

# 多電子原子の波動関数

## 【多電子系原子】

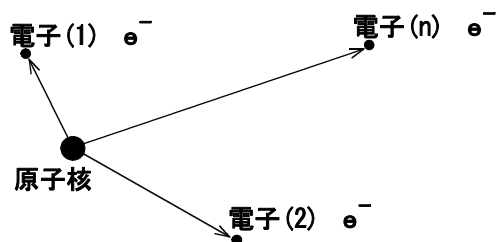
[多電子系での Schrödinger の方程式]

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 \phi + \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 \phi + \dots + \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_n^2 \phi + (E - V) \phi = 0 \quad (3.3.1)$$

$$H\phi = E\phi \quad (3.3.2)$$

$$H \equiv -\left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 + \dots + \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_n^2\right) + V \quad (3.3.3)$$

摂動法  
変分法



[ポテンシャル]

$$V = -\frac{z^{\text{eff}} e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.3.4)$$

$$z^{\text{eff}} = z - \sigma \quad (3.3.5)$$

[波動関数のエネルギー]

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p \quad (3.3.6)$$

## 【P a u l i の原理】

[スピン量子数]

$$\underset{\sim}{s} = \pm \frac{1}{2} \quad (33 \cdot 7)$$

[電子間反発]

H u n d の法則

[問 33・1] ホウ素の基底状態での電子配置は、 $1s^2 2s^2 2p^1$  である。炭素の電子配置は、 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$  である。窒素 ( $z=7$ )、酸素 ( $z=8$ )、フッ素 ( $z=9$ )、ネオン ( $z=10$ )、スカンジウム ( $z=21$ )、チタン ( $z=22$ ) について、電子配置を書け。

[問 33・2]  $3d$  の波動関数の立体的な大きさは、 $4s$  の大きさの半分以下である。このことから、つぎの事実を説明せよ。

『S c から N i までの遷移元素では、 $3d$  電子は  $4s$  電子よりもエネルギーが大きく、電子の配置も  $3d$  電子は空席のままである。それにも関わらず、その「錯体」の化学結合では、外側の  $4s$ 、 $4p$  が重要な働きをするのに、空席状態の（配位結合に都合のよい） $3d$  電子は、内殻にある電子に準じた（結合にほとんど関与しない）働きをする』