

プリント⑧ ★解答の例（これを丸暗記しなさい、という意味ではありません。）

- ★1) 原子や分子中の電子は現代の物理・化学では運動する粒子ではなく、波として考えた方がより一般的に物質の性質(物性)をよりよく説明できる。電子を波として扱うときその関数が波動関数( $\psi$ )で、その方程式が波動方程式 $\square$ である。ここでは電子は粒子ではないからその存在位置は不確定で、確率分布としてしか表せず、確率は $\psi^2$ である。その存在確率の大小を点で表した図が電子雲である。
- ★2) 古典的な軌道（オービット orbit）の概念では電子は粒子として等速円運動をして、その位置は原理的に計算可能である。電子の存在は現代は確率分布としてしかあわせられないから、軌道は運動する道としての意味はない。しかし拡張された概念として同じ軌道と言う語を使い、その違いを強調するときはオービタル orbital（訳語はやはり「軌道」）という。

原子の電子配置（§2.5）とイオンの電子配置（§2.6）

ポイント

1. 水素原子と一般の原子（多電子原子）の軌道エネルギーの高さ
2. 一般の原子の場合の軌道エネルギーの順序（パウリの排他原理、フントの規則）
3. 電子が軌道に収容されていくときの規則（組立て原理）
4. 原子とイオンの電子配置

キーワード（\*は教科書に語句としてはなし）

組立て原理\*（：電子が軌道を順に占有していく原理）、パウリの排他原理、フントの規則、縮退（縮重）\*（：エネルギーが等しい軌道が複数あること）、不対電子、閉殻/準閉殻\*、（：主量子数  $n$  に属するすべての軌道が電子で埋まっているとき閉殻。ただし  $n \geq 3$  のときは、 $p$  軌道が埋まっているとき準閉殻という）、芯構造\*（：準閉殻のときの電子配置（したがって希ガスの電子配置になる）

原子軌道のエネルギー準位（右ページ図）

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p$ （覚える必要なし）

演習1) 組立て原理は3つの要素で構成されている。それは何か。

演習2) 水素原子で縮退（縮重）している軌道の例を挙げよ。

演習3)  ${}_{17}\text{Cl}$ 、 ${}_{26}\text{Fe}$  の電子配置を書け。

演習4) 次の原子の基底状態における電子配置を芯構造で書け。 ${}_{56}\text{Ba}$ 、 ${}_{20}\text{Ca}$ 、 ${}_{34}\text{Se}$ 、 ${}_{38}\text{Sr}$

演習5)  ${}_{3}\text{Li}$ 、 ${}_{11}\text{Na}$ 、 ${}_{19}\text{K}$ 、 ${}_{37}\text{Rb}$ 、 ${}_{55}\text{Cs}$  について電子配置を書き、その共通点を指摘せよ。

演習6) 希ガス元素（18族）および★ハロゲン元素（17族）についても同様の比較をせよ。

演習7) 基底状態で次の原子はそれぞれ何個の不対電子をもっているか。 ${}_{25}\text{Mn}$ 、 ${}_{21}\text{Sc}$ 、 ${}_{26}\text{Fe}$ 、 ${}_{30}\text{Zn}$

★演習8) 基底状態にある炭素、窒素、酸素原子で不対電子の数はそれぞれいくつあるか。

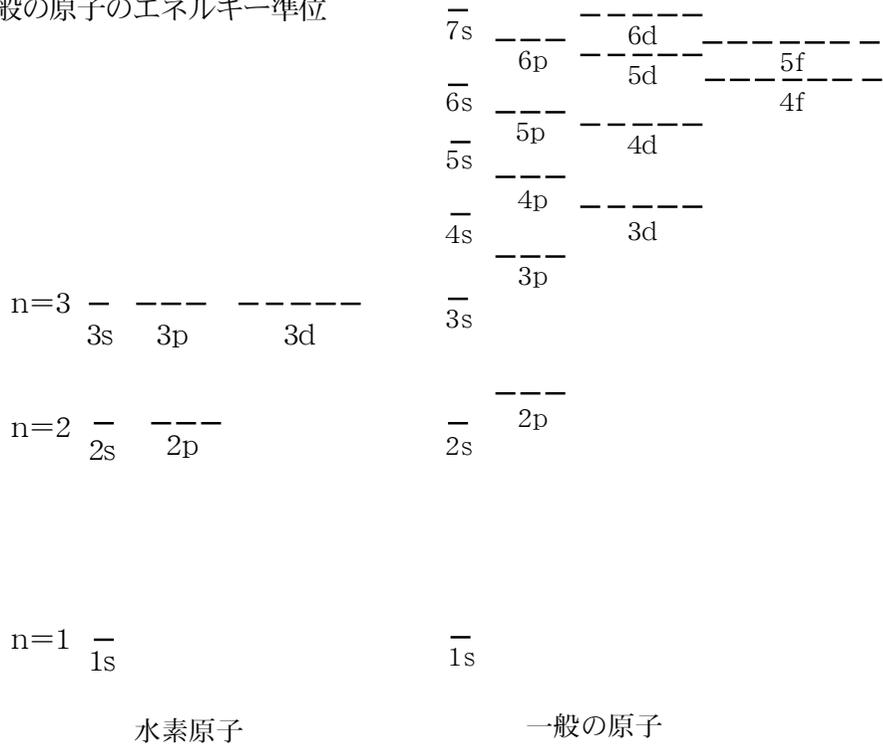
演習9)  $\text{Cl}^-$  イオンの電子配置を書け。

★演習10) 原子番号20の原子とその+2価のイオンの電子配置を書け。

演習11) (a) パウリの排他原理 および (b) フント則を3行程度で説明せよ。

教科書 p.34 演習問題 3、5

水素原子と一般の原子のエネルギー準位



プリント⑩ ★以外の解答

- 1) 自分の授業ノートを参照せよ。 2) 2s と 2p, 3s と 3p と 3d
  - 3)  ${}_{17}\text{Cl} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  または  $[\text{Ne}]^{10} 3s^2 3p^5$   
 ${}_{26}\text{Fe} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$  または  $[\text{Ar}]^{18} 3d^6 4s^2$  3d と 4s は順序逆でも可。  $[\text{Ne}]^{10}$  は閉殻、 $[\text{Ar}]^{18}$  は準閉殻。  $[\text{Ar}]^{18}$  を閉殻と言わないのは、3d が満たされていないから。
  - 4)  $\text{Ba} : [\text{Xe}]^{54} 6s^2$ ,  $\text{Ca} : [\text{Ar}]^{18} 4s^2$ ,  $\text{Se} : [\text{Ar}]^{18} 4s^2 3d^{10} 4p^4$ ,  $\text{Sr} : [\text{Kr}]^{36} 5s^2$
  - 5)  ${}_{3}\text{Li} : [\text{He}]^2 2s^1$ ,  ${}_{11}\text{Na} : [\text{Ne}]^{10} 3s^1$ ,  ${}_{19}\text{K} : [\text{Ar}]^{18} 4s^1$ ,  ${}_{37}\text{Rb} : [\text{Kr}]^{36} 5s^1$ ,  ${}_{55}\text{Cs} : [\text{Xe}]^{54} 6s^1$  すべて電子配置が  $ns^1$ 。
  - 6) 希ガス(18 族)  ${}_{2}\text{He} : 1s^2$   ${}_{10}\text{Ne} : 1s^2 2s^2 2p^6$   ${}_{18}\text{Ar} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$   ${}_{36}\text{Kr} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$   ${}_{54}\text{Xe} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$  すべて電子配置が  $np^6$  (閉殻または準閉殻)。最外殻(例えば Ne では  $n=2$ ) がすべて占有されているとき閉殻という。  $n=3$  以上では  $np^6$  の次は  $nd$  軌道ではなく  $(n+1)s$  軌道に先に入るので、上の意味での純粋な閉殻ではない。同じ  $np^6$  でも区別して準閉殻という。
  - 7)  $\text{Mn} : 5$ ,  $\text{Sc} : 1$ ,  $\text{Fe} : 4$ ,  $\text{Zn} : 0$
  - 9)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 = [\text{Ar}]$ : 配布したプリントでは  $3s^6$  になっていましたが、 $3p^6$  に訂正します。
  - 11) (a) 4つの量子数(主、方位、磁気、スピン) がすべて同じ電子は存在しない。したがって主、方位、磁気の量子数でできる1つの軌道には電子は2個までしか入ることができない。そのとき2つの電子のスピンは逆向きである。(b) 縮重している軌道に電子が入るときの順序は、電子の入っていない軌道に優先的に入ろうとする。そのとき不対電子のスピンは平行(同じ向き)になる。
- 教科書 p.34  $\mathbf{3 Al} : [\text{Ne}]^{10} 3s^2 3p^1$ ,  $\mathbf{P} : [\text{Ne}]^{10} 3s^2 3p^3$ ,  $\mathbf{S} : [\text{Ne}]^{10} 3s^2 3p^3$ ,  $\mathbf{Ca} : [\text{Ar}]^{18} 4s^2$ ,  $\mathbf{As} : [\text{Ar}]^{18} 4s^2 3d^{10} 4p^3$ ,  $\mathbf{Sn} : [\text{Kr}]^{36} 5s^2 4d^{10} 5p^2$
- 5** 電子配置は  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ 。フントの規則により、 $3p^3$  のところは電子は異なる軌道に入るの、不対電子数は3。