

第3章!

□一般原子

さて、水素様原子のように核1つ、電子1つの計2個の系の問題として扱える場合は良いのですが、それ以外の場合はどうしましょう? 近似するしかないですね。

この近似において大事な考え方が有効核電化の考え方です。

第二章まとめの式を見てもらえばいいと思いますが、水素様原子の波動関数及びエネルギーは原子番号 Z によって決まっています。(あ、 Z が原子番号って書き忘れてる;) なのでこの Z をどうにかしてやろうって訳です。

電子は核からのクーロン力だけでなく、他の電子からのクーロン反発を受けています。このクーロン反発の影響を考える代わりに、核から受けるクーロン力(つまり核電荷)が弱まっている(遮蔽されている)と見なし、核電荷を $+(z-\sigma)e$ と置いてやればいいわけです。(有効核電荷) ちなみに σ :遮蔽定数 は実験から求まる値です。

このような近似を導入すると下のように波動関数が求まります。

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = f_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

また、これよりエネルギーも求まるのですが、水素様原子と異なるところはエネルギーが n, l に依存するところですね。

(この辺の詳しい話は第三章復習問題 [発展] を参照するなり聞きにくるなり...といっても構造化学でやります。)

基本的にエネルギーの大きさは $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 3d < 4s < 3d < 4p < \dots$ です。 $4s$ と $3d$ など準位が逆転する時もありますが、まあそれほど気にしなくてもいいんじゃないかと思えます。

□電子スピン

電子は原子核の周りを回っているのですが、実は同時に自転もしているのです。これをスピンと呼びます。

自転といってもその角運動量のある成分は2通りの値しか取りません。簡単に言うと上向きスピン (α スピン) と下向きスピン (β スピン) で \uparrow で表されます。

一般原子では3つの量子数 n, l, m のほかにこのスピン量子数というのも波動関数に絡んでくるのですねー

□電子配置

では電子の原子配置を定めましょう。この時重要となってくる規則は3つあります。

① Pauli の排他原理

: 2個の電子が同じ量子数 (n, l, m , スピン量子数) の組み合わせを持つことはない。

だから一つの軌道には電子が2個までしか入らないんですね。

② Hund の規則

: 量子数 l の等しい軌道に電子を配置する際は、電子はなるべく別の軌道に入り、またそれぞれの電子のスピンの向きがそろうように入る。

この入り方が一番エネルギーが低くなるからです。

③ 電子はエネルギーの低い軌道から順に入る。

これらの規則に従って電子を入れていった時の最後の殻(殻は $n=1, 2, 3 \dots \rightarrow K, L, M \dots$ って書いたよね?) に入っている電子が最外殻電子で、化学的に重要であることは高校の範囲ですね。

あとはたぶんプリント見ればわかると思いまーす。