

2190：金属結合

(金属元素の特有な性質は、金属原子の自由電子による結合に起因します)

キーワード：金属元素；非金属元素；電気陰性度；不確定性原理；イオン化エネルギー；金属水素

鉄、アルミニウム、鉛などの金属は次のような共通の性質を持っています。それらは1. 光を反射する、2. 電気を通す、3. 熱を通す、4. 粘性・展性を持つ。このような性質は金属結合による物質の特徴といわれています。金属結合は原子間の“自由電子 (free electron)”による結合です。結合の形式は、原子核間に存在する電子に両方の原子核が引き寄せられるタイプの結合 (2160 を参照) ですが、特徴は、その電子が自由に動きまわることです。自由電子による結合が1~4に示す金属の性質を発現します。

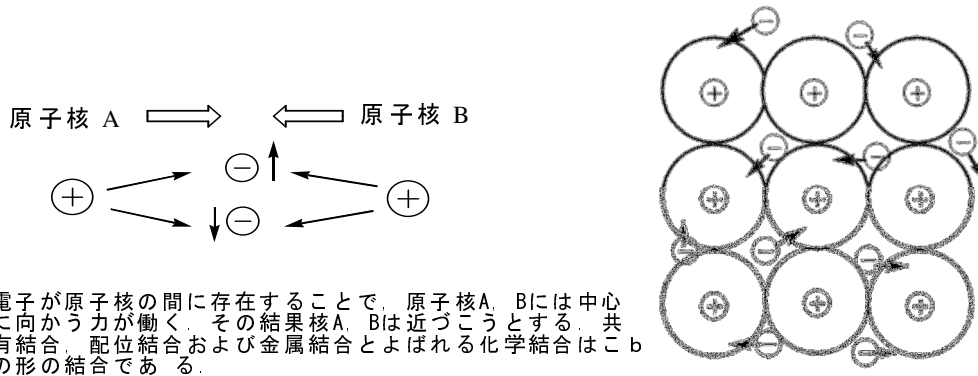


図1. 金属結合の結合形式。右図は電子が原子核間を自由に運動する様子。

金属元素は周期律表の左側の下の方ではより多く存在します。ちょうど電気陰性度の逆になります。電子の運動を束縛する原子核の (正電荷の) ポテンシャルの影響が少ないと電子は自由に運動できるようになりますので、電気陰性度と逆になる理由は理解できます。

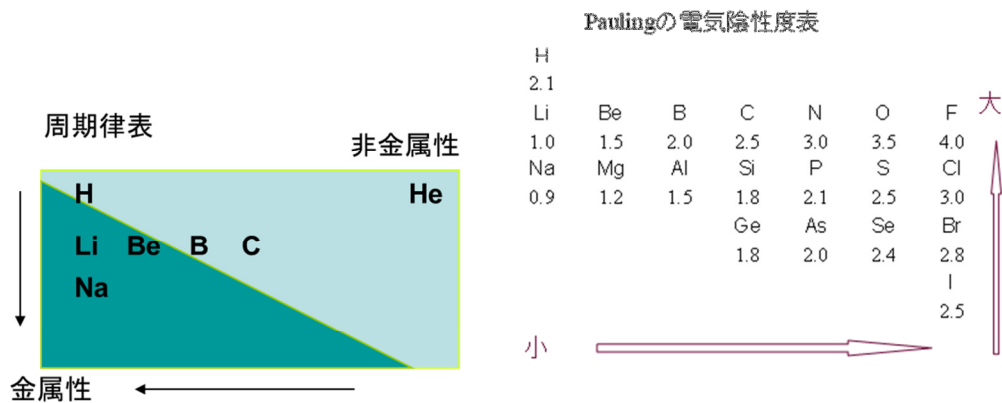


図2. 周期律表上の金属元素。青の領域にある元素は金属の性質を持つ。

元素の金属・非金属の性質と第一イオン化エネルギー（2120 を参照）には比較的是っきりした関係がみられます。次表に示します。第一イオン化エネルギーが大きいほど、価電子に対する原子核のポテンシャルが大きいと予想されます。多少バラツキはありますが、約 800kJ/mol より小さな元素は金属元素のようです。

表. 金属 vs. 非金属 と第一イオン化エネルギー (kJ/mol)

H							He
1312							2372
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
520	900	801	1087	1402	1314	1681	2081
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
496	738	578	787	1012	1000	1251	1521
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
419	590	579	762	947	941	1140	1351
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
403	550	558	709	834	869	1008	1170

青色は金属元素，赤は非金属元素，紫は中間的元素

金属結合は結晶状態では、結晶構造による決まった結合角と結合の本数（一つの原子が結びつく原子の数。これを**配位数 (coordination number)** とよびます）を有しますが、液体や非結晶状態では定まった配位数はありません。この性質が金属に粘性・展性を与えています。

一方、自由電子が金属光の反射の性質を担っています。自由電子のエネルギー準位も量子化されていますが、運動範囲が広いと励起状態のエネルギー準位の幅はとても狭くなっていて、連続状態とみなせます。そのため、どのような波長の光も吸収し励起状態となります。励起状態になった電子は直ちに吸収した光の波長と同じ電磁波（光）を放出します。

ここで、電子の運動範囲が広がるとなぜエネルギー準位差が小さくなるかという問題を考えましょう。これは、主量子数が大きくなると準位間のエネルギー差が小さくなることと概念的には同じです。

1230 で、一辺が L の立方体に入っている電子の（運動）エネルギーは、

$$E(n_x, n_y, n_z) = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{h^2}{8mL^2} \quad 1$$

で表されることを述べました。 m は電子の質量で、 n_x, n_y, n_z は**量子数 (quantum number)** とよばれ、それぞれ独立に 1, 2, 3, ... の自然数をとります。 $n_x = n_y = n_z = 1$ は基底状態で

す.

1式から、 $E(1,1,1)$ から $E(2,1,1)$ のエネルギー差は、 $L=1$ (Å) のときは $3\left(\frac{h^2}{8m}\right)$ です。 $L=2$ と

なると、エネルギー差は1/4になり、 $L=3$ では1/8となります。このように電子の運動範囲が広がるほどエネルギー準位差は小さくなるのです。

金属結合の自由電子の運動範囲は無限といえるほど広いので、エネルギー準位差は連続的になっています。そのため、どのようなエネルギーの（“どのような波長”と同意）光でも吸収・放出が起こるといえることです。

[余談：金属水素]

水素原子も、超高压にすると金属になり、木星、土星の中心付近は金属水素であると推定されています。超高压では、水素原子の電子の平均軌道半径が狭まります。これは電子の存在位置の曖昧さを小さくすることに相当し、不確定性関係により**電子の運動エネルギーが増大**し、激しい電子の運動のため電子特定の原子核に固定されなくなります（1220を参照）。電子の運動エネルギーが非常に大きくなるため、ポテンシャルエネルギーの影響が相対的に少なくなります。そのため電子は自由電子のようにふるまいます。

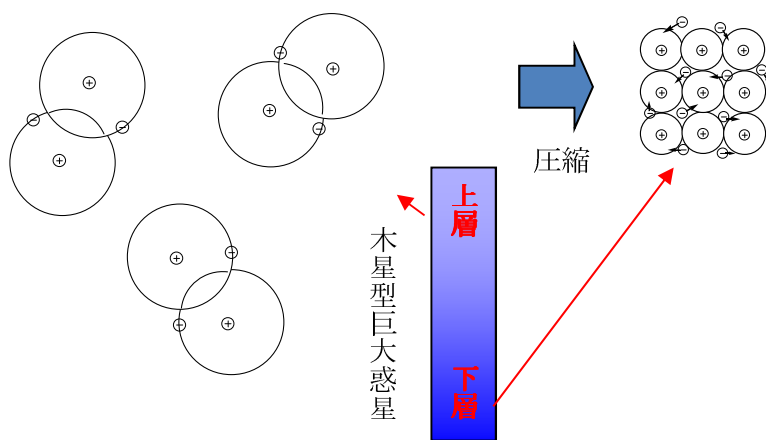


図3. 水素は常圧では H_2 分子として気体で存在する（図左）。超高压下では原子軌道が縮小することで、電子の運動エネルギーが増大し、自由電子となる。

1) 原子核や他の電子の影響のない（少ない）空間にある電子。