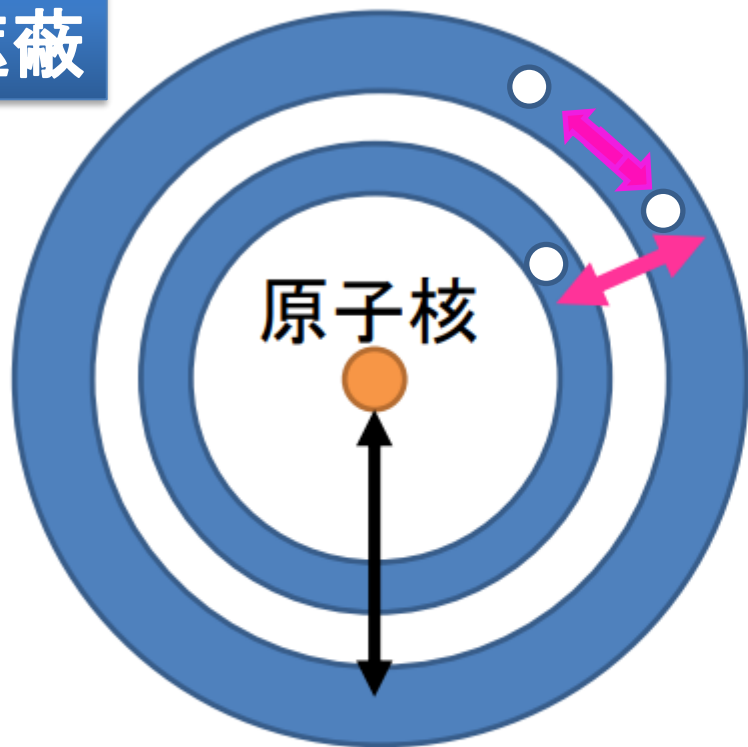


3. 遮蔽効果, 有効核電荷

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)

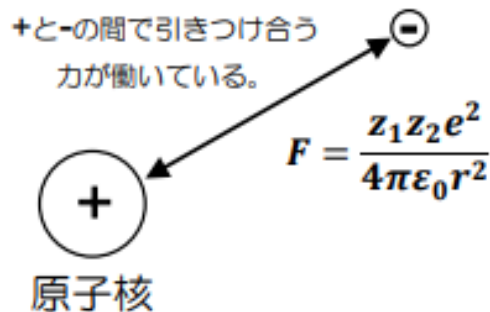
電子が受けている力

原子核からのクーロン引力

+

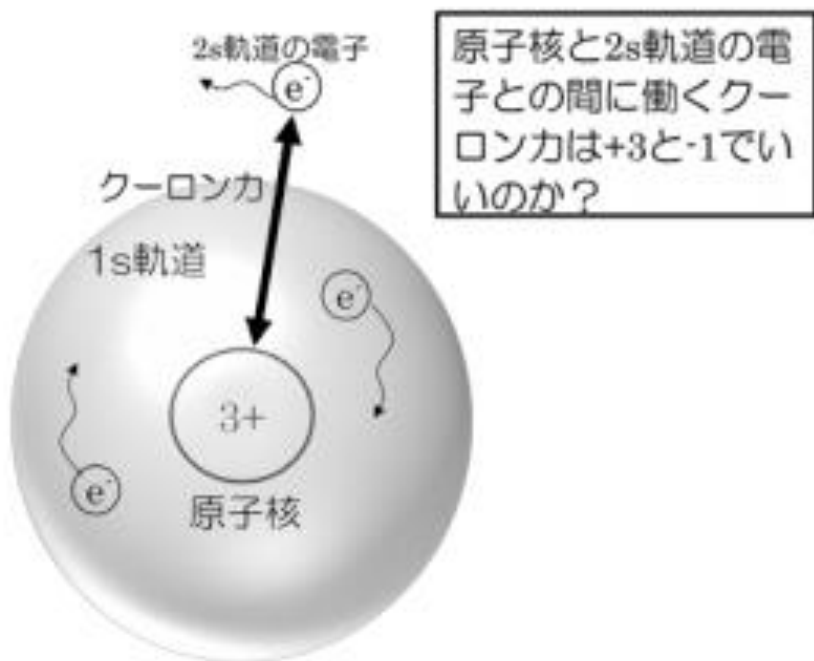
内側の電子によるクーロン反発

→ 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)

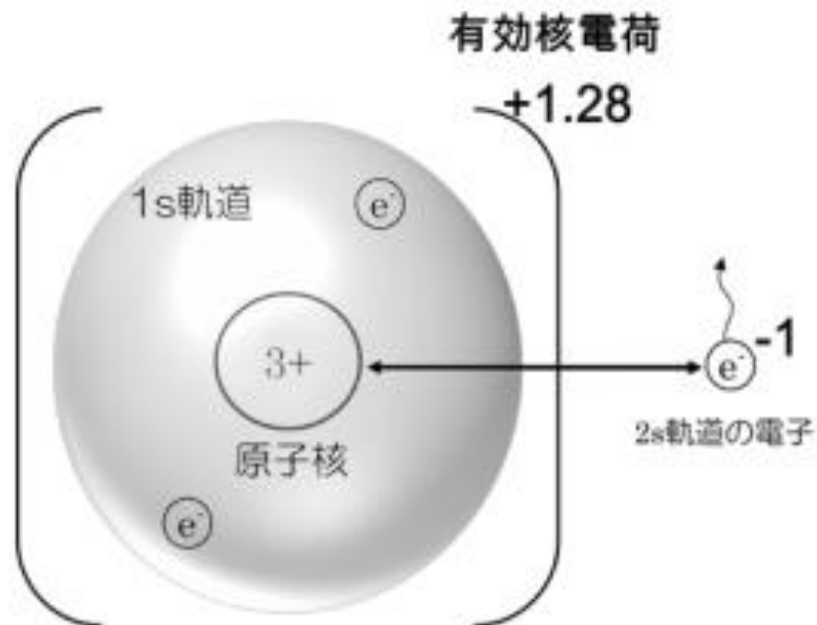


**有効核電荷：
各電子が受け取る実質的な電荷**

有効核電荷の考え方

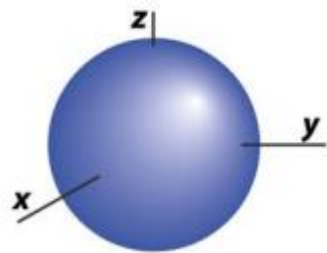


Li原子の模式図



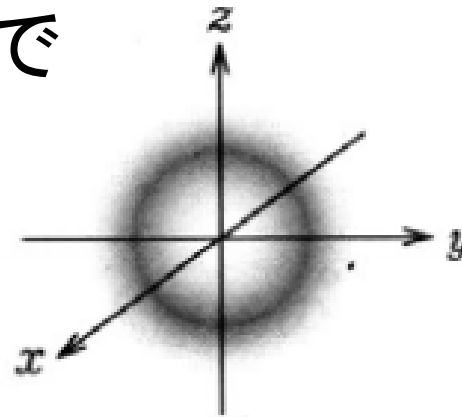
計算で求められた2s電子の有効核電荷
→スレーターの規則で概算できる
(テキストp.20)

貫入



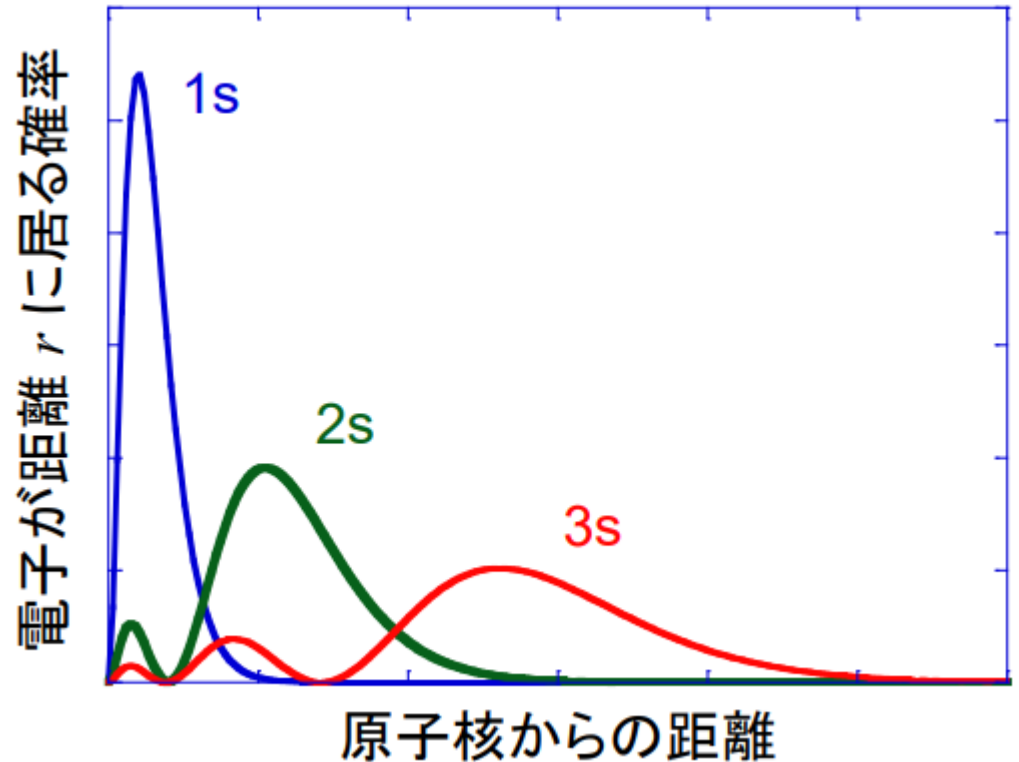
1s 軌道

yz平面で切ると

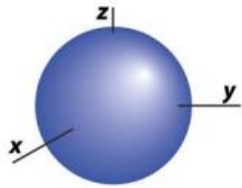


1s 軌道の密度分布

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）

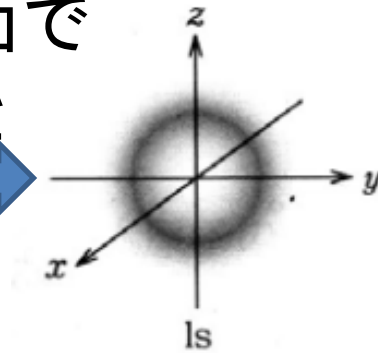


貫入



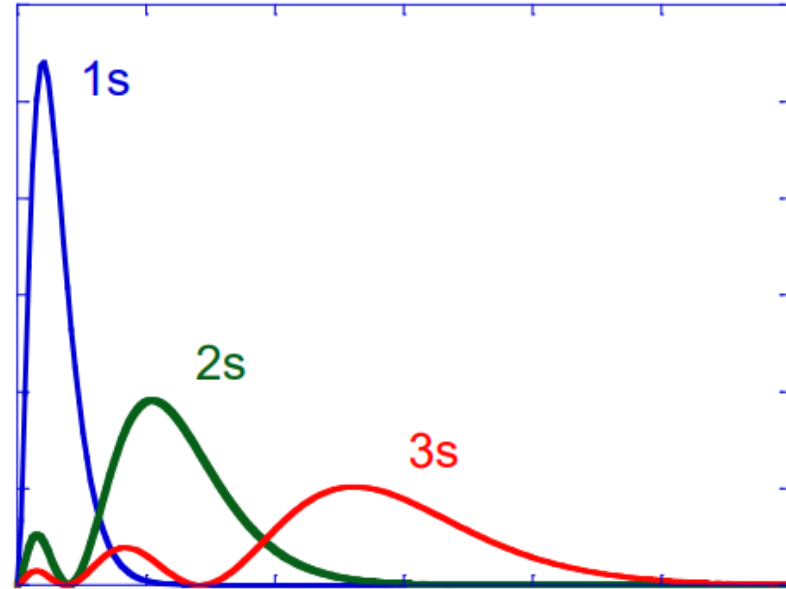
1s 軌道

yz平面で切ると



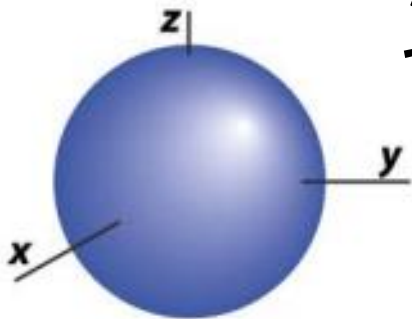
1s 軌道の密度分布

電子が距離 r に居る確率

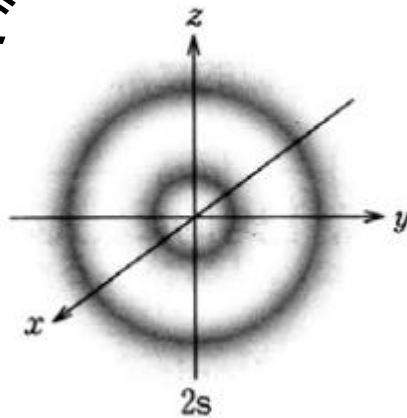


原子核からの距離

yz平面で切ると



2s 軌道



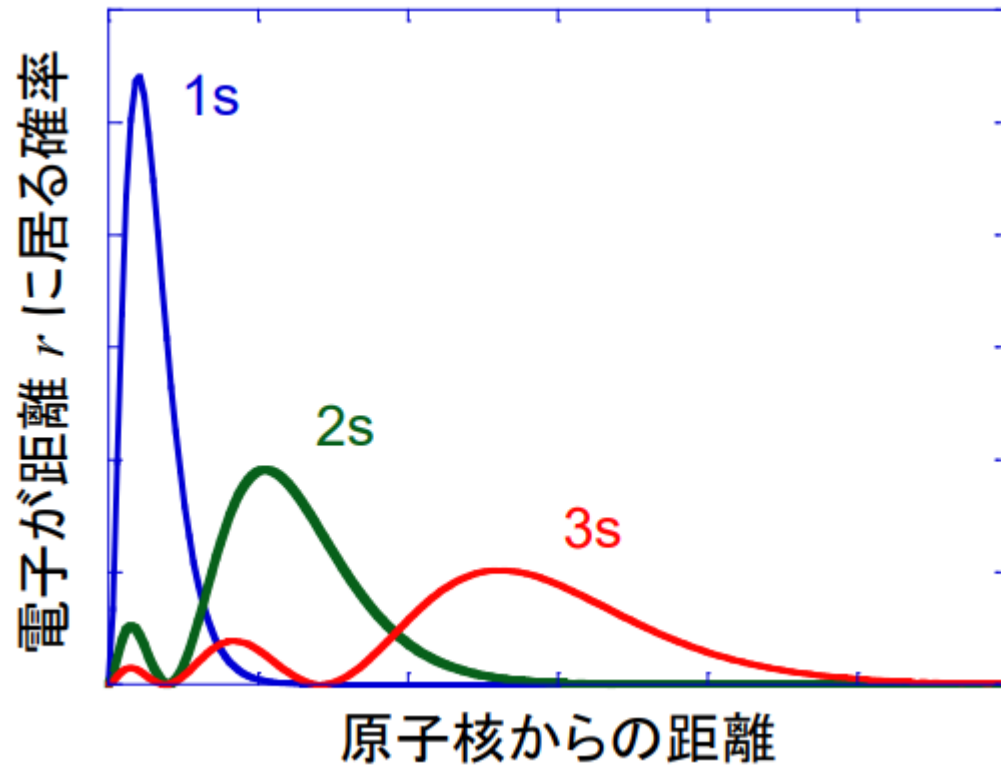
2s 軌道の密度分布

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



という。

貫入

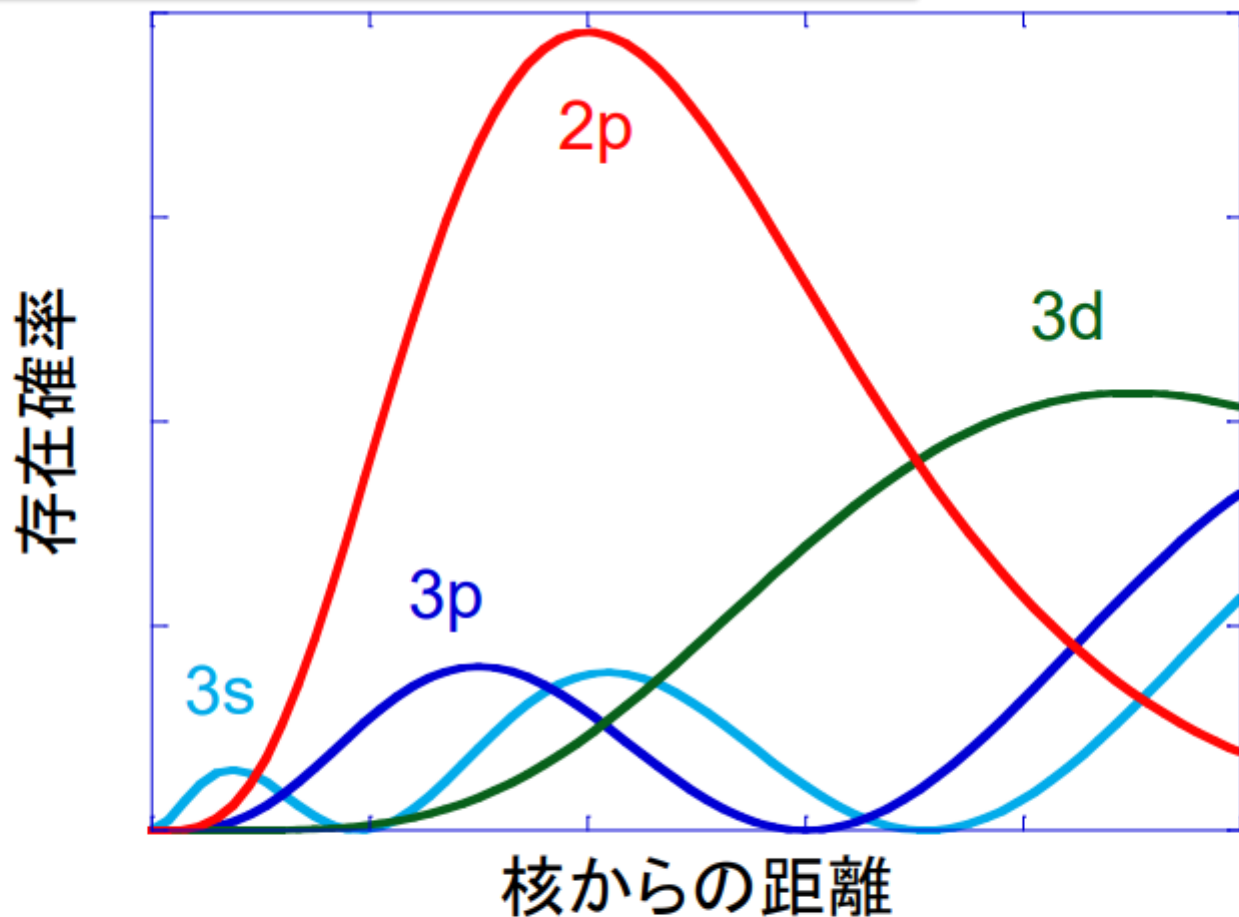


2s軌道の電子密度分布が最大の部分は
1s軌道の外側

→

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 $s \square p \square d$

遮蔽効果の受けやすさ $s \square p \square d$

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. レポート用紙, ルーズリーフ用紙, コピー用紙など, 用紙の種類は問わないが, サイズは必ずA4
2. 枚数制限なし
3. 1枚目の最初に, 学籍番号, 氏名, 提出日を記載して, 左上をとめる
4. 手書き, PC作成を問わない(PC作成の場合のみ, メールへの添付可能, MS word, pdfなど)
5. メールの場合, 必ず返信をするので, 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. 提出日: 第3回無機化学講義開始時に回収