

# 基礎量子化学

2009年4月～8月

5月1日 第4回

13章 原子構造と原子スペクトル

多電子原子の構造

13・4 オービタル近似

(b) パウリの排他原理

(c) 浸透と遮蔽

(d) 構成原理(Aufbau principle)

(f) イオン化エネルギーと電子親和力

13・10 磁場の効果

(b) ゼーマン効果

担当教員:

福井大学大学院工学研究科生物応用化学専攻准教授

前田史郎

E-mail: smaeda@u-fukui.ac.jp

URL: <http://acbio2.acbio.fukui-u.ac.jp/phychem/maeda/kougi>

学科の公式ホームページから授業資料のページへリンクしてあります

「学科公式ホームページ - カリキュラム・授業のシラバス」から「各教員の担当授業ページ - 前田(史)教員のページ」をクリックしてください。

教科書:

アトキンス物理化学(第6版)、東京化学同人

13章 原子構造と原子スペクトル

14章 分子構造

アトキンス物理化学(第8版)、東京化学同人

13章 原子構造と原子スペクトル

14章 分子構造

1

MAY01

4月24日

(1) 自習問題13・2 原子核の位置における2s電子の確率密度を計算せよ。  $[(Z/a_0)^3/8\pi]$

ヒント: 2s電子の量子数は,  $(n, l, m_l) = (2, 0, 0)$ である。

表12・3より,  $Y_{l,m}(\theta, \phi) = Y_{0,0}(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$

表13・1より,  $R_{n,l}(r) = R_{2,0}(r) = \frac{1}{2(2)^{1/2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{1}{2}\rho\right) e^{-\rho/4}$

原子核の位置( $r=0$ )における波動関数は,

$$\Psi = Y_{0,0} R_{2,0}(0) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} = \left(\frac{1}{8\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$$

確率密度 $P$ は $|\Psi|^2$ であるから,

$$|\Psi|^2 = (Z/a_0)^3/8\pi$$

## 多電子原子の構造

### 13・4 オービタル近似

多電子原子の波動関数は、すべての電子の座標の非常に複雑な関数であるが、各電子が、“それぞれ自分の”オービタルを占めていると考えることによって、この複雑な波動関数を各電子の波動関数の積の形で近似することができる。これをオービタル近似という。

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots) \cong \Psi(r_1)\Psi(r_2)\Psi(r_3)\dots$$

3

### 13・4 オービタル近似

#### (b) パウリの排他原理

2個よりも多くの電子が任意に与えられた1つのオービタルを占めることはできず、もし、2個の電子が1つのオービタルを占めるならば、そのスピンは対になっていなくてはならない。

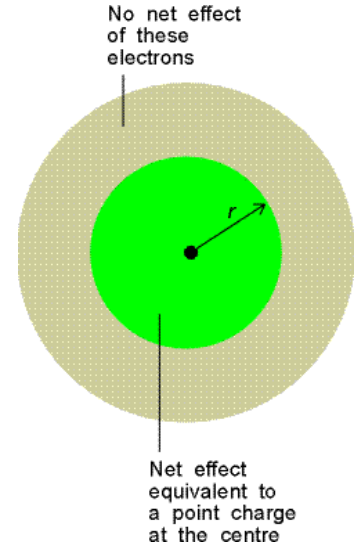
すなわち、4つの量子数がすべて同じ状態を取ることはできない。(n, l, m<sub>l</sub>)が同じであれば、スピンsが $\frac{1}{2}$ と $-\frac{1}{2}$ の対になっていなければならない。



4

(c) 浸透と遮蔽

多電子原子では, 2sと2pは縮退していない。  
 電子は他の全ての電子からクーロン反発を受ける。  
 原子核から $r$ の距離にある電子は, 半径 $r$ の球の内  
 部にある全ての電子によるクーロン反発を受ける  
 が, これは原子核の位置にある負電荷と等価であ  
 る。この負電荷は, 原子核の実効核電荷を $Ze$ から  
 $Z_{eff}e$ に引き下げる。



$$Z_{eff} = Z - \sigma$$

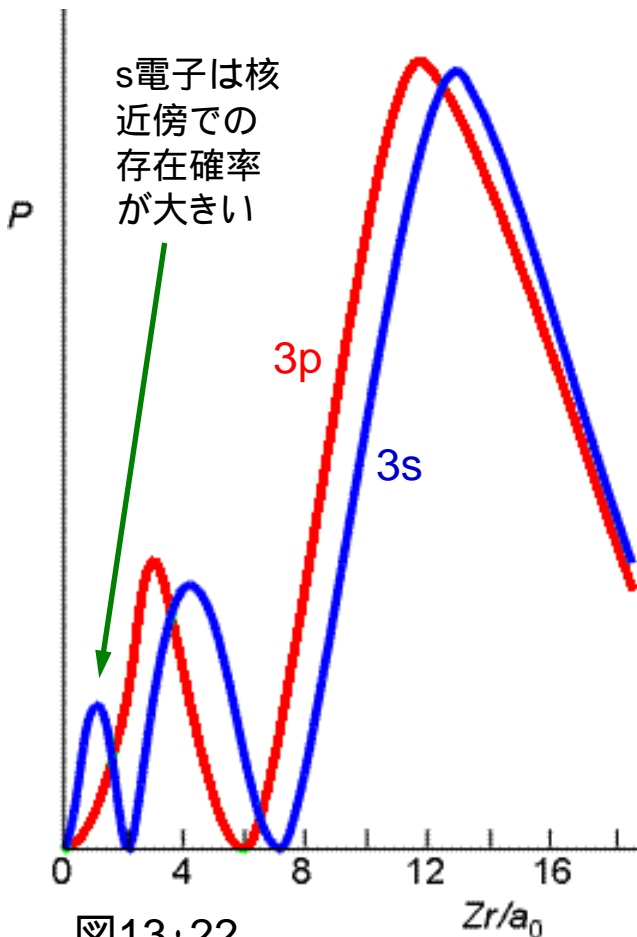


図13・22

遮蔽定数はs電子とp電子では異なる。これは両者の動径分布が異なるためである。s電子の方が同じ殻のp電子よりも原子核の近くに見出される確率が高いという意味で内殻に大きく浸透している。s電子はp電子よりも内側に存在確率が高いので弱い遮蔽しか受けない。浸透と遮蔽の2つの効果が組み合わさった結果, s電子は同じ殻のp電子よりもきつく束縛されるようになる。

浸透と遮蔽の2つの効果によって、多電子原子における副殻のエネルギーが、一般に、

$$s < p < d < f$$

の順になるという結果がもたらされる。

原子の遮蔽定数 $\sigma$ と有効核電荷 $Z_{\text{eff}}$

元素	Z	オービタル	遮蔽定数 $\sigma$	有効核電荷 $Z_{\text{eff}}$
He	2	1s	0.3125	1.6875
C	6	1s	0.3273	5.6727
		2s	2.7834	3.2166
		2p	2.8642	3.1358

2sの方が2pよりも僅かにエネルギーが低い。2sと2pは、1sによってほぼ完全に遮蔽されている。

7

#### (d)構成原理(Aufbau principle)

(1)オービタルが占有される順序は次の通りである。

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s ...

(2)電子はある与えられた副殻のオービタルのどれか1つを二重に占める前に、まず異なるオービタルを占める。

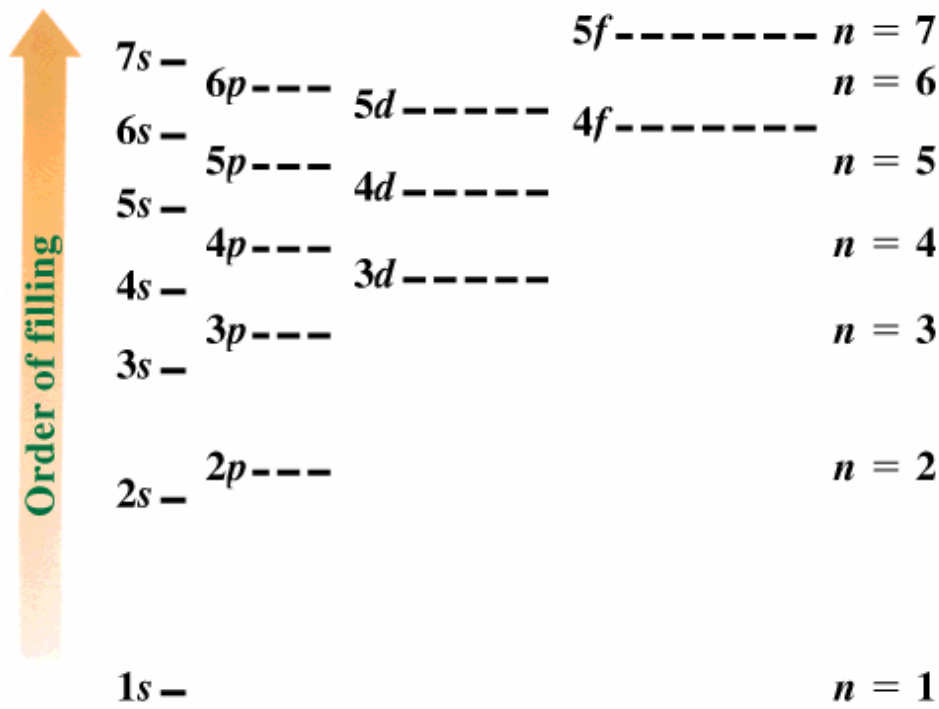
(3)基底状態にある原子は、不対電子の数が最高になる配置をとる。

N(Z=7):[He]2s<sup>2</sup>2p<sub>x</sub><sup>1</sup>2p<sub>y</sub><sup>1</sup>2p<sub>z</sub><sup>1</sup>      電子数=3, 不対電子数=3

O(Z=8):[He]2s<sup>2</sup>2p<sub>x</sub><sup>2</sup>2p<sub>y</sub><sup>1</sup>2p<sub>z</sub><sup>1</sup>      電子数=4, 不対電子数=2

8

# Order of subshell filling for many electron atoms



Harcourt Brace & Company items and derived items copyright ©1998 by Harcourt Brace & Company

MR08\_13.PIC

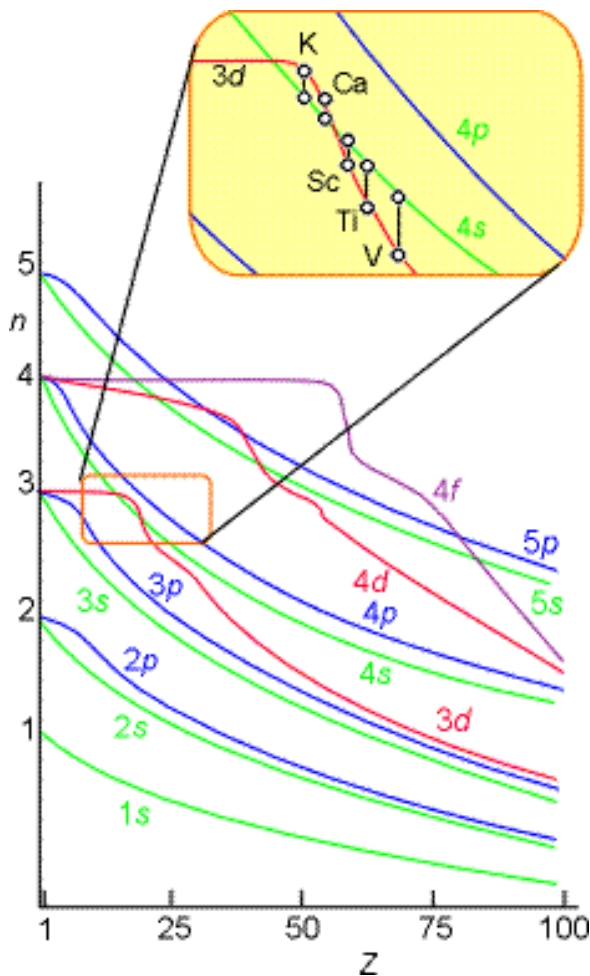


図13・23 元素のオービタルエネルギー。

カリウム付近の3dオービタルと4sオービタルの相対的なエネルギーの大きさに注目すること。

基底状態にある元素の電子配置

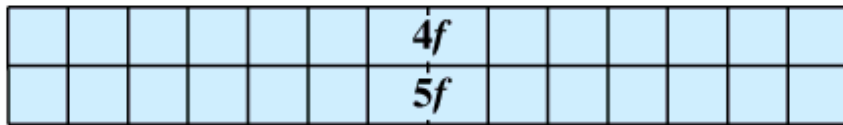
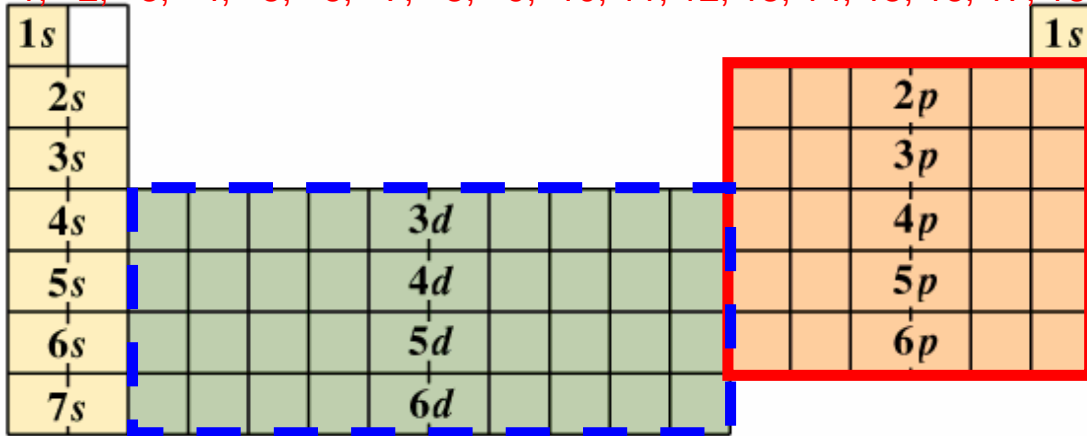
Z	元素	電子配置	状態	Z	元素	電子配置	状態
1	H	1s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	54	Xe	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
2	He	1s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	55	Cs	[Xe]6s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>
3	Li	1s <sup>2</sup> 2s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	56	Ba	[Xe]6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
4	Be	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	57	La	[Xe]5d6s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>
5	B	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	58	Ce	[Xe]4f5d6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> G <sub>4</sub>
6	C	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	59	Pr	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>9/2</sub>
7	N	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	60	Nd	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> I <sub>4</sub>
8	O	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	61	Pm	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> H <sub>5/2</sub>
9	F	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	62	Sm	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>
10	Ne	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	63	Eu	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>
11	Na	[Ne]3s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	64	Gd	[Xe]4f <sup>7</sup> 5d6s <sup>2</sup>	<sup>9</sup> D <sub>2</sub>
12	Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	65	Tb	[Xe]4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> H <sub>15/2</sub>
13	Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	66	Dy	[Xe]4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> I <sub>8</sub>
14	Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	67	Ho	[Xe]4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> I <sub>15/2</sub>
15	P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	68	Er	[Xe]4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> H <sub>6</sub>
16	S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	69	Tm	[Xe]4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> F <sub>7/2</sub>
17	Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	70	Yb	[Xe]4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
18	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	71	Lu	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d6s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>
19	K	[Ar]4s	<sup>4</sup> S <sub>1/2</sub>	72	Hf	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d6s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>
20	Ca	[Ar]4s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	73	Ta	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>
21	Sc	[Ar]3d4s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	74	W	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>
22	Ti	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	75	Re	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>
23	V	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>	76	Os	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>
24	Cr	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s	<sup>7</sup> S <sub>3</sub>	77	Ir	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>9/2</sub>
25	Mn	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>	78	Pt	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s	<sup>3</sup> D <sub>3</sub>
26	Fe	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> D <sub>4</sub>	79	Au	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>
27	Co	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>9/2</sub>	80	Hg	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
28	Ni	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>4</sub>	81	Tl	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>
29	Cu	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	82	Pb	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>
30	Zn	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	83	Bi	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> F <sub>3/2</sub>
31	Ga	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	84	Po	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>
32	Ge	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	85	At	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>
33	As	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	<sup>4</sup> S <sub>3/2</sub>	86	Rn	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
34	Se	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	87	Fr	[Rn]7s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>
35	Br	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	88	Ra	[Rn]7s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>
36	Kr	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	89	Ac	[Rn]6d7s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> D <sub>3/2</sub>
37	Rb	[Kr]5s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	90	Th	[Rn]6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> F <sub>2</sub>
38	Sr	[Kr]5s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	91	Pa	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup>	<sup>4</sup> K <sub>11/2</sub>
39	Y	[Kr]4d5s <sup>2</sup>	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub>	92	U	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup>	<sup>5</sup> L <sub>6</sub>
40	Zr	[Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	<sup>3</sup> F <sub>2</sub>	93	Np	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> L <sub>11/2</sub>
41	Nb	[Kr]4d <sup>4</sup> 5s	<sup>6</sup> D <sub>1/2</sub>	94	Pu	[Rn]5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>7</sup> F <sub>0</sub>
42	Mo	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s	<sup>7</sup> S <sub>3</sub>	95	Am	[Rn]5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	<sup>8</sup> S <sub>7/2</sub>
43	Tc	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	<sup>6</sup> S <sub>5/2</sub>	96	Cm	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup>	<sup>8</sup> D <sub>2</sub>
44	Ru	[Kr]4d <sup>7</sup> 5s	<sup>5</sup> F <sub>4</sub>	97	Bk	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup> )	
45	Rh	[Kr]4d <sup>8</sup> 5s	<sup>4</sup> F <sub>5/2</sub>	98	Cf	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> )	
46	Pd	[Kr]4d <sup>10</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	99	Es	[Rn]5f <sup>6</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup> )	
47	Ag	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s	<sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	100	Fm	[Rn]5f <sup>11</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup> )	
48	Cd	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	101	Md	[Rn]5f <sup>12</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup> )	
49	In	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	102	No	[Rn]5f <sup>13</sup> 6d7s <sup>2</sup> (または5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup> )	
50	Sn	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	103	Lr	[Rn]5f <sup>14</sup> 6d7s <sup>2</sup>	
51	Sb	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	<sup>6</sup> D <sub>1/2</sub>	104		[Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	
52	Te	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	105		[Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	
53	I	[Kr]4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	106		[Rn]5f <sup>14</sup> 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	

Z	元素	電子配置	Z	元素	電子配置	Z	元素	電子配置
1	H	1s	19	K	[Ar]4s	37	Rb	[Kr]5s
2	He	1s <sup>2</sup>	20	Ca	[Ar]4s <sup>2</sup>	38	Sr	[Kr]5s <sup>2</sup>
3	Li	1s <sup>2</sup> 2s	21	Sc	[Ar]3d4s <sup>2</sup>	39	Y	[Kr]4d5s <sup>2</sup>
4	Be	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	22	Ti	[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	40	Zr	[Kr]4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>
5	B	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	23	V	[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	41	Nb	[Kr]4d <sup>4</sup> 5s
6	C	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	24	Cr	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s	42	Mo	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s
7	N	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	25	Mn	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	43	Tc	[Kr]4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>
8	O	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	26	Fe	[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	44	Ru	[Kr]4d <sup>7</sup> 5s
9	F	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	27	Co	[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>			
10	Ne	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	28	Ni	[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>			
11	Na	[Ne]3s	29	Cu	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s			
12	Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	30	Zn	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>			
13	Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p	31	Ga	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p			
14	Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	32	Ge	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>			
15	P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	33	As	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>			
16	S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	34	Se	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>			
17	Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	35	Br	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>			
18	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	36	Kr	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>			

赤線で囲った元素は $ns^2np^x$  ( $x=1 \sim 6$ )と規則的であるが、  
 青破線で囲った元素は $nd^xns^2$  ( $x=1 \sim 10$ )にはなっていない。

# Electron configuration and the periodic table

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18



- s-block elements
- d-block elements (transition metals)
- p-block elements
- f-block elements: lanthanides (4f) and actinides (5f)

Harcourt Brace & Company items and derived items copyright ©1998 by Harcourt Brace & Company

MR08\_14.PIC

原子番号	元素記号	電子配置	
1	H	1s	電子はsオービタルに 順番に入る
2	He	1s <sup>2</sup>	
3	Li	1s <sup>2</sup> 2s	電子はsオービタルに 順番に入る
4	Be	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	
5	B	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p	電子はpオービタルに 順番に入る
6	C	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	
7	N	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	
8	O	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	
9	F	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	
10	Ne	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	

N(2p<sup>3</sup>)は球対称であり, O(2p<sup>4</sup>)よりも第1イオン化ポテンシャルが高い.

N(2p<sup>3</sup>)は、O(2p<sup>4</sup>)よりも第1イオン化ポテンシャルが高い。

(1) O(2p<sup>4</sup>)では2pが二重に占有されるが、電子-電子反発が大きい。

(2) 半分満たされた副殻は球対称性を持ち、エネルギーが低い。

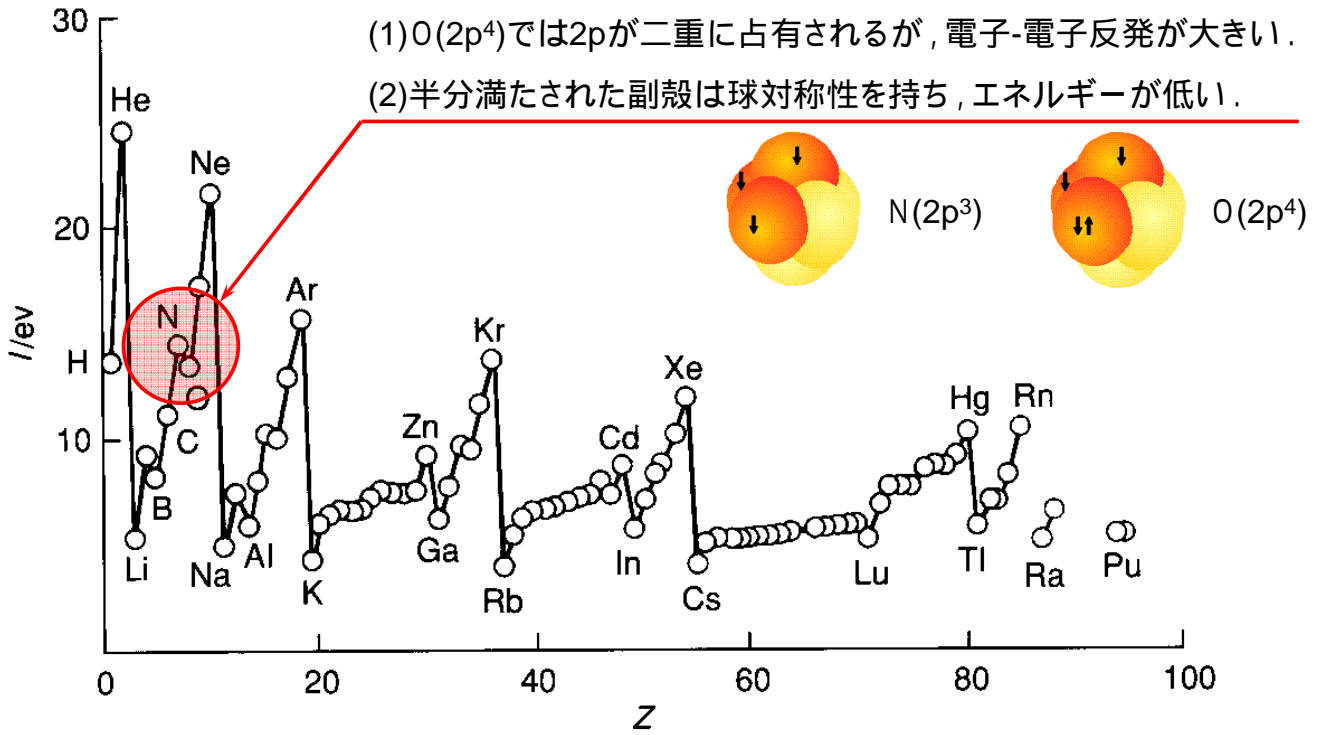


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

原子番号	元素記号	電子配置	
11	Na	[Ne] 3s	電子はsオービタルに 順番に入る
12	Mg	[Ne] 3s <sup>2</sup>	
13	Al	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p	電子はpオービタルに 順番に入る
14	Si	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	
15	P	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	P(3p <sup>3</sup> )は球対称であり、S(3p <sup>4</sup> )よりも第1 イオン化ポテンシャル が高い。
16	S	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	
17	Cl	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	
18	Ar	[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	



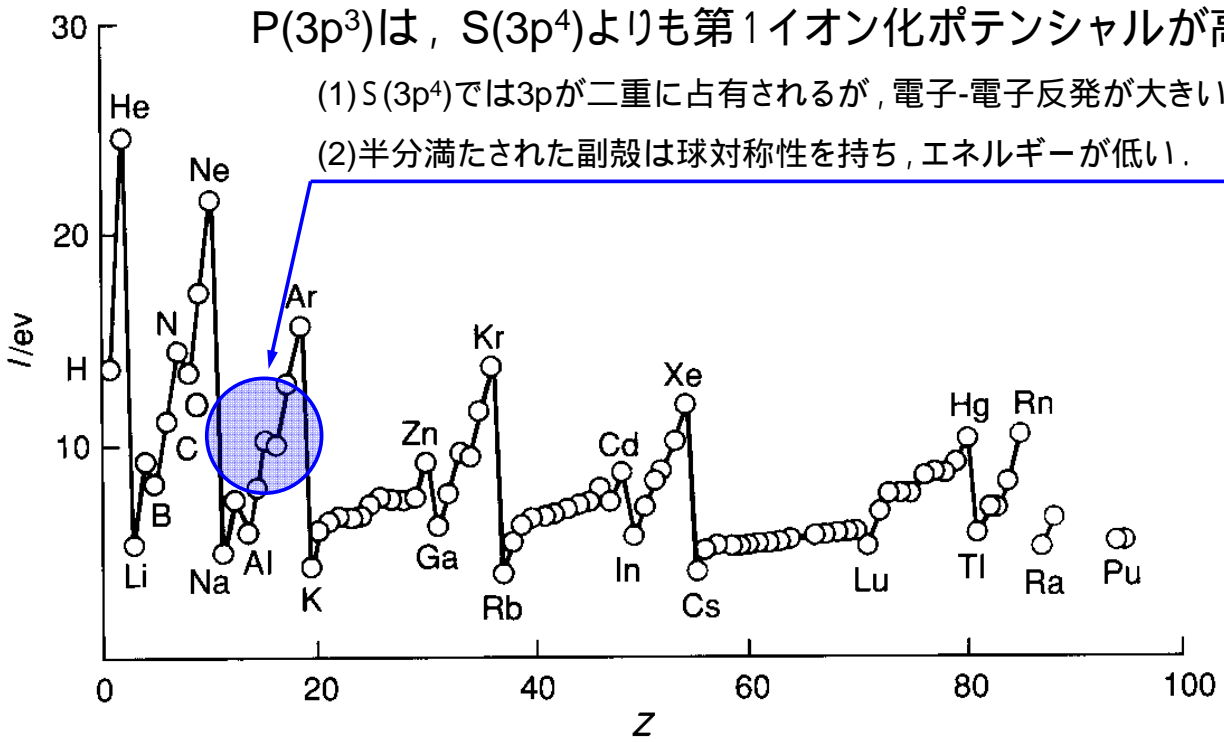


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

3d遷移元素 (Sc - Zn)

原子番号 元素記号

電子配置

19	K	[Ar] 4s
20	Ca	[Ar] 4s <sup>2</sup>
21	Sc	[Ar] 3d 4s <sup>2</sup>
22	Ti	[Ar] 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>
23	V	[Ar] 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>
24	Cr	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s
25	Mn	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>
26	Fe	[Ar] 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>
27	Co	[Ar] 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>
28	Ni	[Ar] 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>
29	Cu	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s
30	Zn	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>

電子は4sオービタルに順番に入る

4sオービタルが詰まった後、電子はdオービタルに順番に入る

例外:

$d^5$ と $d^{10}$ 電子配置は球対称であり、 $d^4 4s^1$ と $d^9 4s^1$ よりも安定になる。

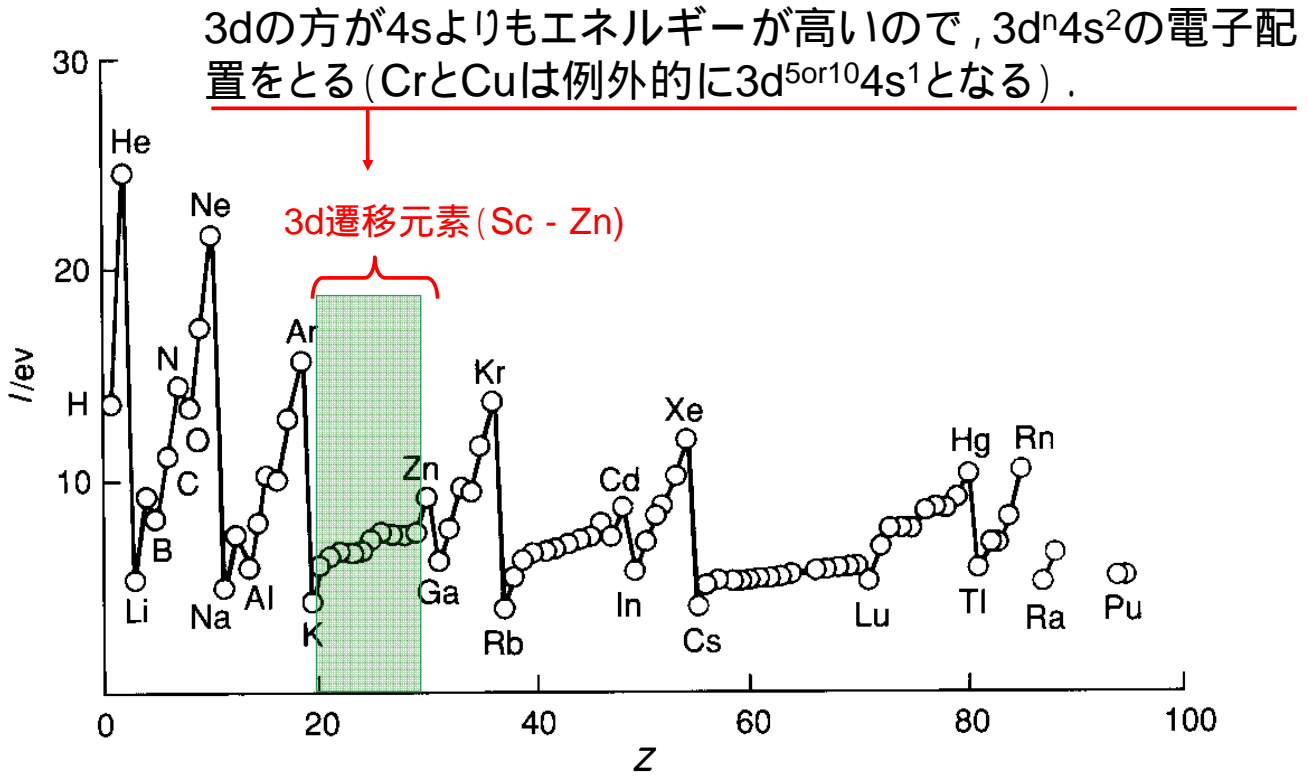


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

原子番号	元素記号	電子配置
31	Ga	[Ar] $3d^{10}4s^24p^1$
32	Ge	[Ar] $3d^{10}4s^24p^2$
33	As	[Ar] $3d^{10}4s^24p^3$
34	Se	[Ar] $3d^{10}4s^24p^4$
35	Br	[Ar] $3d^{10}4s^24p^5$
36	Kr	[Ar] $3d^{10}4s^24p^6$

電子はpオービタルに順番に入る

4d遷移元素 (Y - Pd)

原子番号	元素記号	電子配置
37	Rb	[Kr] 5s
38	Sr	[Kr] 5s <sup>2</sup>
39	Y	[Kr] 4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>
40	Zr	[Kr] 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>
41	Nb	[Kr] 4d <sup>4</sup> 5s
42	Mo	[Kr] 4d <sup>5</sup> 5s
43	Tc	[Kr] 4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>
44	Ru	[Kr] 4d <sup>7</sup> 5s
45	Rh	[Kr] 4d <sup>8</sup> 5s
46	Pd	[Kr] 4d <sup>10</sup>
47	Ag	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s
48	Cd	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>

電子は4sオービタルに順番に入る

5sオービタルが詰まった後、電子はdオービタルに順番に入る

例外：  
d<sup>5</sup>とd<sup>10</sup>電子配置は球対称であり、d<sup>4</sup>4s<sup>1</sup>とd<sup>9</sup>4s<sup>1</sup>よりも安定になる。

4dの方が5sよりもエネルギーが高いため、4d<sup>n</sup>5s<sup>2</sup>の電子配置をとる (MoとPdは例外的に4d<sup>5</sup>5s<sup>1</sup>と4d<sup>10</sup>となる)。

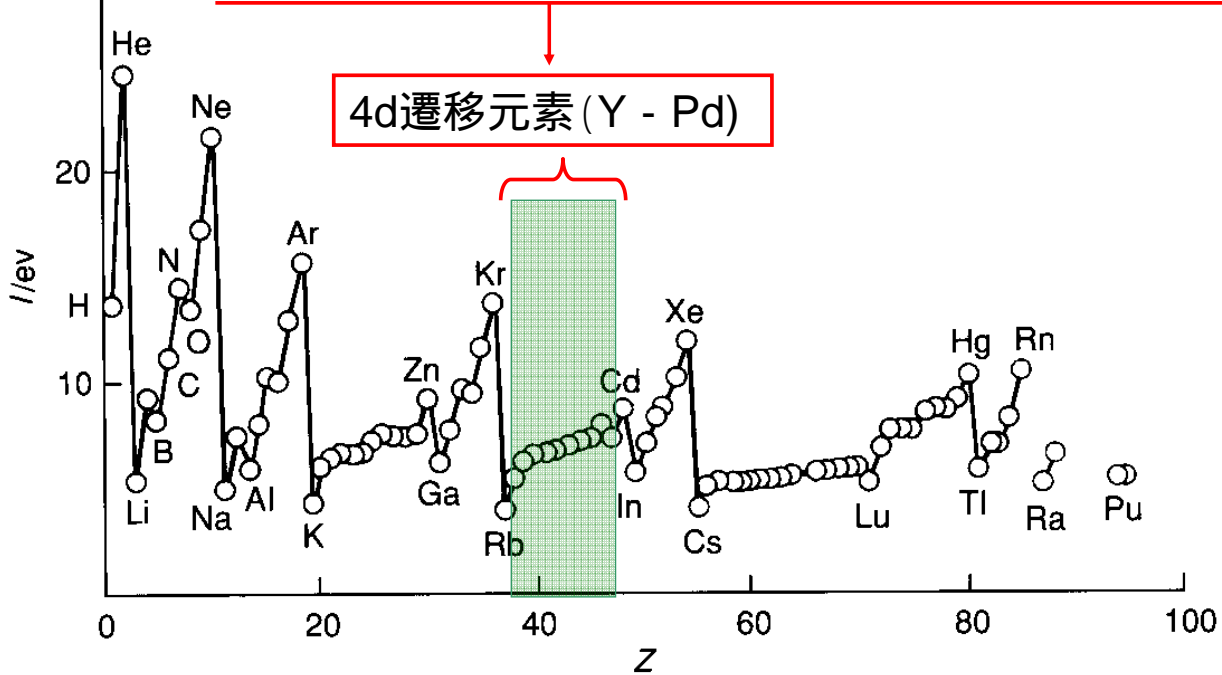


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

ランタニド(稀土類元素) La - Yb

原子番号	元素記号	電子配置
57	La	[Xe] 5d6s <sup>2</sup>
58	Ce	[Xe] 4f5d6s <sup>2</sup>
59	Pr	[Xe] 4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>
60	Nd	[Xe] 4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>
61	Pm	[Xe] 4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>
62	Sm	[Xe] 4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>
63	Eu	[Xe] 4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>
64	Gd	[Xe] 4f <sup>7</sup> 5d6s <sup>2</sup>
65	Tb	[Xe] 4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>
66	Dy	[Xe] 4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>
67	Ho	[Xe] 4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>
68	Er	[Xe] 4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>
69	Tm	[Xe] 4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>
70	Yb	[Xe] 4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>

6sオービタルが詰まった後、電子は4fオービタルに順番に入る

例外:

f<sup>7</sup>電子配置は球対称であり、4f<sup>8</sup>よりも安定になる。

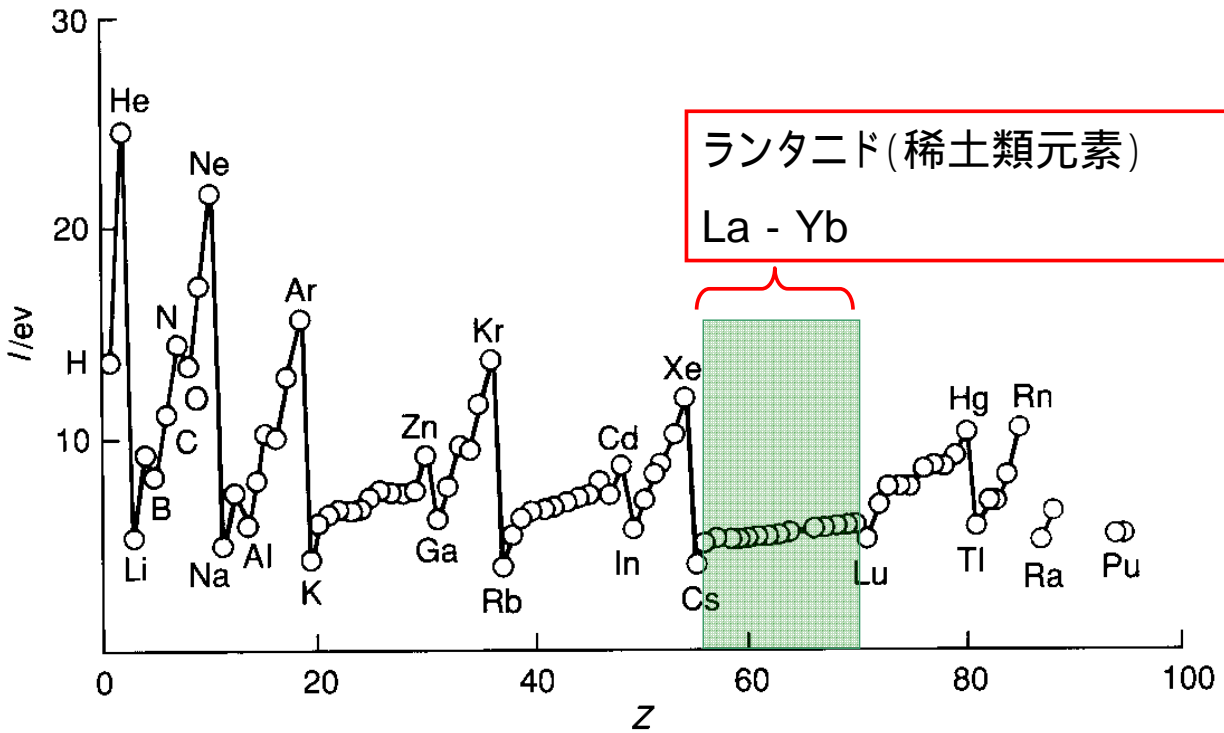


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

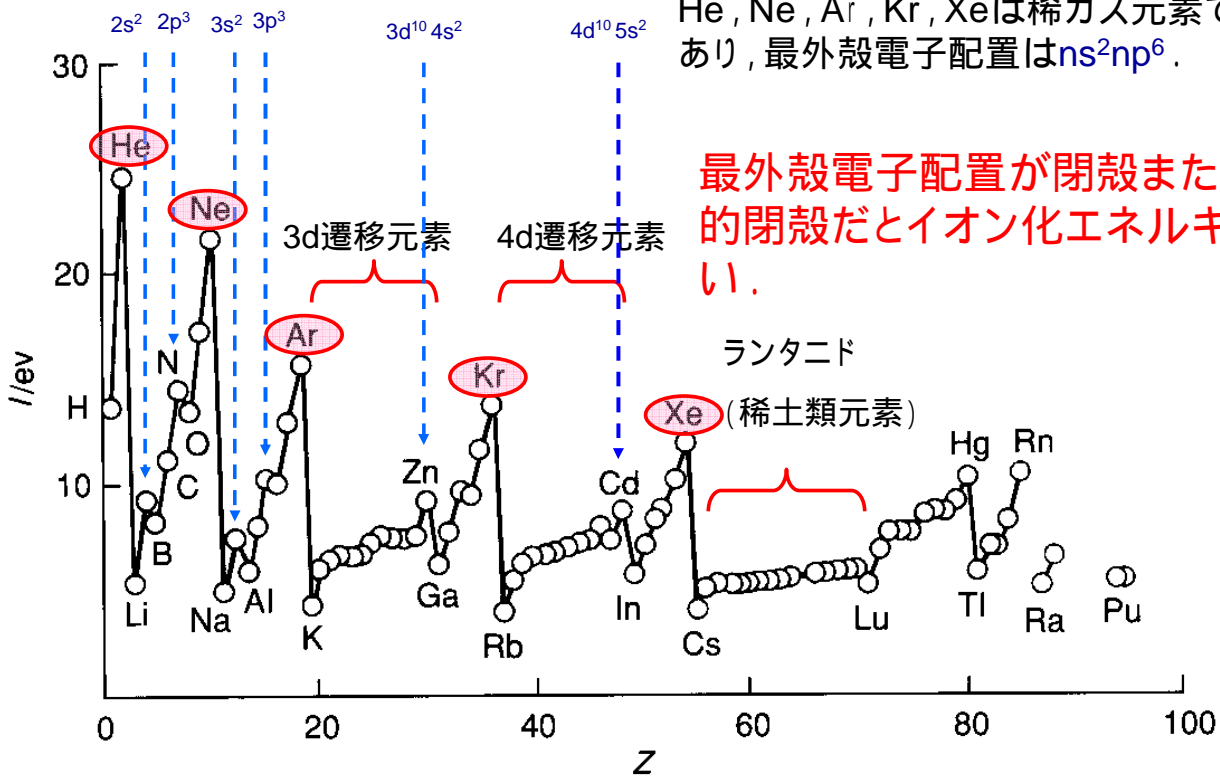


図13・24 元素の第1イオン化エネルギー・原子番号に対してプロットしたもの。

# 元素の周期表

3d遷移金属元素

Periodic Table of the Elements

1	2											10					
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	*La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113					
Fr	Ra	+Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt	110	111	112	113					

\* Lanthanide Series

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

+ Actinide Series

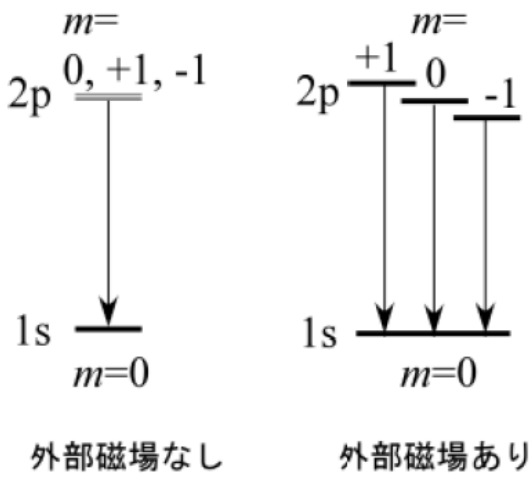
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

ランタニド  
アクチニド



### 13・10 磁場の効果

#### (b)ゼーマン効果



強磁場の印加によって原子スペクトルが変化することをゼーマン効果という。一般に方位量子数の状態は、 $m = 0$ から $\pm$ までの合計 $2 + 1$ 種類の状態が縮退している。磁場のないときに1本だけであったスペクトル線が $2 + 1$ 本になって観測されることを正常ゼーマン効果という。さらに複雑なスペクトル線に分裂することを異常ゼーマン効果という。

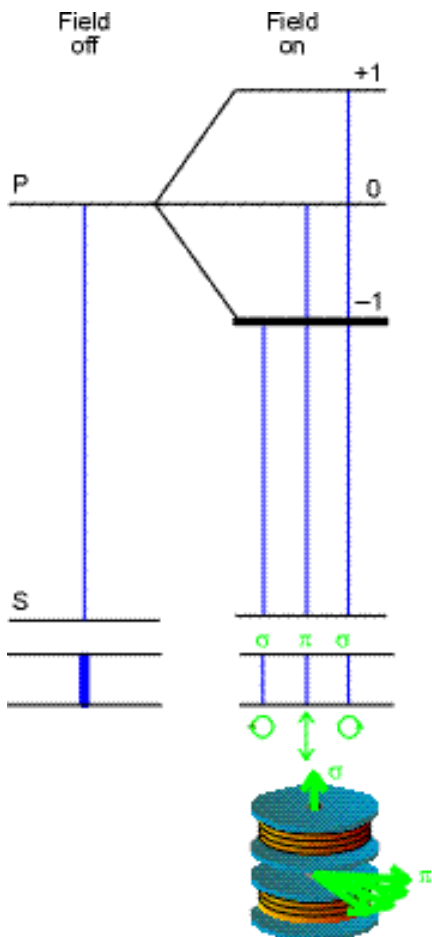
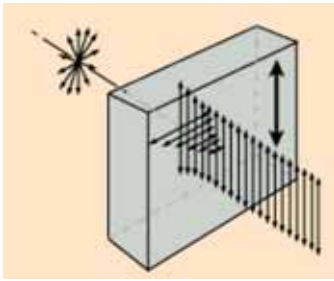
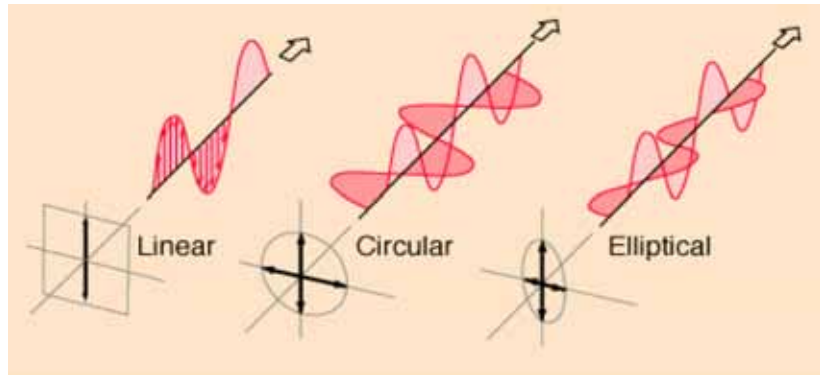


図13・38 正常ゼーマン効果 左側は磁場を切ったときで、スペクトル線は1本だけ観測される。磁場をかけるとスペクトル線は3本に分裂するが、その偏光の仕方はそれぞれ異なる。円偏光の線を  $\sigma$  線、平面偏光線を  $\pi$  線という。

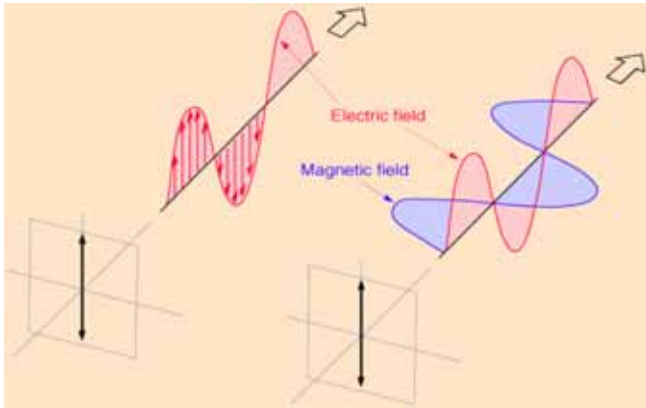




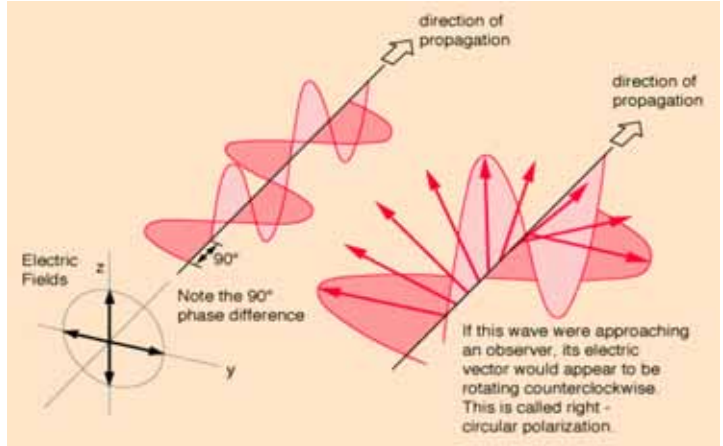
偏光プリズムによる直線偏光の生成



直線偏光 右円偏光 右楕円偏光

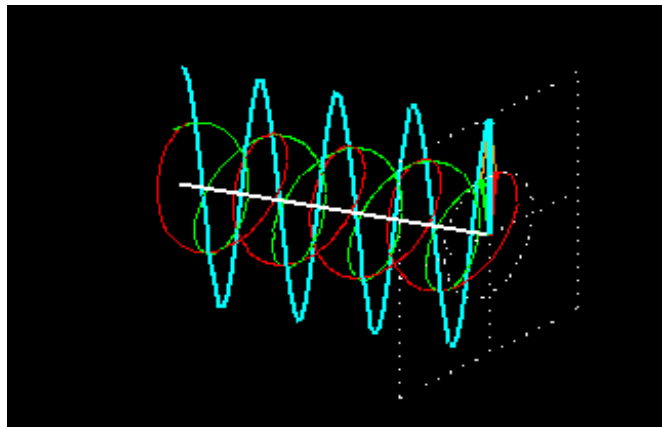
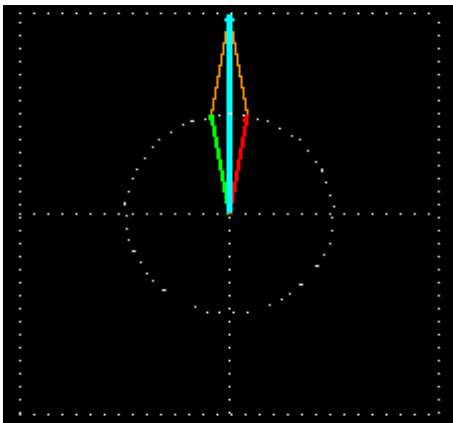


電磁波の表し方



90°位相の異なるx-y直線偏光からの右円偏光の生成

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/phyopt/polarcon.html#c1>



左右円偏光の合成による直線偏光の生成

右円偏光(赤色) + 左円偏光(緑色) = 直線偏光(水色)



5月1日, 入学年度, 学生番号, 氏名

(1) 3d遷移金属元素の最外殻電子配置を説明せよ.

(2) ランタニド(希土類元素)が, 化学的に良く似た性質を示すことを説明せよ.

(3) 本日の授業内容についての質問, 意見, 感想, 苦情, 改善提案などを書いてください.