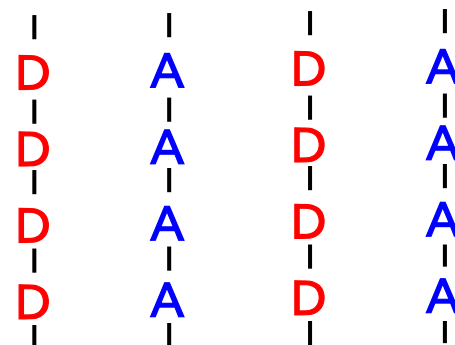
D : ドナー、A : アクセプター

(1) 交互積層型



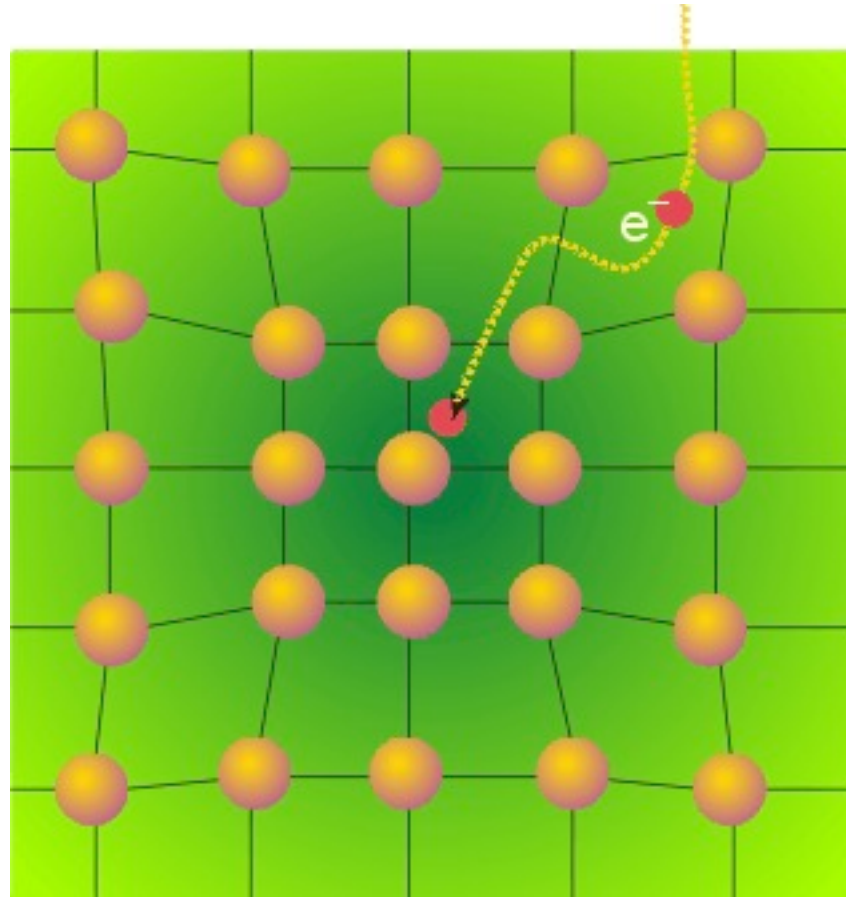
但し、強制ドーピングで金属化

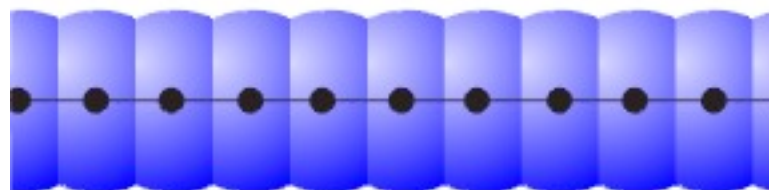
(2) 分離積層型 (セルフドーピング)



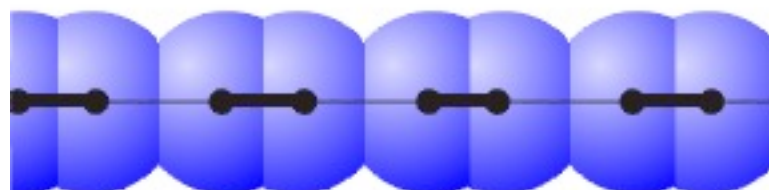
中性状態

電荷移動状態

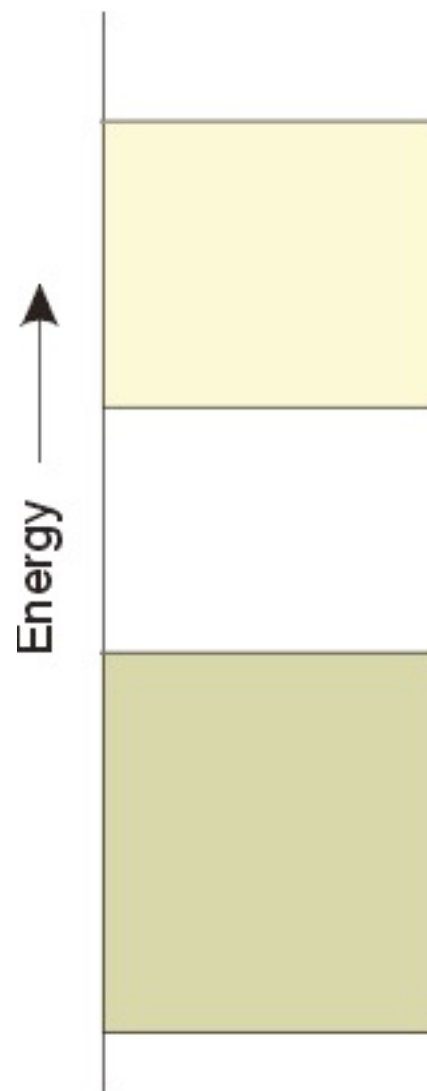




(a)



(b)



物質の磁化機構

$$M = \chi H$$

$$\chi = N \mu^2 / 3 k_B T$$

$$\mu^2 = g^2 J(J+1) \mu_B^2$$

μ_B : 電子の磁子 (磁気モーメントの量子力学的単位)
 9.274×10^{-21} erg/G

$$\chi = C / T \quad C = 0.375 (S = 1/2)$$

g因子: $\Delta E = g \mu_B H$

k_B : ボルツマン定数 (1.38041×10^{-16} erg/K)

常磁性(不対電子)

反磁性(電子対)

完全反磁性(クーパー対、マイスナー効果)

強磁性(キュリー温度)

反強磁性(ネール温度、磁気異方性)

フェリ磁性

反強磁性になる理由

電子雲の重なり効果

強磁性になる理由

フント則、ヒステリシス

超交換相互作用

90°パス、180°パス

二重交換相互作用

Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} , Mn^{3+} , Fe_3O_4

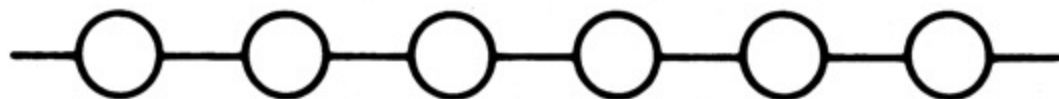
スピנקロスオーバー錯体

金属の常磁性(パウリ常磁性)

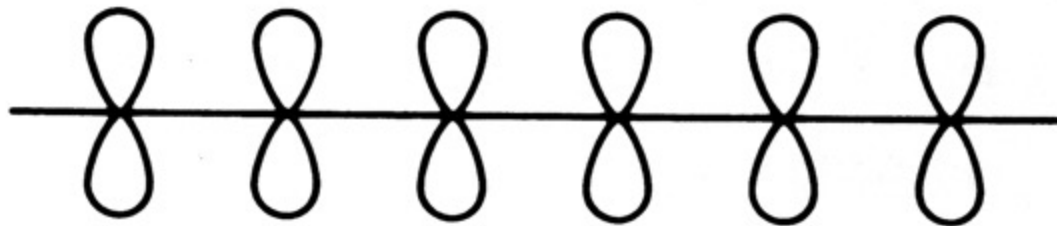
スピン数: $2\mu_B H D(E_F)$

1モル磁化: $2N\mu_B^2 H D(E_F)$

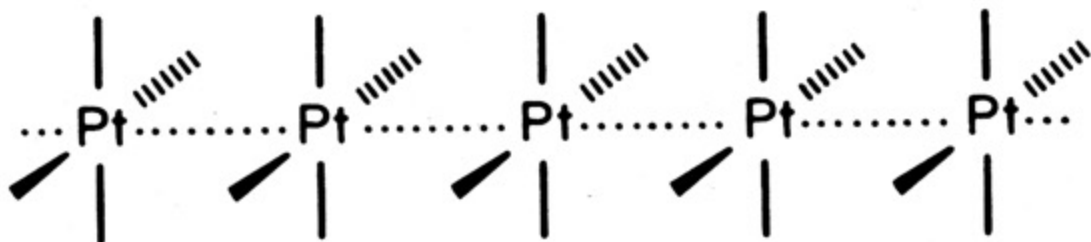
バンド強磁性: Ni



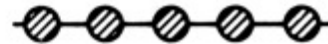
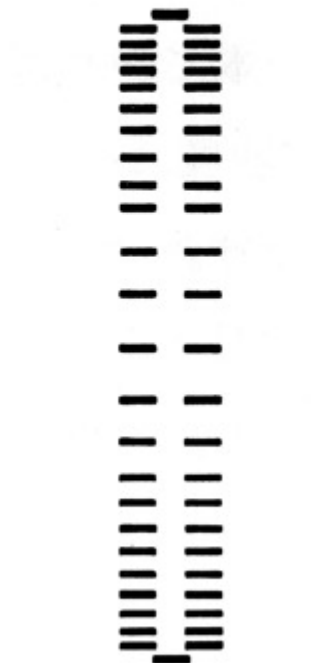
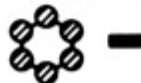
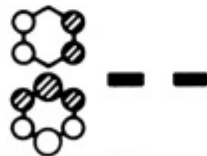
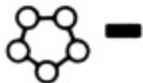
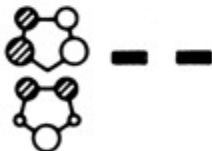
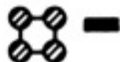
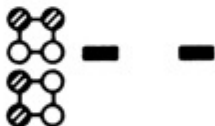
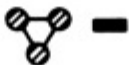
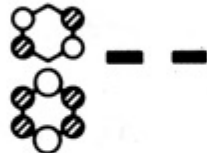
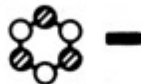
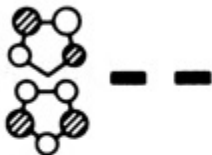
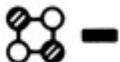
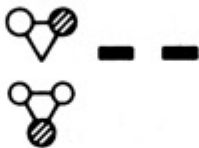
1

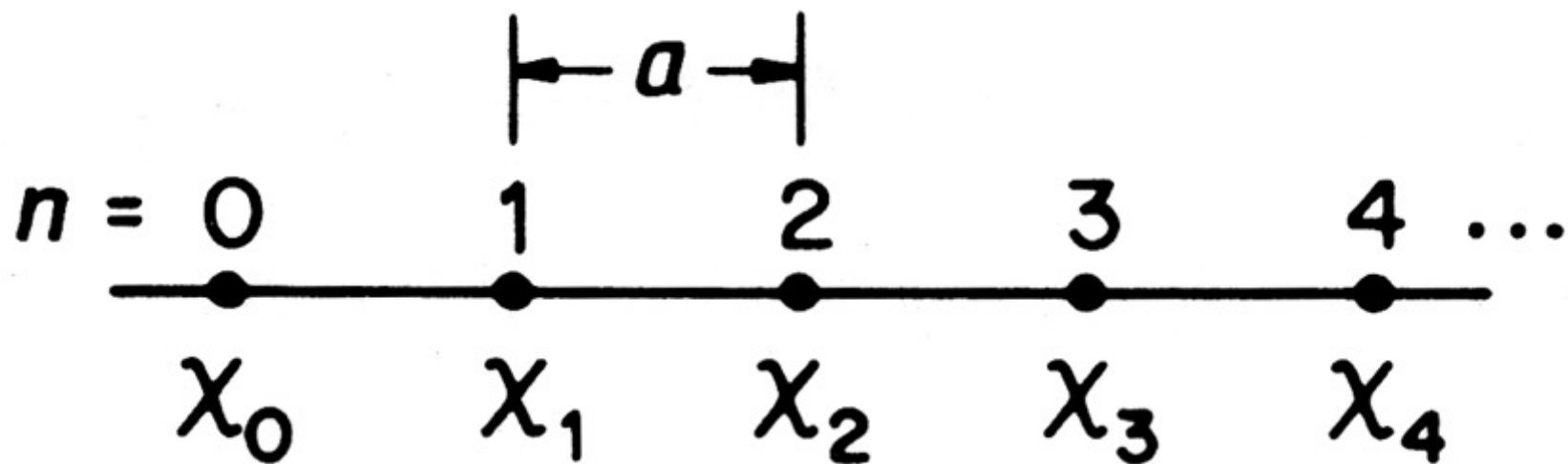


2







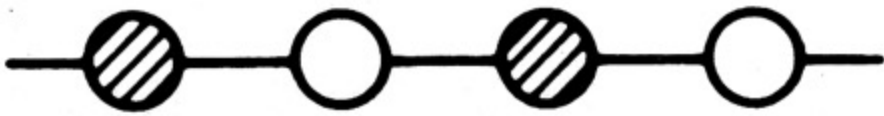


$$\psi_k = \sum_n e^{i k n a} \chi_n$$

$$k=0 \quad \psi_0 = \sum_n e^0 \chi_n = \sum_n \chi_n$$

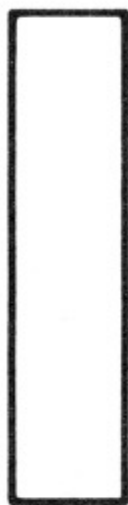
$$= \chi_0 + \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 + \dots$$


$$k=\frac{\pi}{a} \quad \psi_{\frac{\pi}{a}} = \sum_n e^{\pi i n} \chi_n = \sum_n (-1)^n \chi_n$$

$$= \chi_0 - \chi_1 + \chi_2 - \chi_3 + \dots$$


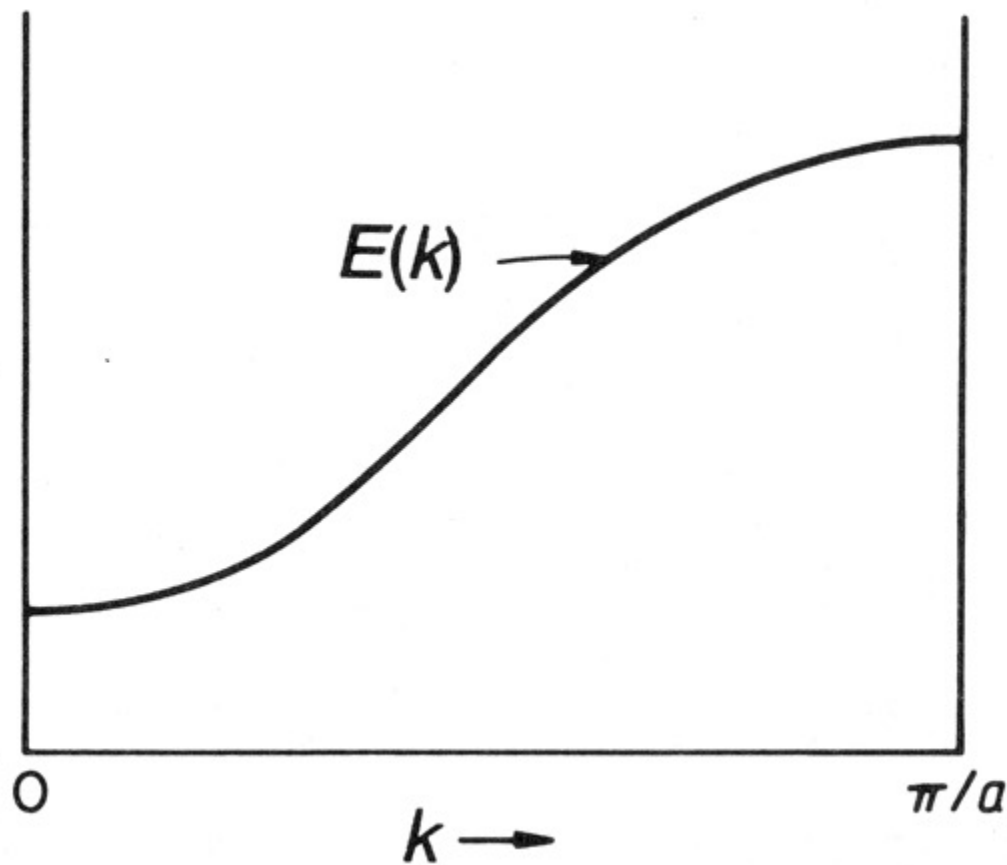


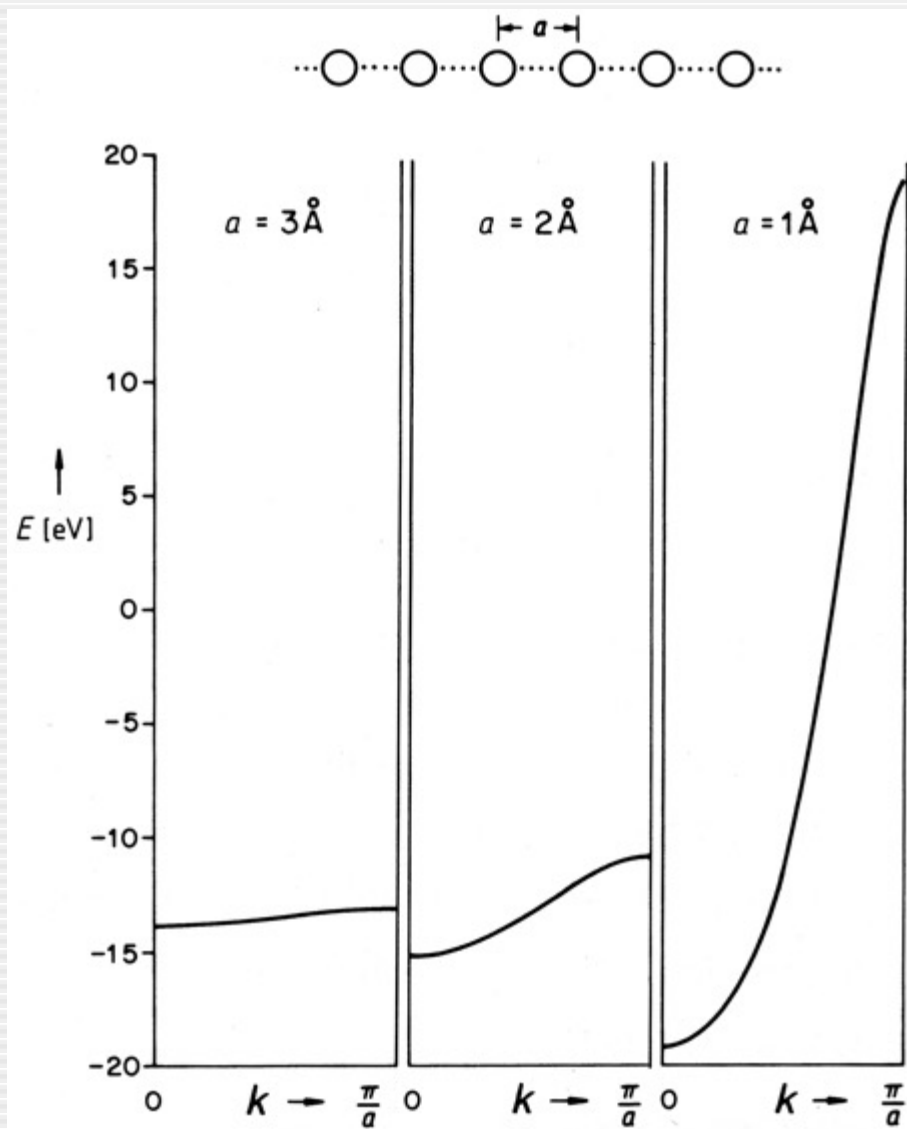
$\equiv$



$\equiv$

$\uparrow$
 E



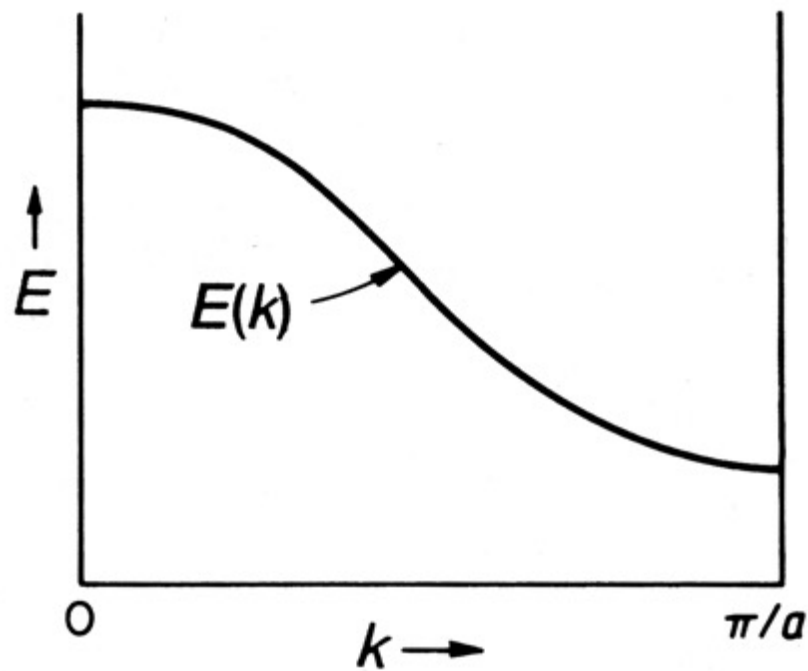


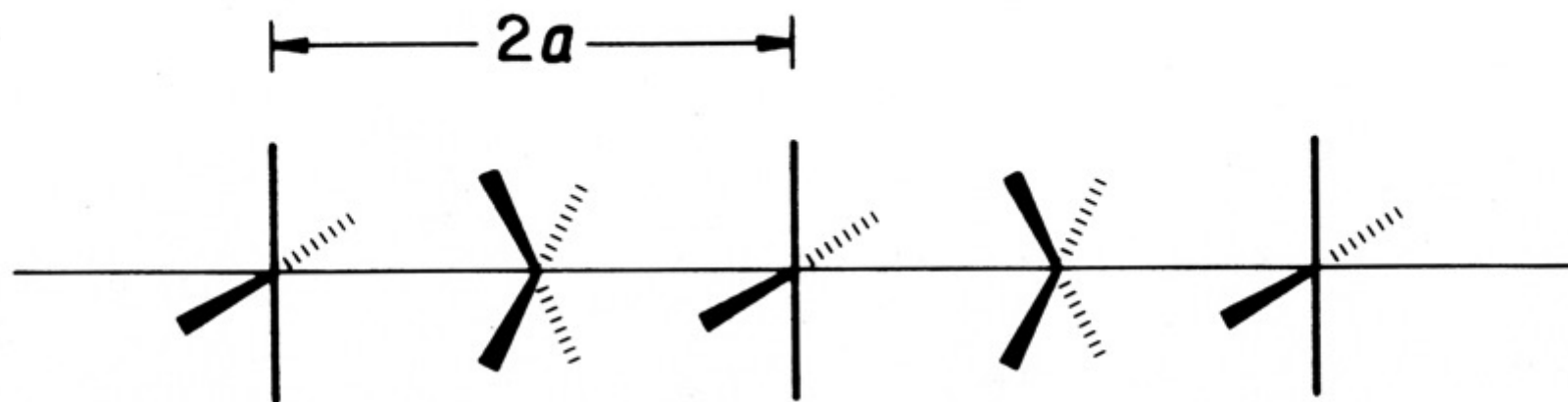
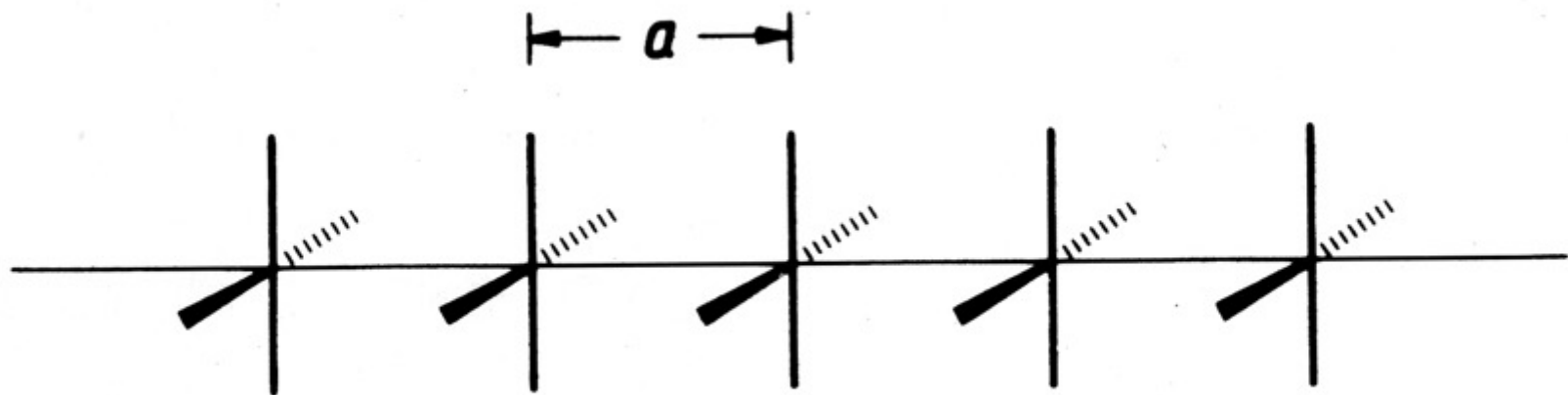
原子間距離 $a=3, 2, 1 \text{ \AA}$ としたときの水素原子鎖のバンド構造。孤立水素原子のエネルギーは -13.6 eV である。

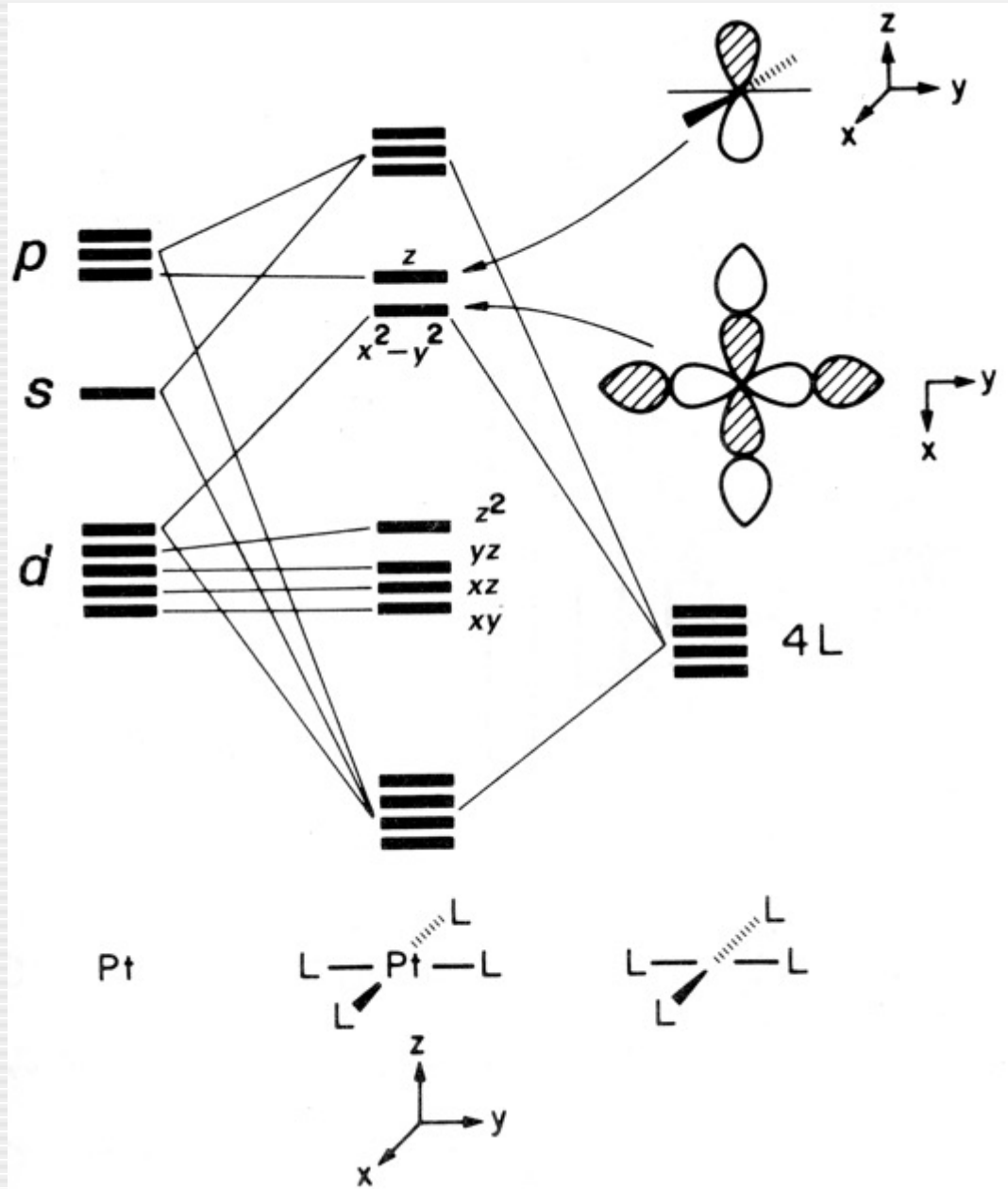
$$\psi_0 = \chi_0 + \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 + \dots$$

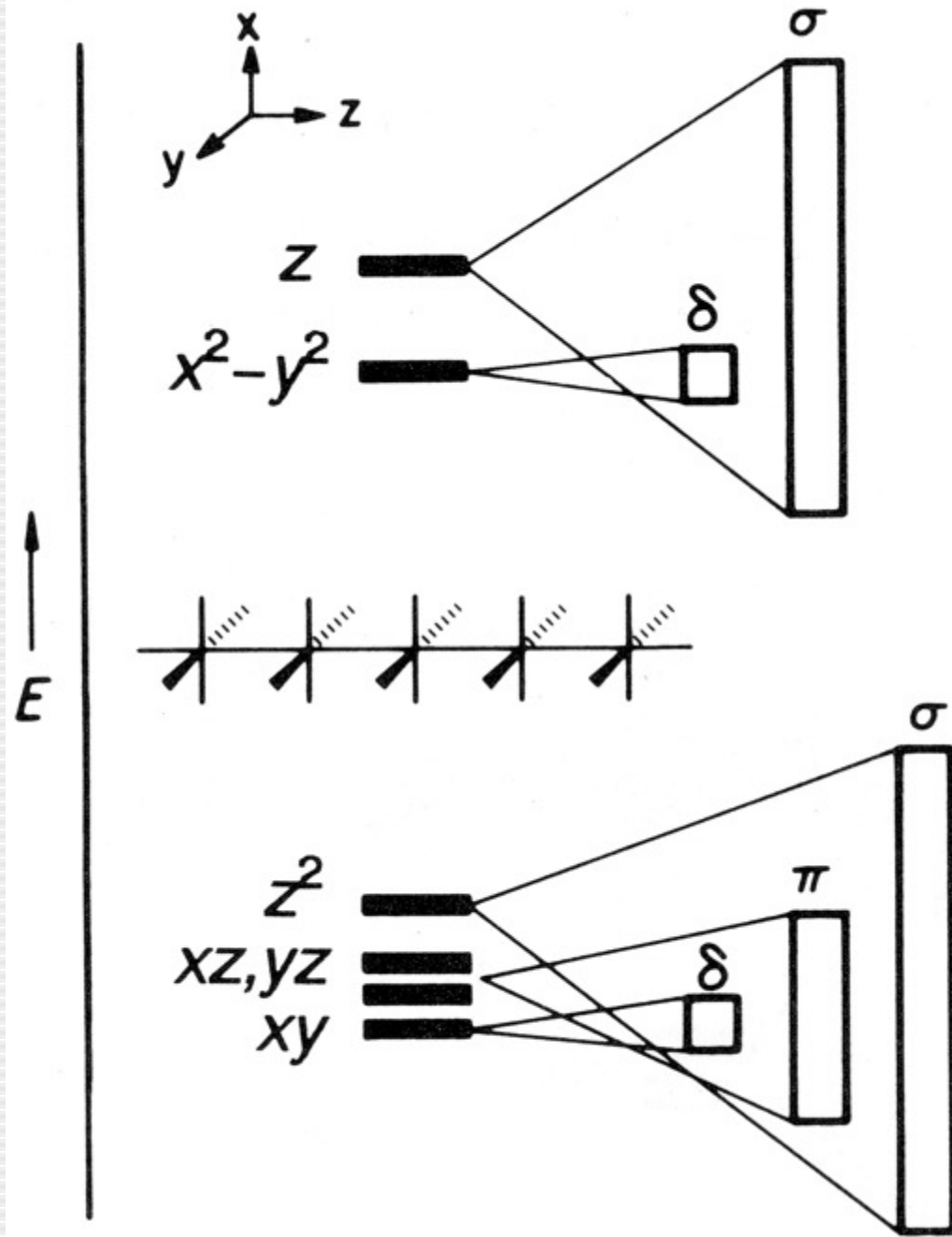


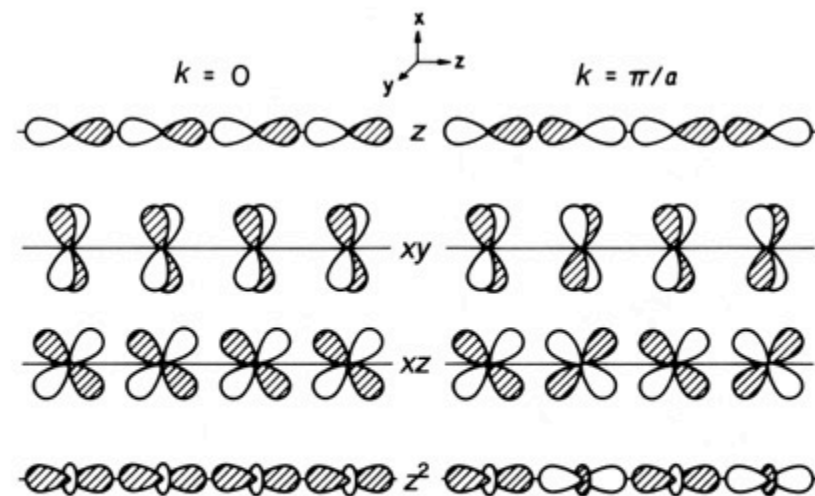
$$\psi_{\frac{\pi}{a}} = \chi_0 - \chi_1 + \chi_2 - \chi_3 + \dots$$



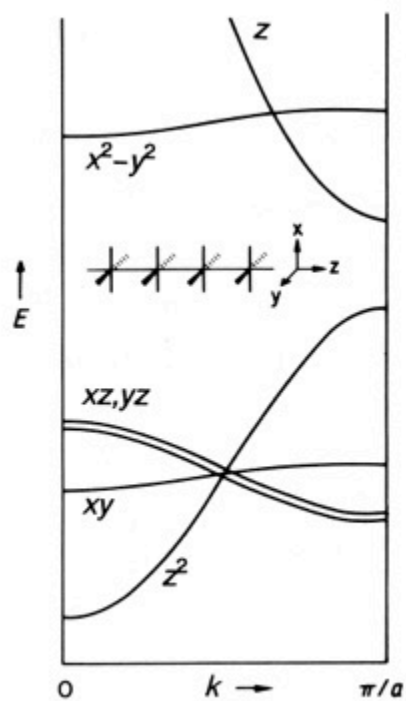


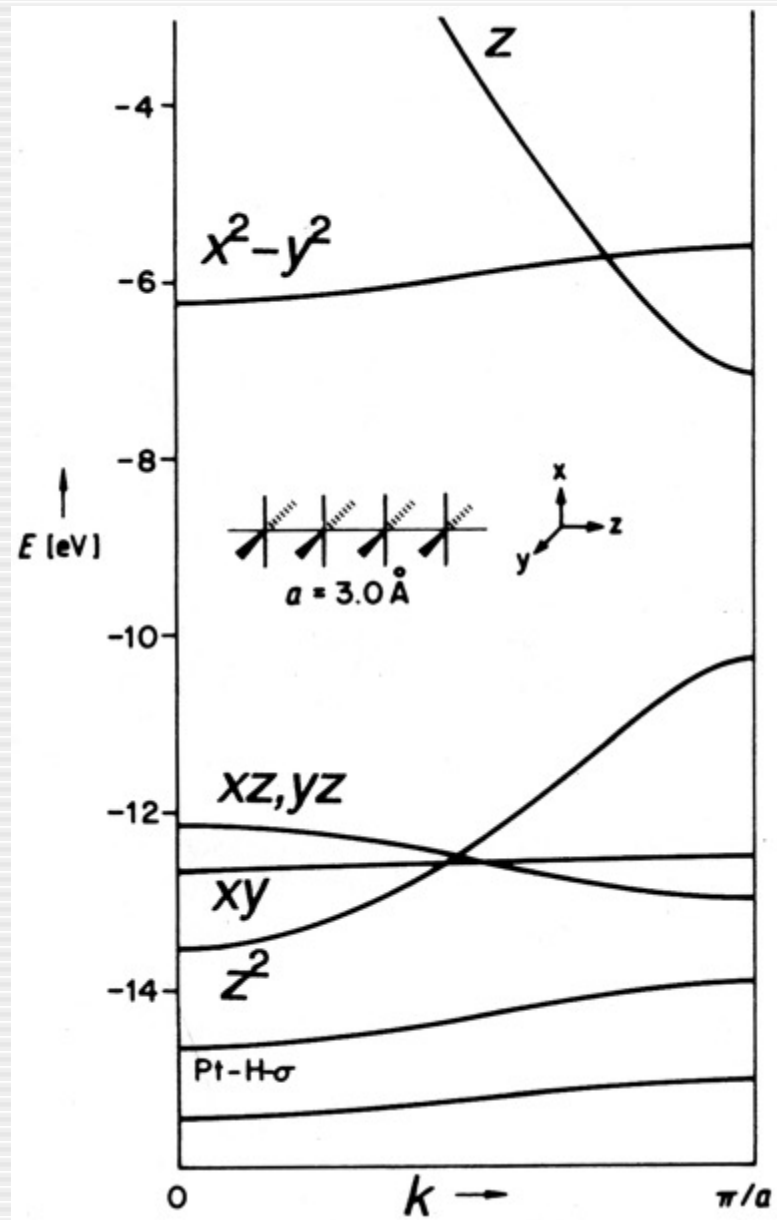


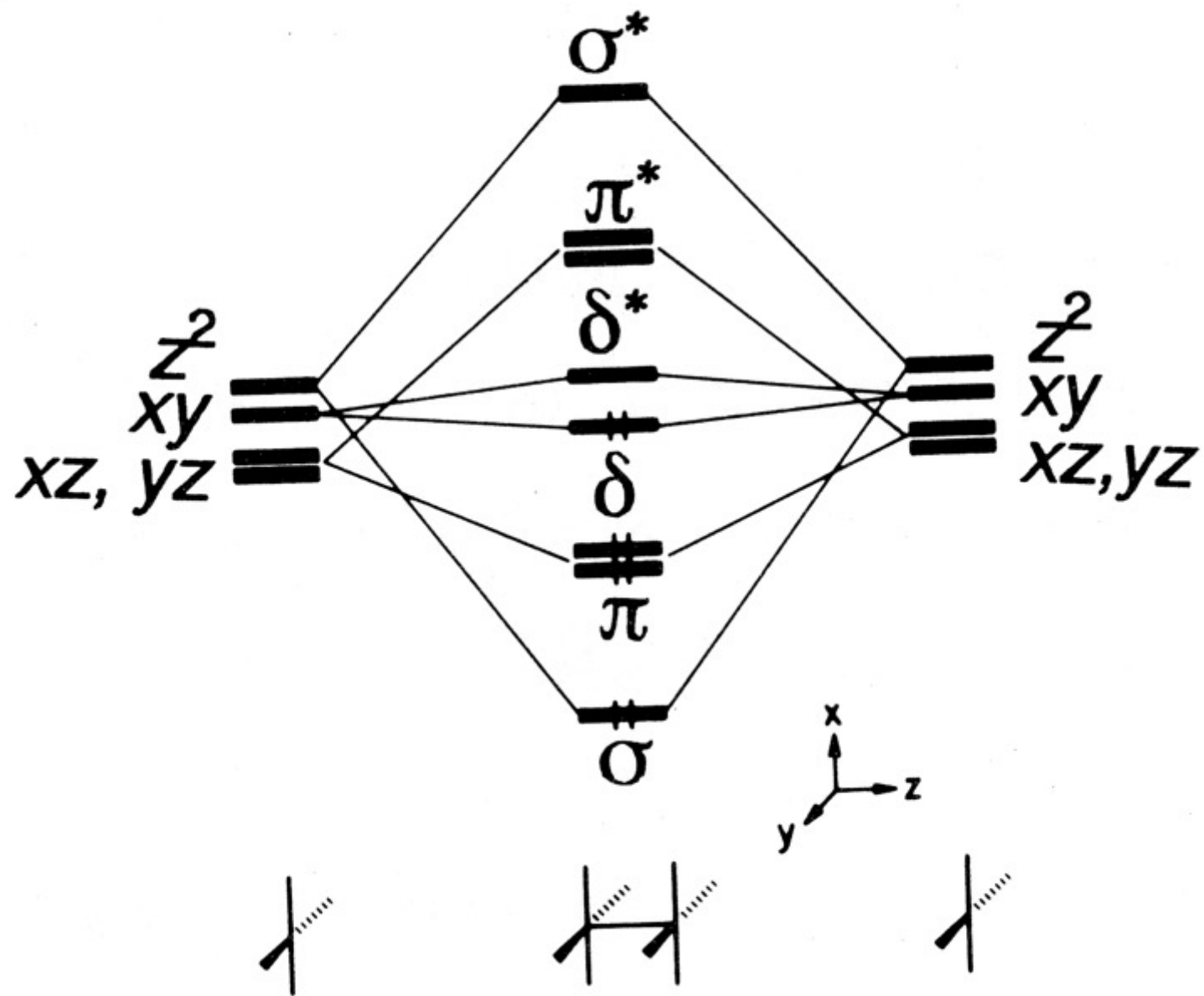




15

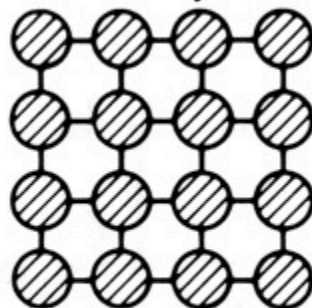




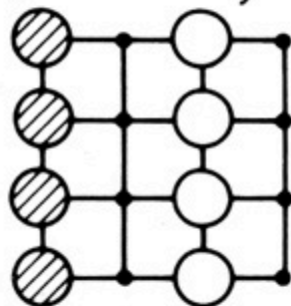


Γ

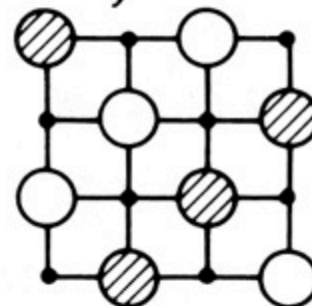
$$k_x=0, k_y=0$$



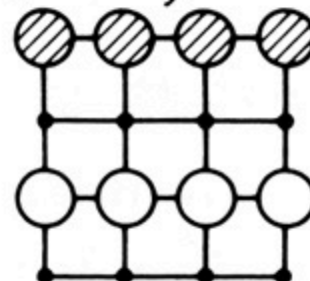
$$k_x=\pi/(2a), k_y=0$$



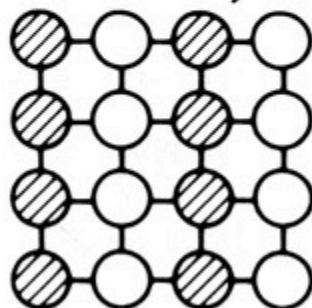
$$k_x, k_y = \pi/(2a)$$



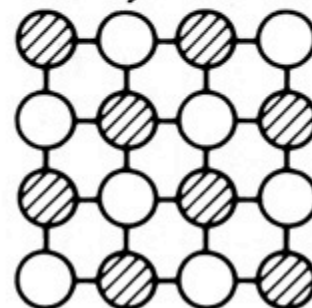
$$k_x=0, k_y=\pi/(2a)$$



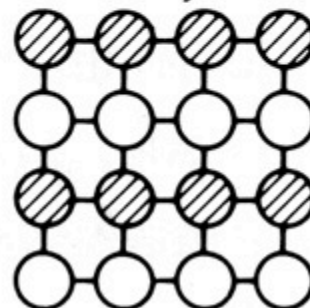
$$k_x=\pi/a, k_y=0$$

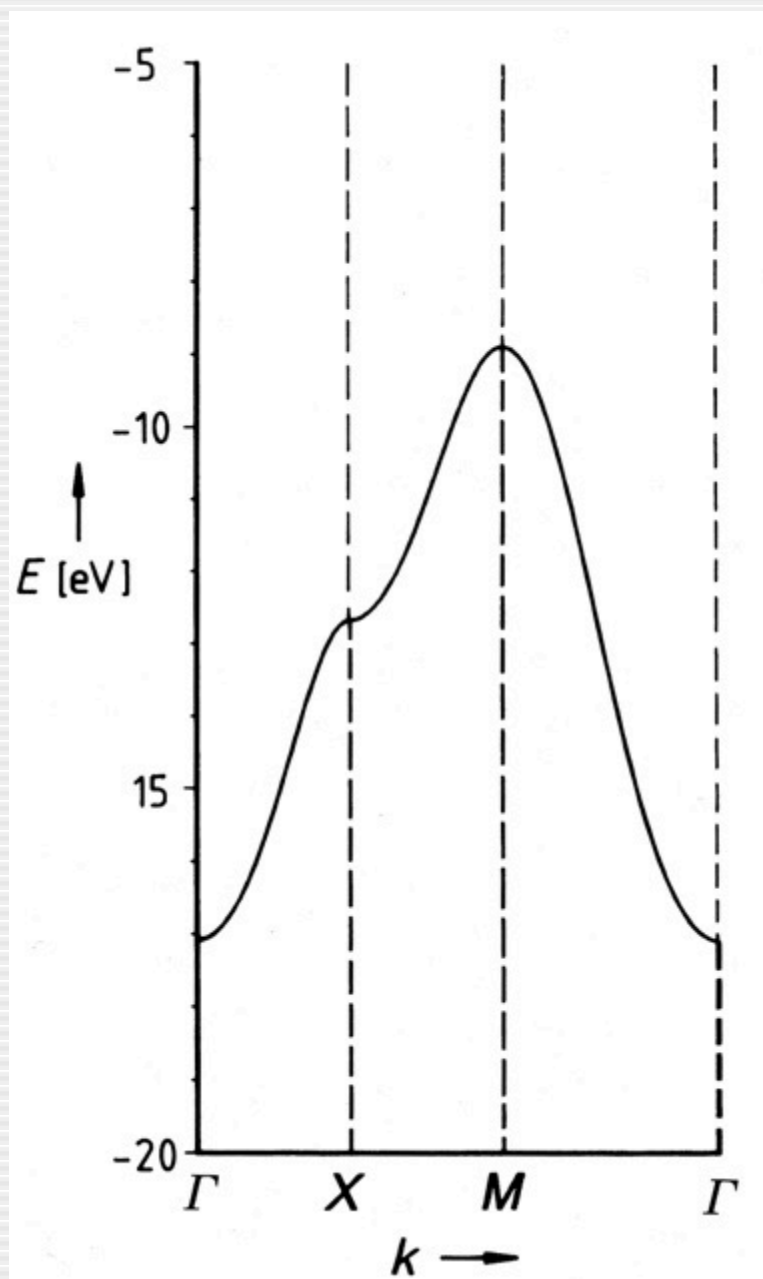
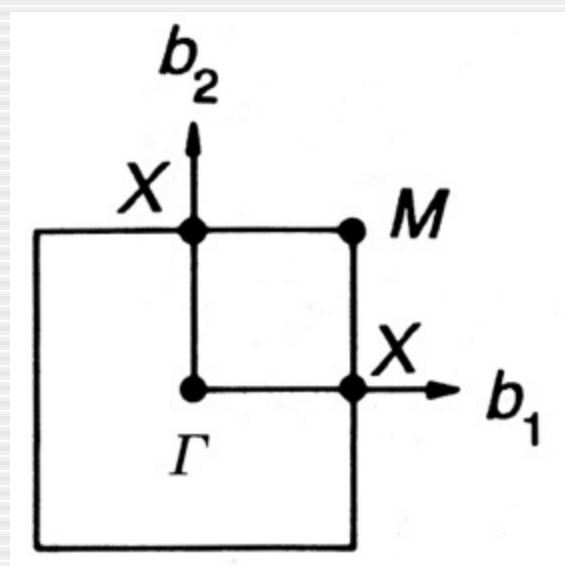
 X

$$k_x, k_y = \pi/a$$

 M

$$k_x=0, k_y=\pi/a$$

 X



共有結合

2つの原子が不対電子を出し合い、結合を形成

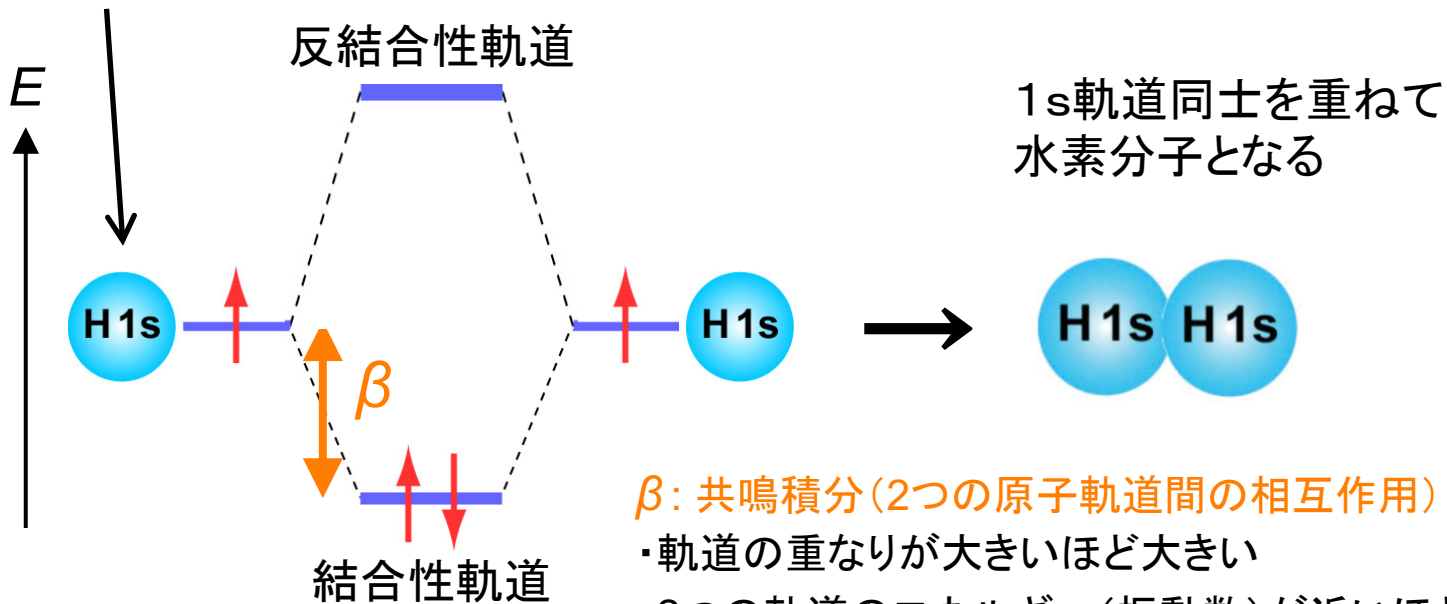


共有電子対



電子が両方の水素原子核の正電荷を感じて安定化する

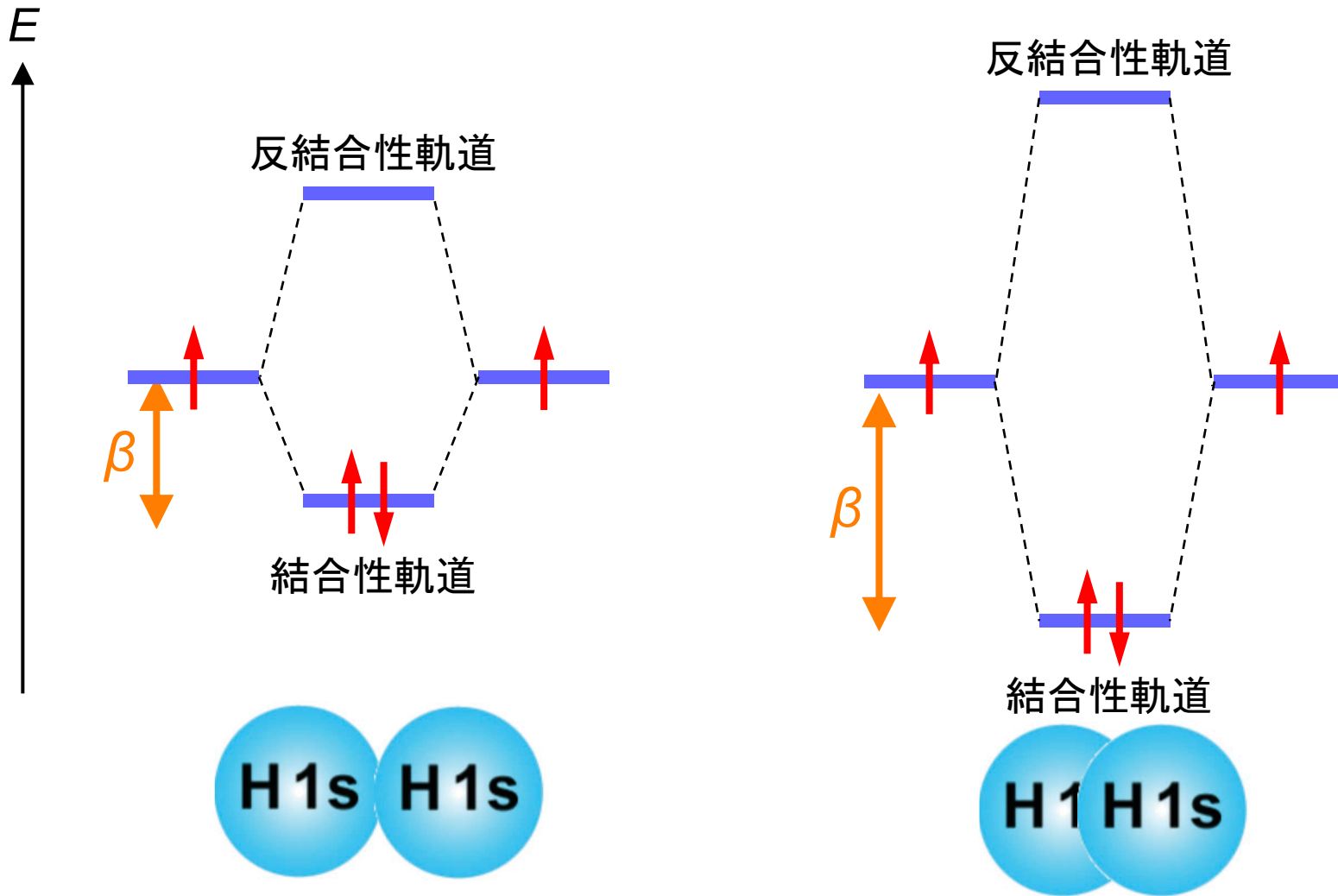
水素原子の
電子の軌道(軌道)



β : 共鳴積分(2つの原子軌道間の相互作用)

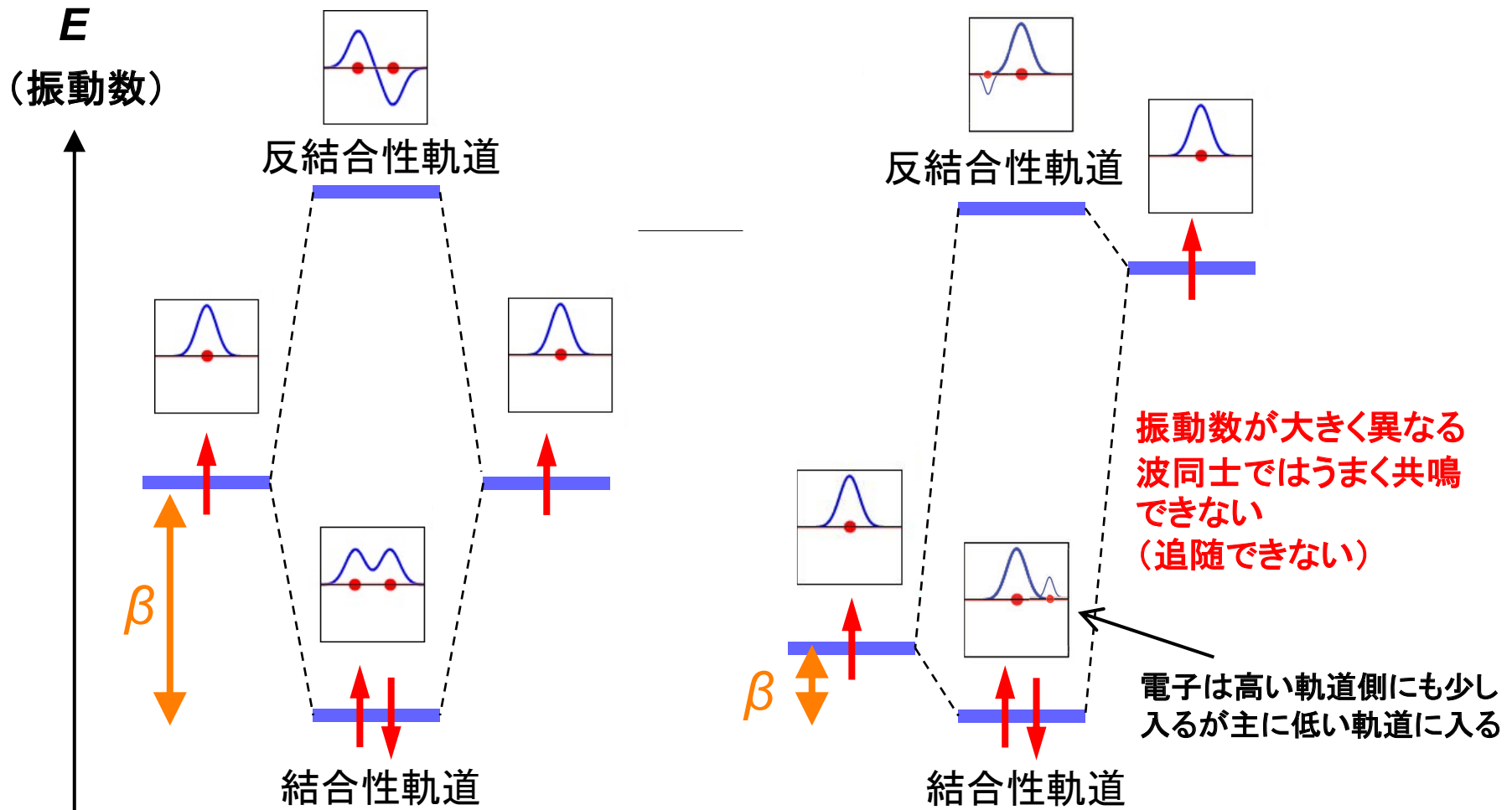
- ・軌道の重なりが大きいほど大きい
- ・2つの軌道のエネルギー(振動数)が近いほど大きく共鳴する

共有結合



2つの軌道の重なりが大きいほど共鳴積分は大きい

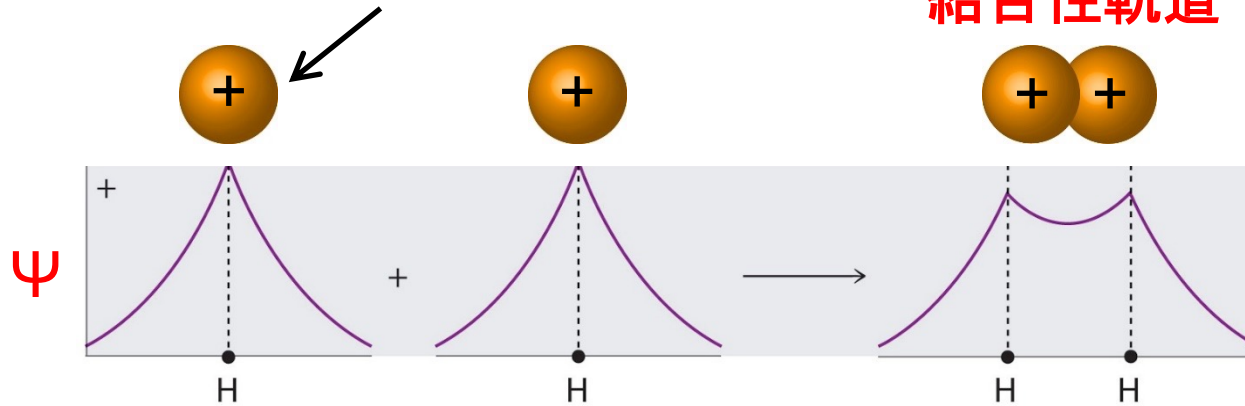
電子には波の性質もある



2つの軌道のエネルギー(振動数)が近いほど共鳴積分は大きい

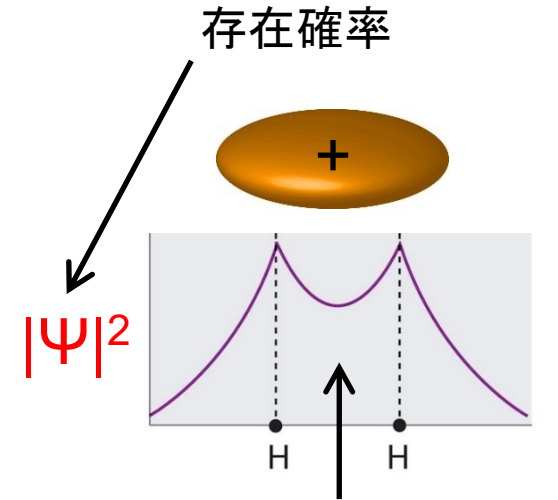
共有結合

H• 水素原子の電子の軌道(軌道)

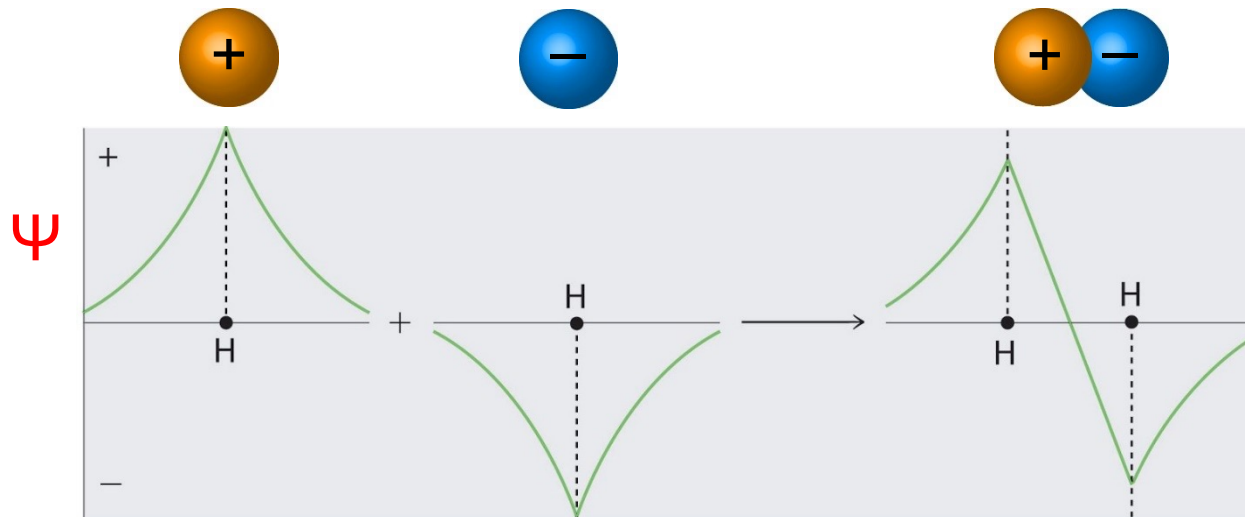


電子は波としても振る舞うので
正負(位相)がある
(電荷ではないので注意)

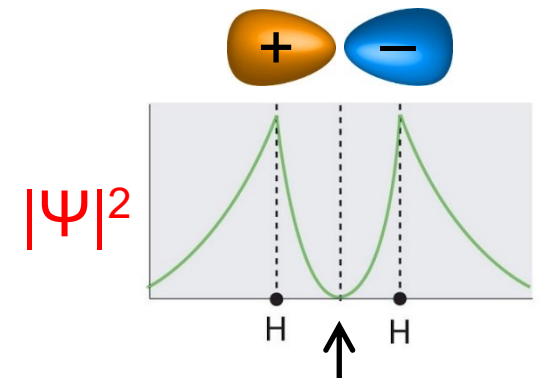
結合性軌道



2つの水素原子間の
電子の存在確率:大



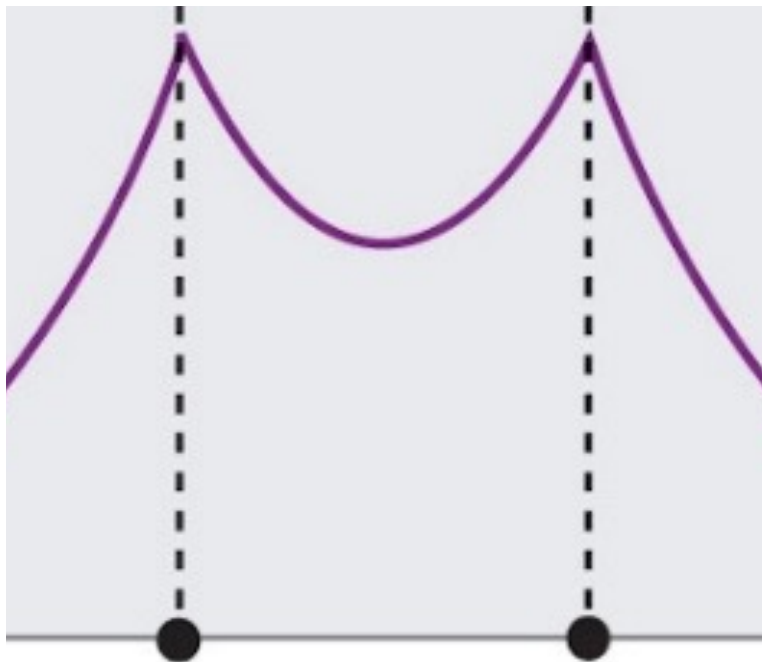
反結合性軌道



2つの水素原子間の
電子の存在確率:小

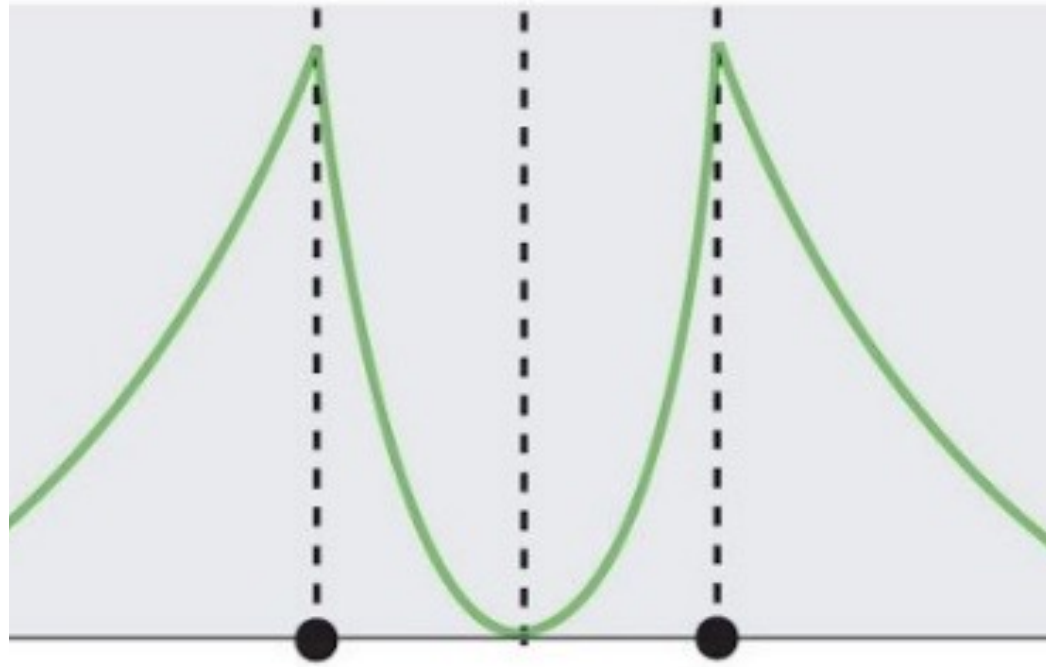
共有結合

結合性軌道



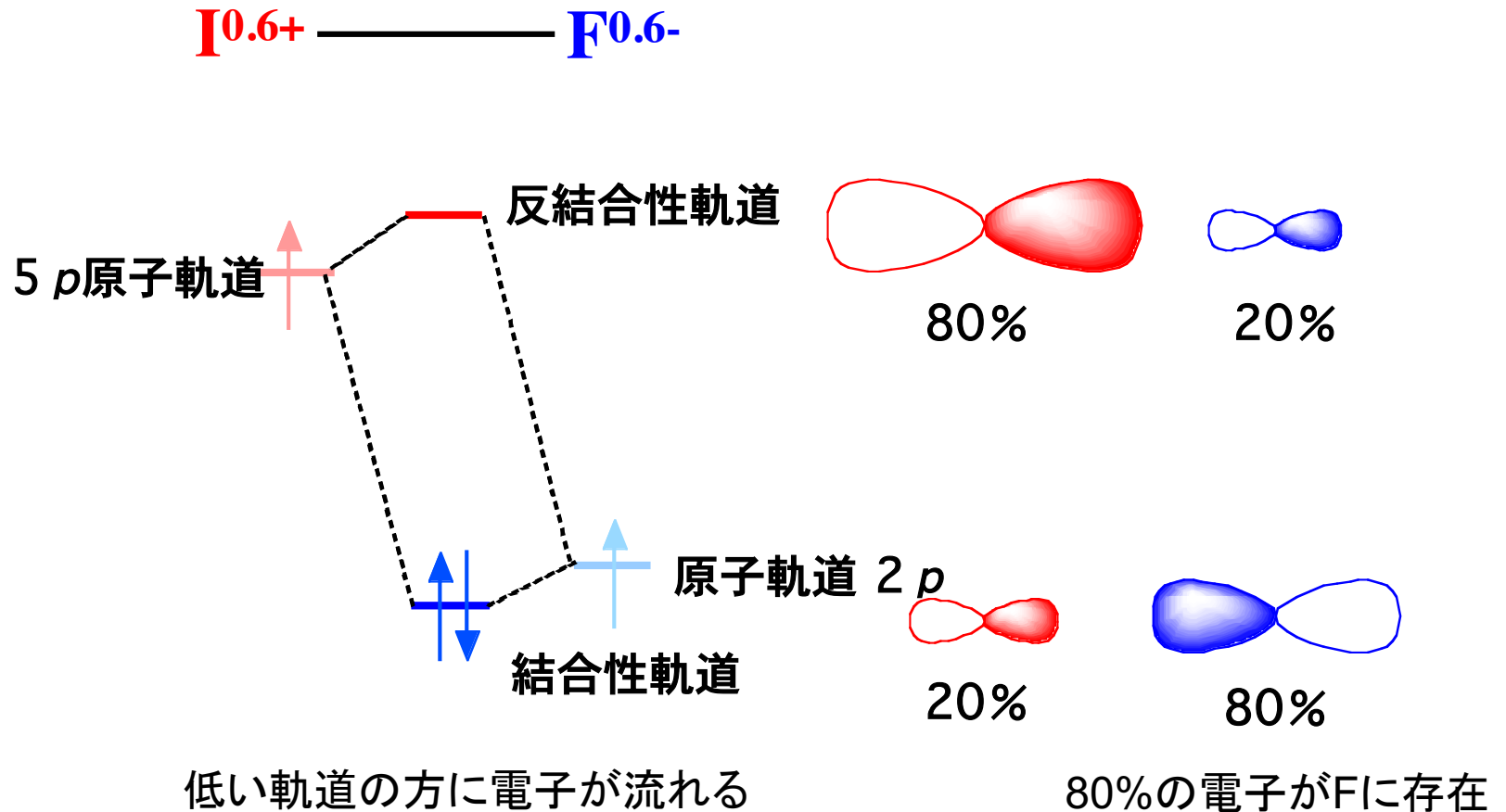
引き付けられる

反結合性軌道



引き離す

共有結合（イオン結合性有り）



軌道のエネルギー差 → 共有結合が弱まり、イオン結合性（極性）が強くなる
→ イオン結合とは？（次ページ）

テクネチウム : Tc

Pure metals at Sigma-Aldrich

visit sigma-aldrich.com/metals for details

H																	He		
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg													Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac	104	105	106														

Pure metals at Sigma-Aldrich

visit sigma-aldrich.com/metals for details

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

1 **H**
水素 Hydrogen
1 Hydrogen
水素は、宇宙に最も多く存在する元素で、地球でも水や有機物の成分として存在する。原子番号1、原子量1.008。

2 **Li**
リチウム Lithium
リチウムは、軽金属で、電池や合金に用いられる。原子番号3、原子量6.94。

3 **Na**
ナトリウム Sodium
11 Sodium
ナトリウムは、塩化ナトリウム（食塩）の成分として知られる。原子番号11、原子量22.99。

4 **K**
カリウム Potassium
19 Potassium
カリウムは、植物の成長に必要で、肥料や医薬品に用いられる。原子番号19、原子量39.10。

5 **Rb**
ルビウム Rubidium
37 Rubidium
ルビウムは、光学的な性質からレーザーや時計に用いられる。原子番号37、原子量85.47。

6 **Cs**
セシウム Cesium
55 Cesium
セシウムは、原子時計の基準として用いられる。原子番号55、原子量132.91。

7 **Fr**
フランシウム Francium
87 Francium
フランシウムは、放射性元素で、自然界にはほとんど存在しない。原子番号87、原子量223.02。

8 **C**
炭素 Carbon
6 Carbon
炭素は、生命の基盤となる元素で、ダイヤモンドやグラファイトの成分として知られる。原子番号6、原子量12.01。



金属の分類

日本では、金属は、鉄、ベースメタル、貴金属、レアメタルなどに分類されている。貴金属の中で、**Pt、Pd、Rh、Ru、Ir、Os** は、**PGM (Platinum Group Metal)** と呼ばれる。

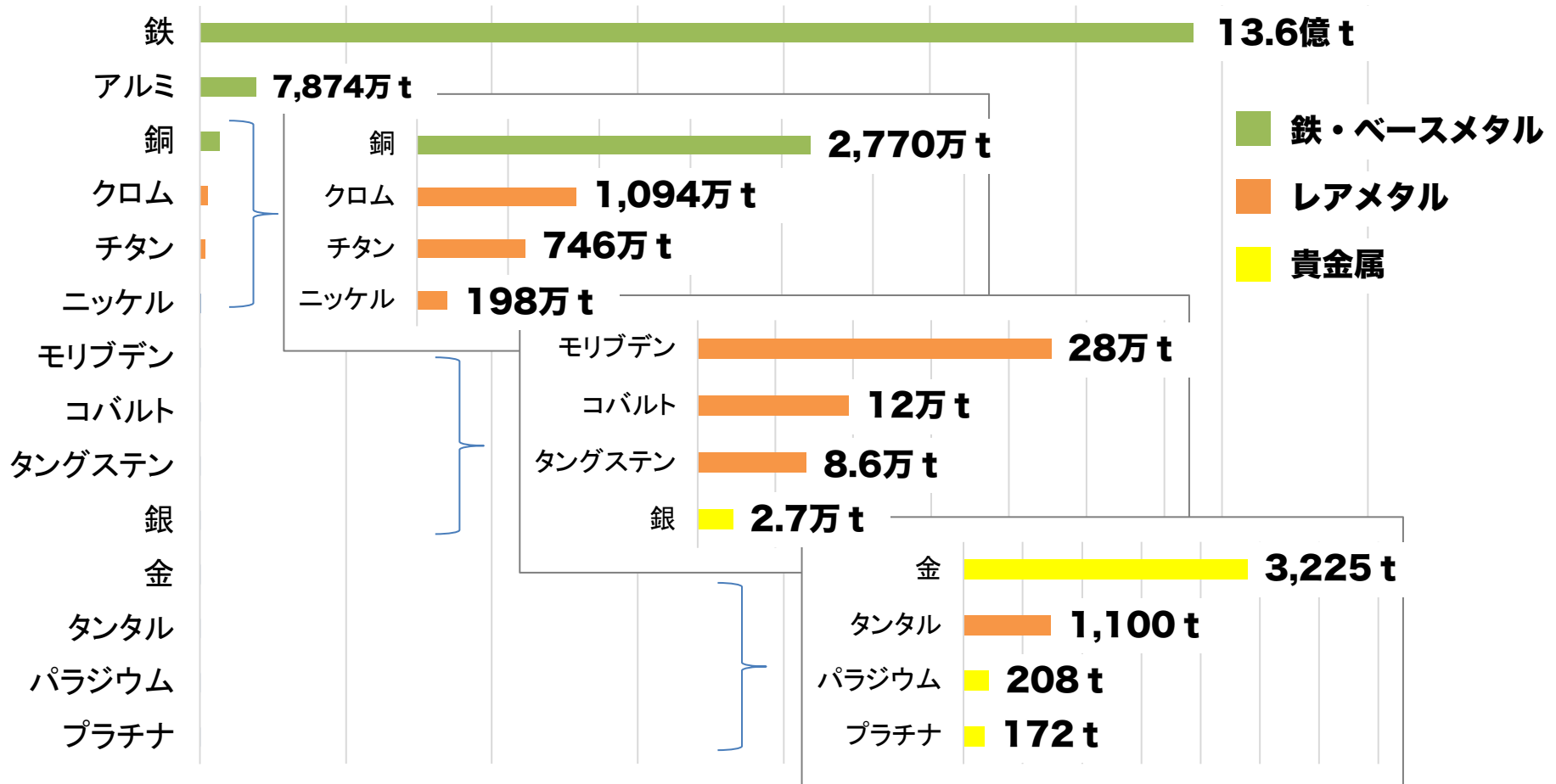
族 周期	I A	II A	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII	I B	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	O		
	アルカリ族	アルカリ土族	希土族	チタン族	バナジウム族	クロム族	マンガン族	鉄族(4周期) 白金族(5・6周期)	銅族	亜鉛族	アルミニウム族	炭素族	窒素族	酸素族	ハロゲン族	不活性ガス族		
1	1 H 水素	鉄、ベースメタル 貴金属 レアアース その他レアメタル														2 He ヘリウム		
2	3 Li リチウム	4 Be ベリリウム											5 B ホウ素	6 C 炭素	7 N 窒素	8 O 酸素	9 F フッ素	10 Ne ネオン
3	11 Na ナトリウム	12 Mg マグネシウム											13 Al アルミニウム	14 Si ケイ素	15 P リン	16 S イオウ	17 Cl 塩素	18 Ar アルゴン
4	19 K カリウム	20 Ca カルシウム	21 Sc スカンジウム	22 Ti チタン	23 V バナジウム	24 Cr クロム	25 Mn マンガン	26 Fe 鉄	27 Co コバルト	28 Ni ニッケル	29 Cu 銅	30 Zn 亜鉛	31 Ga ガリウム	32 Ge ゲルマニウム	33 As ヒ素	34 Se セレン	35 Br 臭素	36 Kr クリプトン
5	37 Rb ルビウム	38 Sr ストロンチウム	39 Y イットリウム	40 Zr ジルコニウム	41 Nb ニオブ	42 Mo モリブデン	43 Tc テクネチウム	44 Ru ルテニウム	45 Rh ロジウム	46 Pd パラジウム	47 Ag 銀	48 Cd カドミウム	49 In インジウム	50 Sn スズ	51 Sb アンチモン	52 Te テルル	53 I ヨウ素	54 Xe キセノン
6	55 Cs セシウム	56 Ba バリウム	57~71 ランタノイド	72 Hf ハフニウム	73 Ta タンタル	74 W タングステン	75 Re レニウム	76 Os オスミウム	77 Ir イリジウム	78 Pt 白金	79 Au 金	80 Hg 水銀	81 Tl タリウム	82 Pb 鉛	83 Bi ビスマス	84 Po ポロニウム	85 At アスタチン	86 Rn ラドン
7	87 Fr フランシウム	88 Ra ラジウム	89~103 アクチノイド	104 Rf ラザホーニウム	105 Db ドブニウム	106 Sg シーボギウム	107 Bh ホーリウム	108 Hs ハッシウム	109 Mt マイタネリウム	110 Ds ダウムスタチウム	111 Rg レントゲニウム	112 Cn コペルニシウム	113 Nh ニホニウム	114 Fl フレロビウム	115 Mc モスコビウム	116 Lv リバモリウム	117 Ts テネシン	118 Og オガネソン

	鉄、ベースメタル
	貴金属
	レアアース
	その他レアメタル

ランタノイド	57 La ランタン	58 Ce セリウム	59 Pr プラセオジム	60 Nd ネオジム	61 Pm プロメチウム	62 Sm サマリウム	63 Eu ユウロピウム	64 Gd ガドリニウム	65 Tb テルビウム	66 Dy ジスマンシウム	67 Ho ホルミウム	68 Er エルビウム	69 Tm ツリウム	70 Yb イットルビウム	71 Lu ルテチウム
アクチノイド	89 Ac アクチニウム	90 Th トリウム	91 Pa プロトアクチニウム	92 U ウラン	93 Np ネプツニウム	94 Pu プルトニウム	95 Am アメリシウム	96 Cm キュリウム	97 Bk バークリウム	98 Cf カリホルニウム	99 Es アインシュタインウム	100 Fm フェルミウム	101 Md メンデルレービウム	102 No ノーベルリウム	103 Lr ローレンシウム

金属の生産量比較 (2016年)

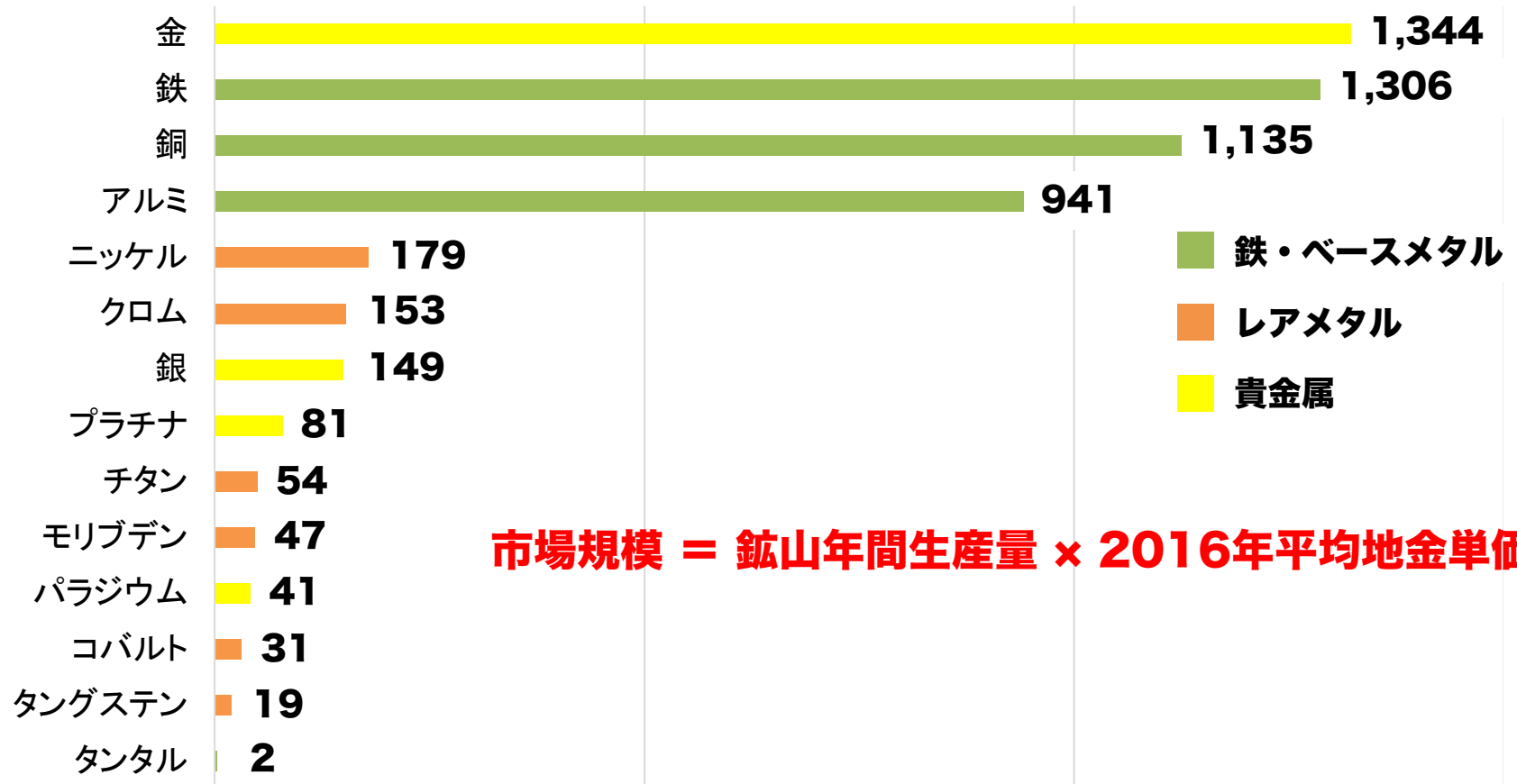
貴金属は金属の中で最も希少な金属。(レアメタルよりもレアなメタル)



金属の市場規模比較 (2016年)

PGMは地金単価が高く、市場規模ではレアメタルと同等。

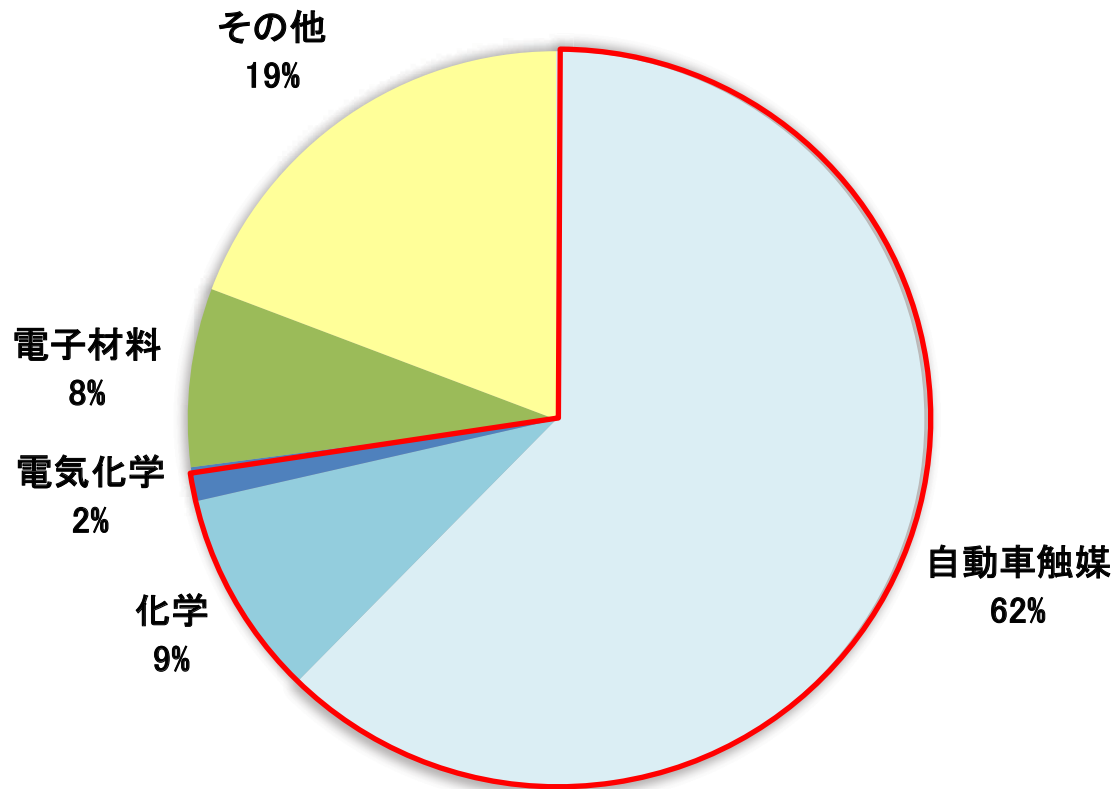
単位：億US\$



市場規模 = 鉱山年間生産量 × 2016年平均地金単価

PGMの需要 (2017年)

2017年のPGM需要：
624.8 t の約**73%**が触媒用途で使用されている。



PGM価格の推移

資源量が少ないことから、PGM価格は需給動向で大きく変動

ロジウム価格推移：円/g

