

多電子原子

名前 解答例

[21]の答え

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|}$$

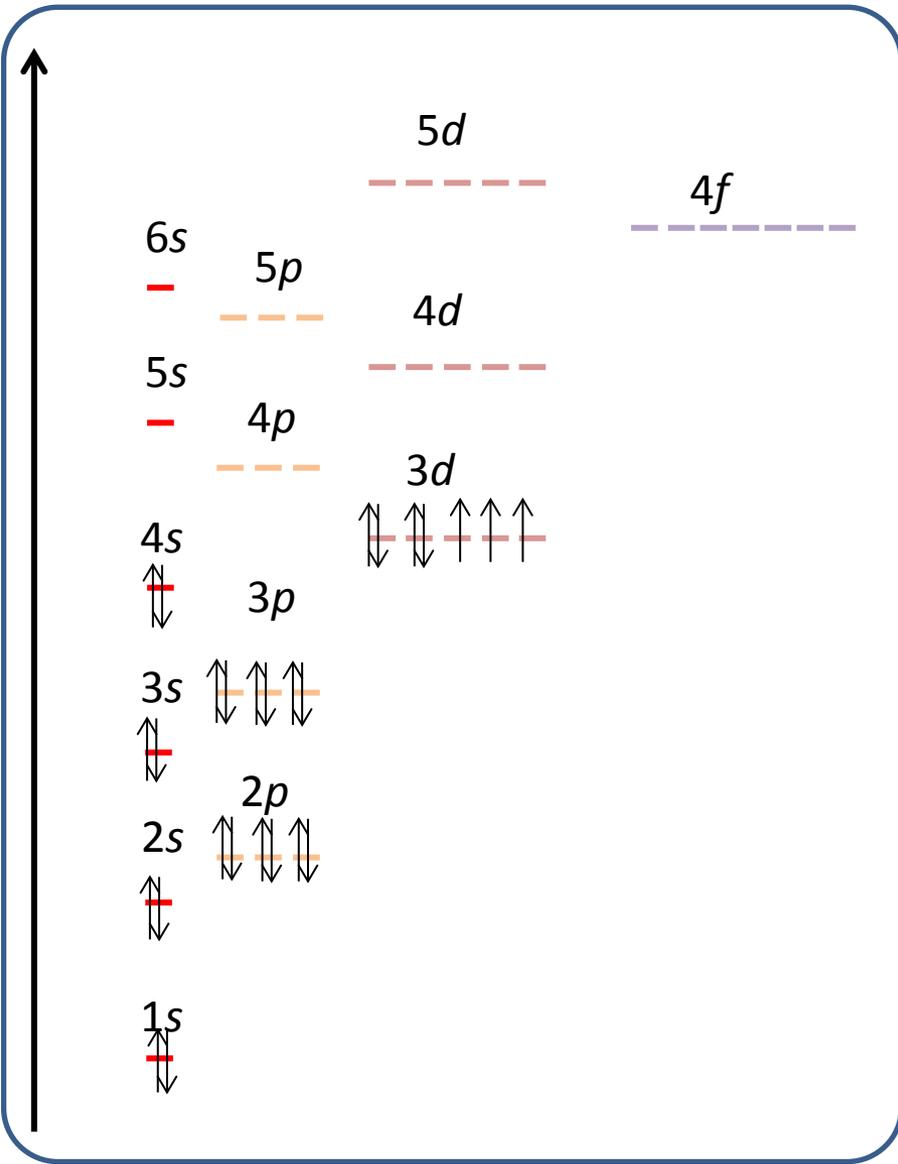
[20](1)パウリの排他原理とは、一つの軌道には最大2電子しか入ることができず、しかも2電子が同一軌道に入るときは、スピンを逆向きにして詰まっていくという原理である。またフントの規則とは、エネルギーが縮退した軌道に関しては、電子はスピンを同じ向きにそろえつつ、異なる軌道に入る方が安定であるという法則である。

この二つの規則に基づいて、電子はまずエネルギーの低い軌道から2電子ずつスピンを反平行にして入っていく。そして最外殻電子が縮退軌道になる場合に関しては、フントの規則を満たしながら電子は詰められていく。

(図を使って説明してもなおよいです)

答え

27個下から順に詰めようとする
最後のdが縮退するから
そこだけフントの規則を投入



(3) エネルギー準位の低い軌道を追っていくと、1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 6s, 4f, 5d...となっている。また周期表を原子番号順にたどると同様の順番でs,p,d,fなどのブロックを通過していることが確認できる。

このブロックとは多電子原子のシュレディンガー方程式を解いて得られるエネルギー準位に対して、価電子(最外殻にいる電子)が何軌道に入っているかに対応している。

したがって周期表は全く異なる経験則から、シュレディンガー方程式よりも前に導き出されたものではあるが、シュレディンガー方程式はその原子の周期律を正しく説明できる理論であることが実感できる。

