

図 2・2 水素、ヘリウム、リチウム原子のエネルギー準位図 (縦軸の途切れに注意)

二電子以上を含む原子軌道のエネルギー準位は電子相関 (主に静電反発) により  $E_n = -A \frac{Z^2}{n^2}$  から予想される値より高エネルギー (不安定) になる。

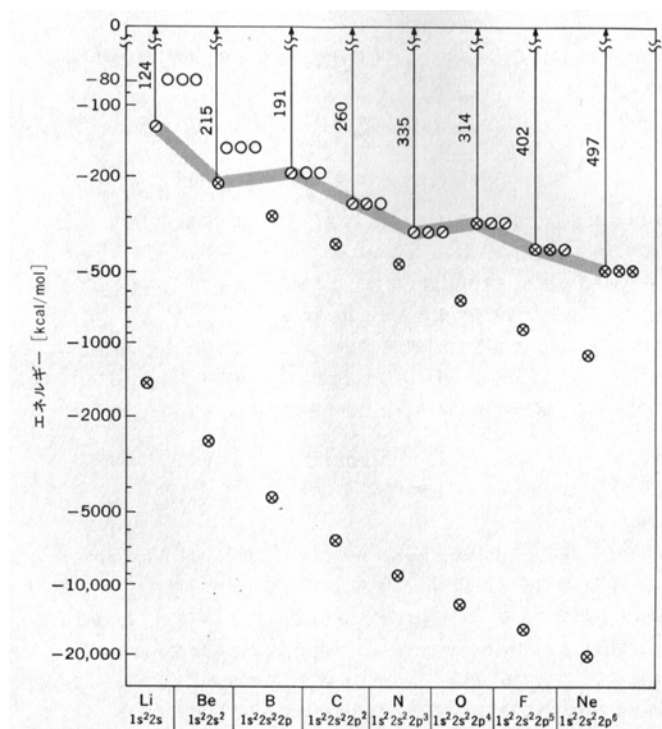


図 2・3 周期表第 1 行元素のエネルギー準位、軌道占有状態、イオン化エネルギー (エネルギーが大きくなるにつれて縦軸が圧縮されていることに注意)

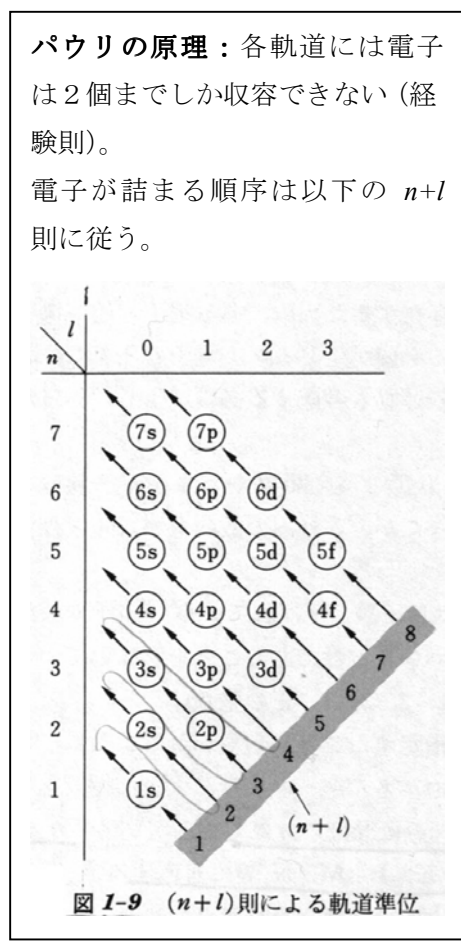


図 1-9 (n+l) 則による軌道準位

パウリの原理: 各軌道には電子は 2 個までしか収容できない (経験則)。  
電子が詰まる順序は以下の n+l 則に従う。

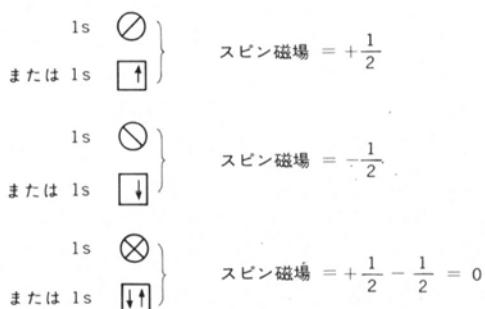


図 2・7 満員および半分満員の軌道の電子スピンの表わし方

○に×印が巣箱表示; □内に ↓ ↑ が矢印表記  
現代では矢印表記が一般的

H <sub>2</sub> 1		s ブロック										d ブロック						He 2
Li 3	Be 4											B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10	
Na 11	Mg 12	d ブロック										Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18	
K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36	
Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54	
Cs 55	Ba 56	La 57	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po? 84	At? 85	Rn 86	
Fr 87	Ra 88	Ac 89	Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Ds 110	Rg 111								
f ブロック																		
La 57	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lu 71				
Ac 89	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103				

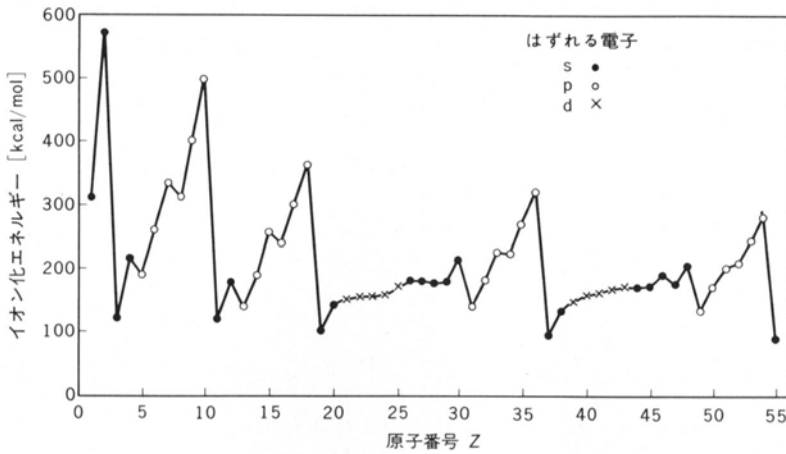


図 2・14 第1イオン化エネルギー

表 2・1 一電子近似による有効核電荷と軌道半径

	Z*	r [Å]
H	1.00	0.76
He	1.34	0.59
-----		
Li	1.26	2.52
Be	1.66	1.92
B	1.56	1.70
C	1.82	1.45
N	2.07	1.28
O	2.00	1.32
F	2.26	1.17
Ne	2.52	1.05
-----		
Na	1.84	3.88
Mg	2.25	3.18

- 1) ほとんど同じエネルギーをもち一番外側にある満員または半分満員の軌道をすべて**原子価軌道**という。
- 2) 原子価軌道に入っている電子を**原子価電子**という。

$$E = -E_{\text{ionization}} = -313.6 \times \frac{Z^{*2}}{n^2}$$

Z\*: 有効核電荷

$$\bar{r} = \frac{0.529 \times n^2}{Z^*} \left\{ \frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{2n^2} \right\}$$

$\bar{r}$ : 一電子軌道の平均半径

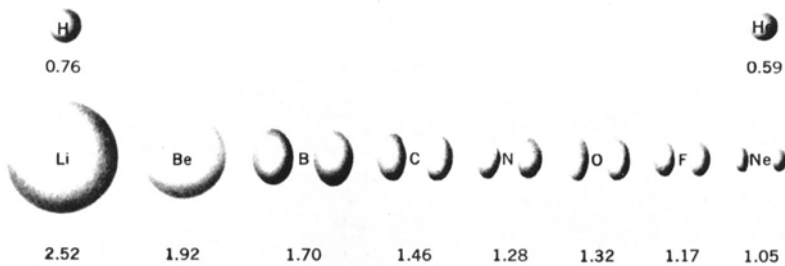


図 2・5 一電子、有効電荷モデルによる原子の平均半径

問題) H~Ne、K~Ti、Zn~Ge の各元素の電子配置を矢印表記 (または巣箱表示) で表しなさい。

表 2・4 アルカリ土類金属の軌道占有状態とイオン化エネルギー

電子構造		$E_1$	$E_2$	$E_3$
		[kcal/mol]		
Be	$1s^2 2s^2$	215	420	3548
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	176	346	1847
Ca	$2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 4s^2$	141	274	1181
Sr	$3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2$	131	254	1005
Ba	$4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2$	120	231	819
Ra	$5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2 7s^2$	122	234	—

表 2・5 酸素族の軌道占有状態とイオン化エネルギー

電子構造		$E_1$	$E_2$	$E_3$
		[kcal/mol]		
O	$1s^2 2s^2 2p^4$	314	810	1266
S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	239	540	807
Se	$2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^4$	225	496	738
Te	$3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^4$	208	429	720
Po	$4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^4$	194	447	630

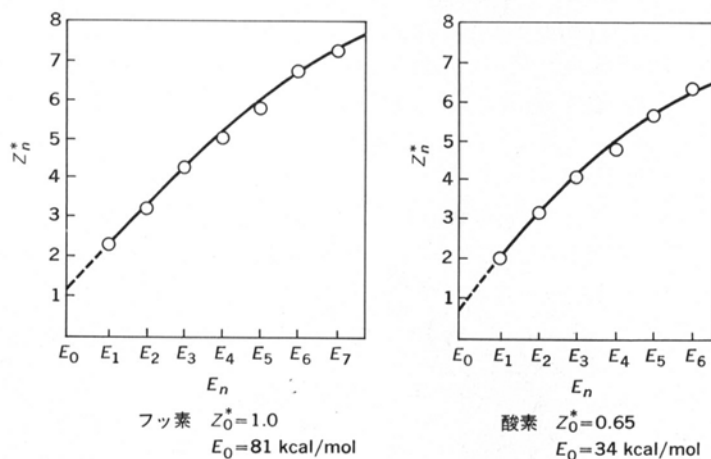
表 2・6 一電子近似によるアルカリ土類金属および酸素族の有効核電荷と平均半径

	$Z^*$	$\bar{r}$ [Å]		$Z^*$	$\bar{r}$ [Å]
Be	1.65	1.92	O	2.00	1.32
Mg	2.25	3.18	S	2.62	2.53
Ca	2.68	4.74	Se	3.39	3.59
Sr	3.24	6.13	Te	4.07	4.74
Ba	3.71	7.69	Po	4.72	5.94
Ra	4.36	8.92			



電子親和力  $E_0 = +81 \text{ kcal/mol}$

フッ素原子が電子を捕獲して安定化する理由を、一電子モデルによるイオン化エネルギーを使って考察してみよう。図 2・10 は、フッ素の原子価電子を逐次取る



この曲線を補外すると(点線)、陰イオンのイオン化エネルギー ( $E_0$ ) が求まる

図 2・10  $n$  番目の電子を取去るときの有効核電荷 ( $Z_n^*$ ): フッ素および酸素

ときの有効核電荷を目盛ったものであり、この曲線を補外すると“ $E_0$ ”が求められる。その結果、陰イオンからもっとも取除きやすい電子の感じる有効核電荷は、