

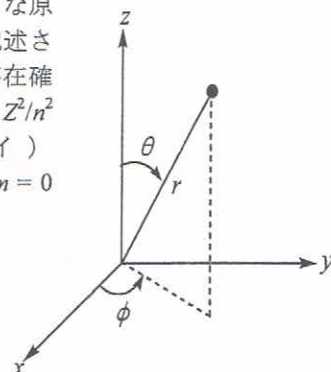
化学A宿題7 解答用紙

提出日 2019年 月 日 授業名 化学A

学年: 学科: クラス: 学籍番号 氏名

問題1. 以下の文章を読み、(ア)～(コ)には、最も適当な語句、記号、数値(有効数値3桁)を入れなさい。

水素様原子の波動関数は、右の極座標系で3つの量子数 n, l, m を用いて、以下に示すような原子核—電子間の距離 r だけに依存する関数 $R_{n,l}(r)$ と角度部分を記述した関数 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ の積で記述される。 $R_{n,l}(r)$ は、原子核と電子の間にはたらくポテンシャルと関係し、 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ は、電子の存在確率の角度依存性を表し軌道の形と方向を決めている。水素様原子のエネルギーは $E_n = -R \times Z^2/n^2$ (eV) で表現される。量子数 l は0から始まり(ア)を超えない値をとる。また量子数 m は(イ)より小さい正負の整数をとる。また、 $l=0, m=0$ に対応する軌道の形は(ウ)状、 $l=1, m=0$ の軌道の形は(エ)軸方向に広がりをもつ。



$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{a_0} \right) \quad R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{2a_0} \right)$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} r \exp \left(-\frac{Zr}{2a_0} \right) \quad Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

電子が存在する確率が最大となる距離 r は、関数 $r^2 R_{n,l}(r)^2$ が最も大きくなる距離 r_{\max} である。 Li^{2+} の 2s 軌道では $r_{\max} =$ (オ) a_0 であり、この軌道のイオン化エネルギーは(カ) eV と見積もられる。

水素様原子において各軌道上の電子の原子核からの平均距離すなわち平均軌道半径 r_{AV} は、

$$r_{\text{AV}} = \frac{3}{2Z} \left[n^2 - \frac{l(l+1)}{3} \right] a_0 \dots (1)$$

で与えられる。 Li の 2s 軌道のイオン化エネルギーは 5.39 eV である。一般に多電子原子において、着目する電子が感じる中心原子核の電荷を有効核電荷 Z_{eff} とすると、その軌道の電子のエネルギーは $E_n = -R \times Z_{\text{eff}}^2/n^2$ (eV) と書ける。これより、2s 電子の感じる有効核電荷 Z_{eff} を(1)式の Z の代わりに代入すると、2s 軌道について $r_{\text{AV}} =$ (キ) a_0 と求まる。同様にリチウムの 2p 軌道のイオン化エネルギーは 3.54 eV であり、 $Z_{\text{eff}} =$ (ク)、 $r_{\text{AV}} =$ (ケ) a_0 と求まる。このように、2s 電子と 2p 電子の r_{AV} はほぼ同じであるが、 Z_{eff} に違いが見られる。これは 2p 軌道では原子核のところに(コ)があり、(コ)がない 2s 軌道に比べて原子核付近の存在確率が小さいためである。このため 2p 軌道は内殻電子による遮蔽効果を 2s 軌道に比べ強く受ける。(1)式に従えば、周期表の同じ周期で原子番号の増加に従いイオン化エネルギーが変化すると、有効核電荷は(サ)し平均軌道半径は(シ)する傾向がある。

解答欄

ア: $n-1$ イ: l ウ: 球 エ: z

オ: $\frac{3+\sqrt{5}}{3}$ (=1.75) カ: 30.6 キ: 4.76 ($Z_{\text{eff}}=1.26$)

ク: 1.02 ケ: 4.90 コ: 節面 サ: 増加 シ: 減少

【解説】

前半は、水素原子の波動関数が、動径部分 $R_{n,l}(r)$ と角度部分 $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ の積として表現されることをきちんと理解しているかを、量子数 n, l, m と対応させて解答できるかがポイントです。

後半は、遮蔽効果を平均軌道半径から評価しようという問題で、水素様原子と多電子原子での電子準位の振る舞いが、原子軌道の形状の違いによって遮蔽効果が異なることに起因していることを理解していれば、問題についていけるものと思います。解答する数値は、難しい計算をしなくても出てきます。

注

オ 前回宿題の問題1-②を参照(半径と水素原子型陽イオンの電荷数の関係に注意)、カ $E = 13.6 (3^2/2^2) = 30.6$ キ $Z_{\text{eff}} = (5.39/3.40)^{1/2} = 1.26$ より求める。 ク $(3.54/3.40)^{1/2} = 1.02$