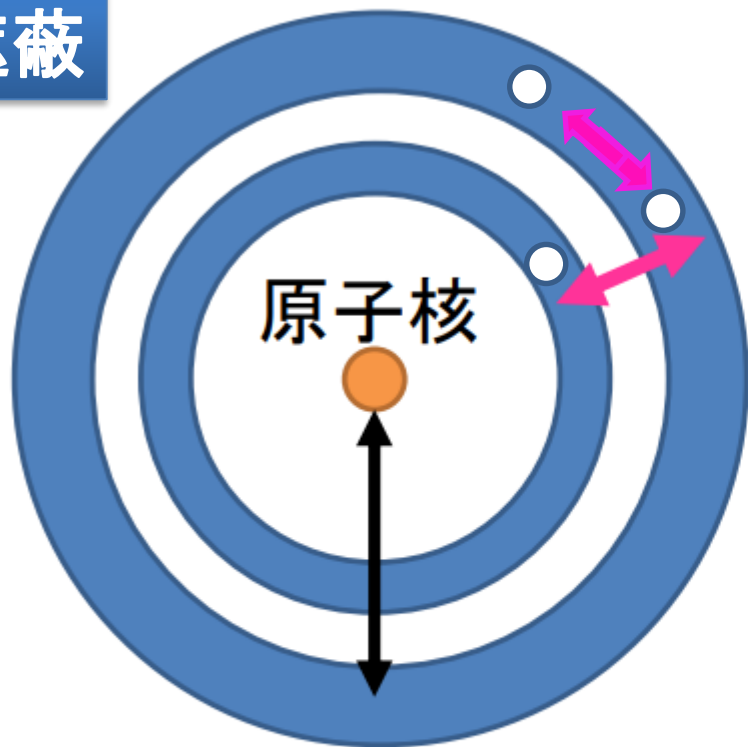


3. 遮蔽効果, 有効核電荷

4. スレーターの規則

Text p.19, 20

遮蔽



クーロン引力
(エネルギーを低く)

クーロン反発
(エネルギーを高く)

電子が受けている力

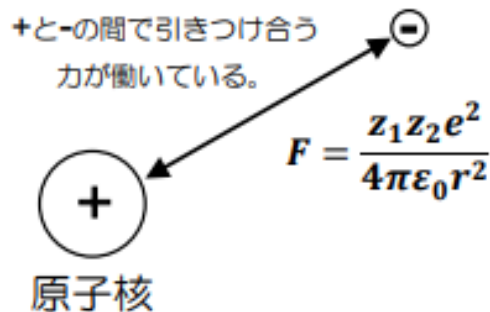
原子核からのクーロン引力

+

内側の電子によるクーロン反発

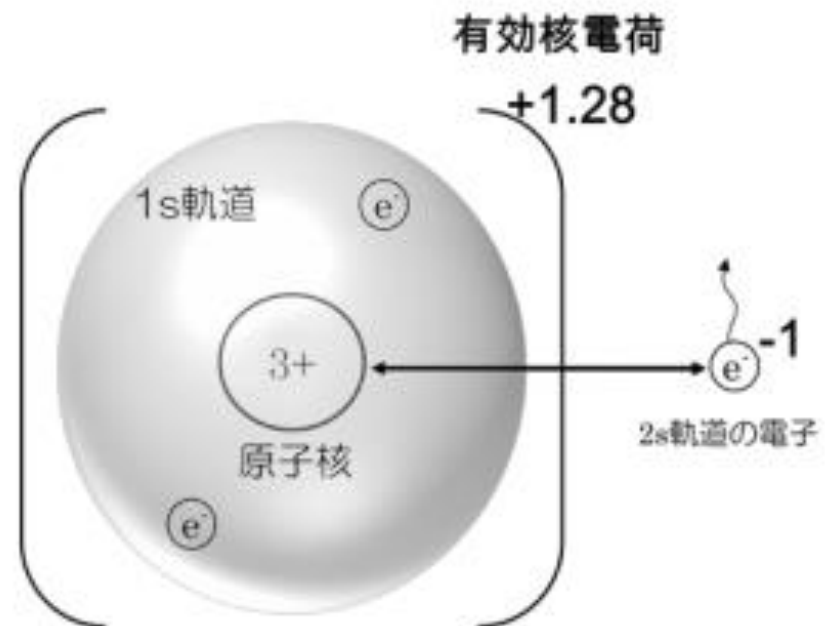
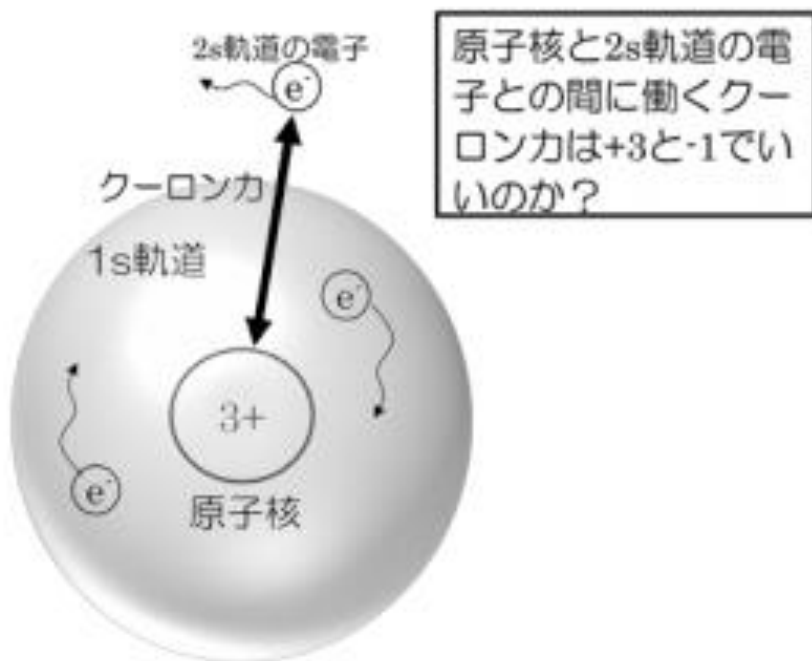
→ 電子によって原子核の
電荷が打ち消される(小さいと感じる)

遮蔽(しゃへい)

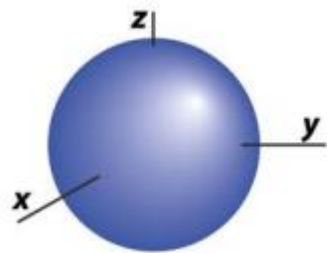


有効核電荷:
各電子が受け取る実質的な電荷

有効核電荷の考え方

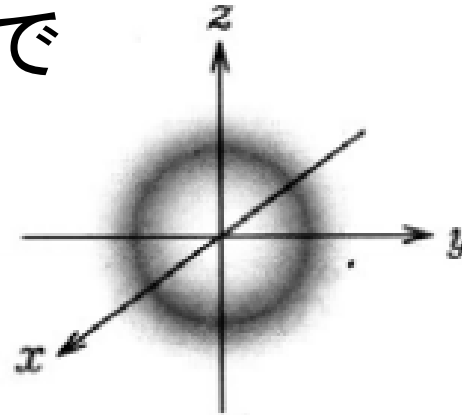


貫入



1s 軌道

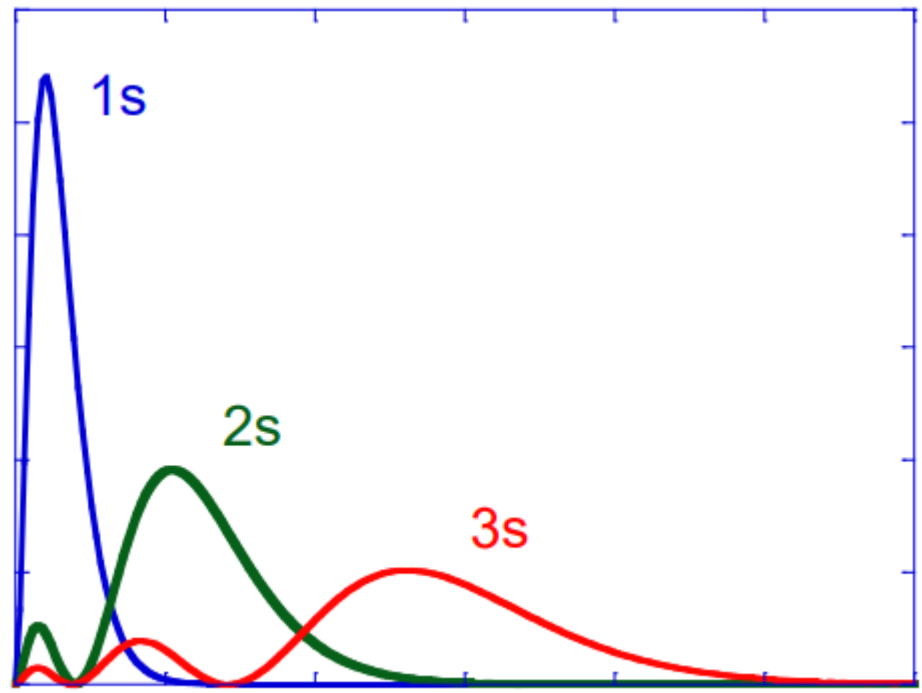
yz平面で切ると



1s 軌道の密度分布

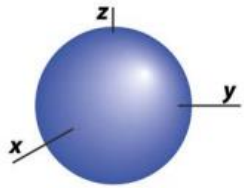
電子雲の図は最も電子密度の高いところを線で描いている (その線内の領域が電子の存在領域)

電子が距離 r に居る確率



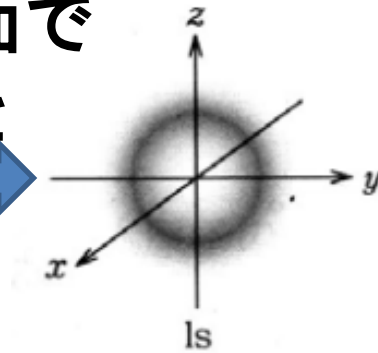
原子核からの距離

貫入



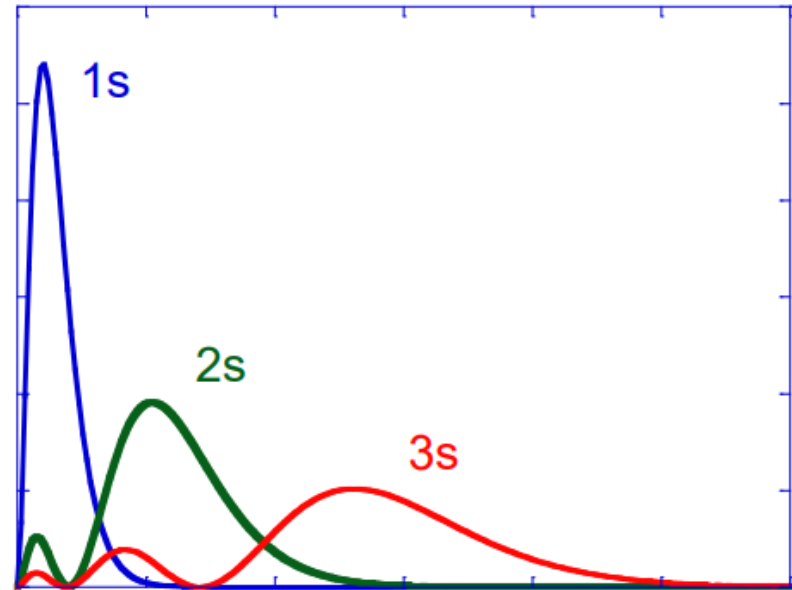
1s 軌道

yz平面で切ると



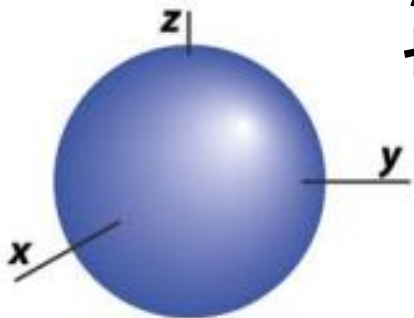
1s 軌道の密度分布

電子が距離 r に居る確率

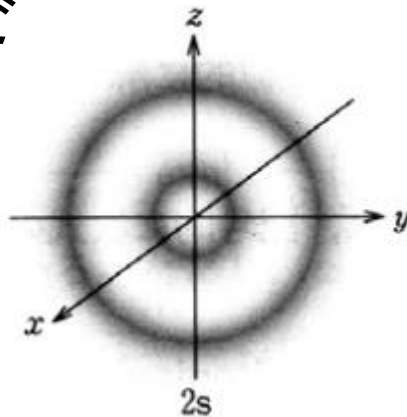


原子核からの距離

yz平面で切ると



2s 軌道



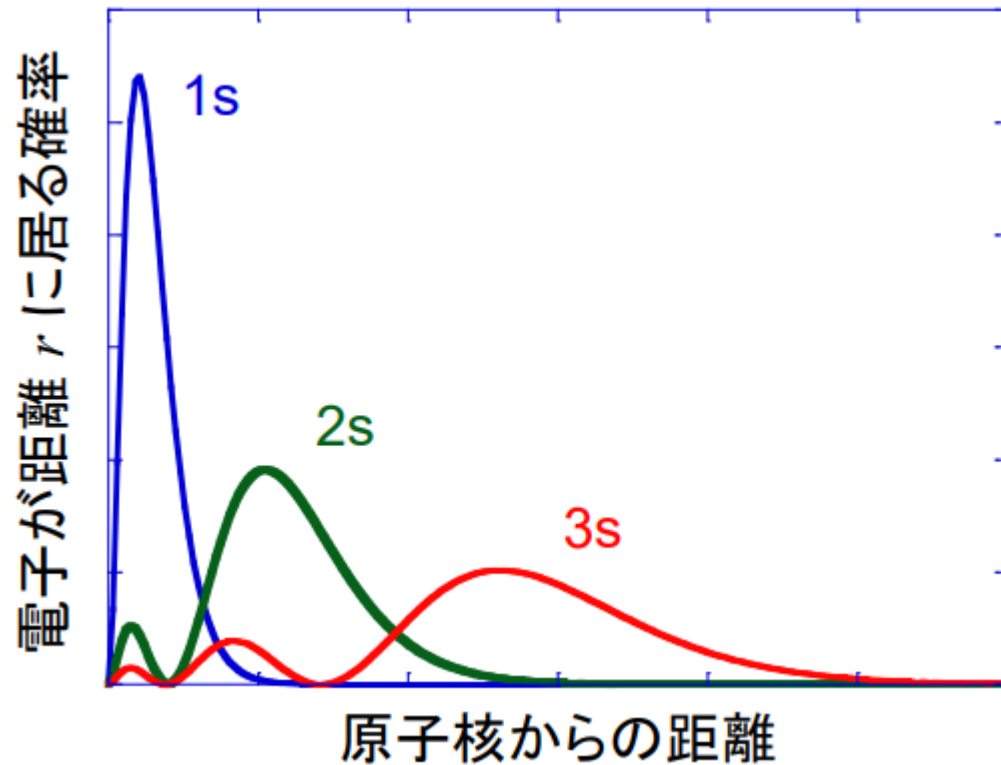
2s 軌道の密度分布

2s軌道の電子は、1s軌道の内側にまで入ってきている。
→これを

貫入

という。

貫入

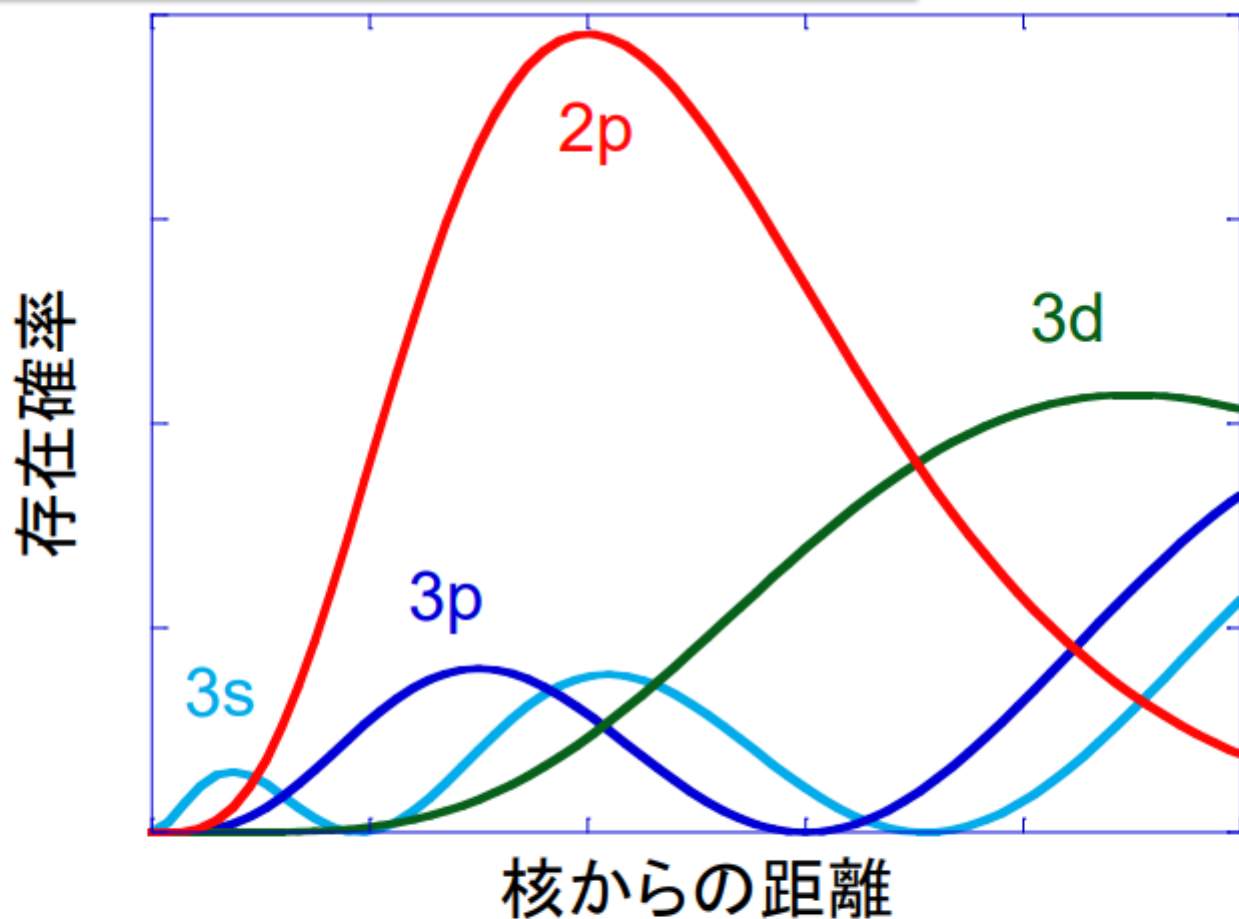


2s軌道の電子密度分布が最大の部分は
1s軌道の外側

→

たとえ電子が貫入していたとしても、
主量子数が大きい軌道のほうが外側

d軌道はp,s軌道より遮蔽の効果を大きく受ける



貫入の度合い $s > p > d$
遮蔽効果の受けやすさ $s < p < d$

有効核電荷を計算する

スレーターの規則

テキストp.20 1.5.2

本当は、電子が受けている力は

原子核からの引力 + 内側の電子による反発
(しかし厳密な計算は不可能)

そこで、

原子核の正電荷が小さくなり、
見た目の引力が弱くなっている

と大雑把な近似をしてしまう。
(正確では無いが、計算が楽)

有効核電荷 Z^* = 核電荷 Z - 遮蔽定数 S

スレーターの規則

まず、軌道を[s,p]のグループと[d]のグループに分ける。
(遮蔽効果が違うので → 貫入の度合いの違い)

原子中の、主量子数 n のある1つの電子への遮蔽

1. 主量子数が n より大きい電子は無関係
2. 同じグループの電子の遮蔽定数は0.35(*)
3. 主量子数が $n-1$ (1つ下)の電子による遮蔽は0.85
4. 主量子数が $n-2$ 以下の電子による遮蔽は1
5. 問題の電子が[nd]や[nf]の場合, 3. と4. は成立せず, その内側の各電子による遮蔽は1

無機化学レポート課題

(課題)

テキストp.19～p.20に記述されている 1.5有効核電荷 および遮蔽 の箇所を読み, スレーターの規則を理解して以下の問いに答えよ.

(問)カリウムKに対し, 実験的に観察された電子配置 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ が, それとは異なる電子配置 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1$ よりもエネルギー的に安定であることを確かめ, その過程を記せ.

なお, 書物・インターネットなどの情報をもとに作成した場合, 必ず(参考文献)として出典をレポート最後につけること.

(レポート作成上の注意事項)

1. 原則PCで作成し, Wordファイル, pdfファイルなどの形式でメールに添付して提出する. ページ数制限なし
2. メールを送信する際, 件名は必ず, 無機化学レポート とすること.
3. 1ページ目の最初に, 学籍番号, 氏名, 提出日を記載する.
4. PCで作成できない場合, 手書きでレポート用紙などに記述し, 写真を撮ってメールに添付する方法でも構わない.
5. メール受領後, 必ず返信をするので, 2日以内に返信のない場合は問い合わせること.
メールアドレス: iwamotok@u-shizuoka-ken.ac.jp

6. 他人のレポートをコピーしない

7. 提出期限: 学歴上の第3回講義日の12時まで(5月13日水)