

第五回:『多電子原子の電子構造, 電子配置』(今回は問題が2ページある. 提出先:29号館 1104号室)  
スレーターの規則を使った有効核電荷(ある電子から見た, 他の電子による反発分を差し引いた実効的な原子核の電荷)の計算は非常に重要であるので, ここで復習として計算になれておくこと.  
スレーターの規則は, 以下のようなものである.

(a)自分(=注目している電子)より主量子数が大きい電子は外側に居るので, 遮蔽効果はゼロ.

(b)自分と同じ主量子数の電子による遮蔽効果は, 1電子につき 0.35.

(本来は, 1s電子同士の反発の係数は特別に 0.30だが, その差はここでは無視してよい)

(c)自分より主量子数が1小さい電子による遮蔽は, 1電子につき 0.85.

(d)自分より2以上主量子数が小さい電子は, 自分に比べてものすごく原子核に近いところに居るので, 遮蔽効果は1電子につき1(1つの電子で, 原子核の電荷1をちょうど打ち消せる).

※本来のスレーターの規則ではd電子やf電子の取り扱いに関していくつか規則があるのだが, ここではそれは無視することにする. また, スレーターの規則は荒い近似なので, s軌道とp軌道の差は扱えない.

問1. 炭素原子(C)について考える. 原子番号は6, 電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ である.

(1) 1s軌道の電子から見た, 有効核電荷を計算せよ. (0.25点)

(2) 最外殻の電子(2sおよび2pの電子)から見た, 有効核電荷を計算せよ. (0.25点)

(3) +1価のイオン( $C^+$ )の場合, 最外殻の電子から見た有効核電荷はいくつか? (0.25点)

(4) 炭素原子の一つ右隣の, 窒素原子の最外殻電子から見た有効核電荷を計算せよ.

なお, 窒素原子の原子番号は7, 電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ である. (0.25点)

問2. 炭素などの原子では, 2p軌道のエネルギーの方が2s軌道のエネルギーよりやや高い(このため先に2s軌道が埋まる). この理由を簡単に説明せよ. (0.5点)

問 3.

(1) 酸素原子(O)の 2s 軌道と, 周期表で一つ下の硫黄原子(S)の 2s 軌道では, どちらの電子の方が原子核に強く引っ張られているかを, 有効核電荷を計算することで求めよ.

なお, それぞれの原子の電子配置は  $O:(1s)^2(2s)^2(2p)^4$ ,  $S:(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4$  である. (0.25 点)

(2) 酸素原子の 2s の電子と, 硫黄原子の 2s の電子では, どちらの方がエネルギーが低いか? そのようになる理由も答えよ. (0.25 点)

問 4. ナトリウムは+1 価になりやすいが, +2 価にはなりにくい事を示そう.

(1) Na(原子番号 11, 電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$ )の最外殻電子から見た有効核電荷を計算せよ. (0.25 点)

(2)  $Na^+$ (原子番号 11, 電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ )の最外殻電子から見た有効核電荷を計算せよ. (0.25 点)

(3) ある電子の主量子数が  $n$ , その電子から見た有効核電荷が  $Z_{eff}$  であるとき, 原子からその電子を引き抜くのに必要なエネルギーは  $E_0 \times (Z_{eff} \div n)^2$  で近似できる( $E_0$ はある定数).

中性の Na から電子を引き抜くのに必要なエネルギーと,  $Na^+$ からさらに電子を引き抜いて  $Na^{2+}$ にするのに必要なエネルギーを求め, Na を 0 価から+1 価にするのに比べて, +1 から+2 にするには非常に大きなエネルギーが必要である事(=+2 価にはなりにくいこと)を示せ. (0.5 点)

※通常, 一番エネルギーが高くて引き抜きやすい電子は最外殻の電子なので, 今の場合には最外殻の電子を引き抜くエネルギーについて考えれば良い.