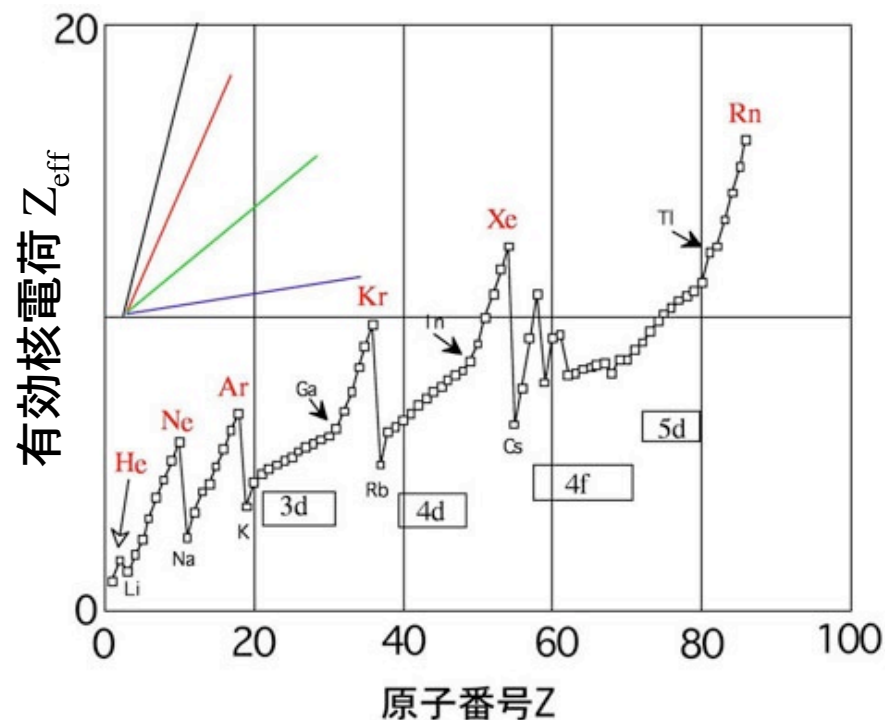


E. Clementi et al., J. Chem. Phys. 47, 1300 (1967).

原子番号1番から36番までの元素の各軌道にある電子の有効核電荷

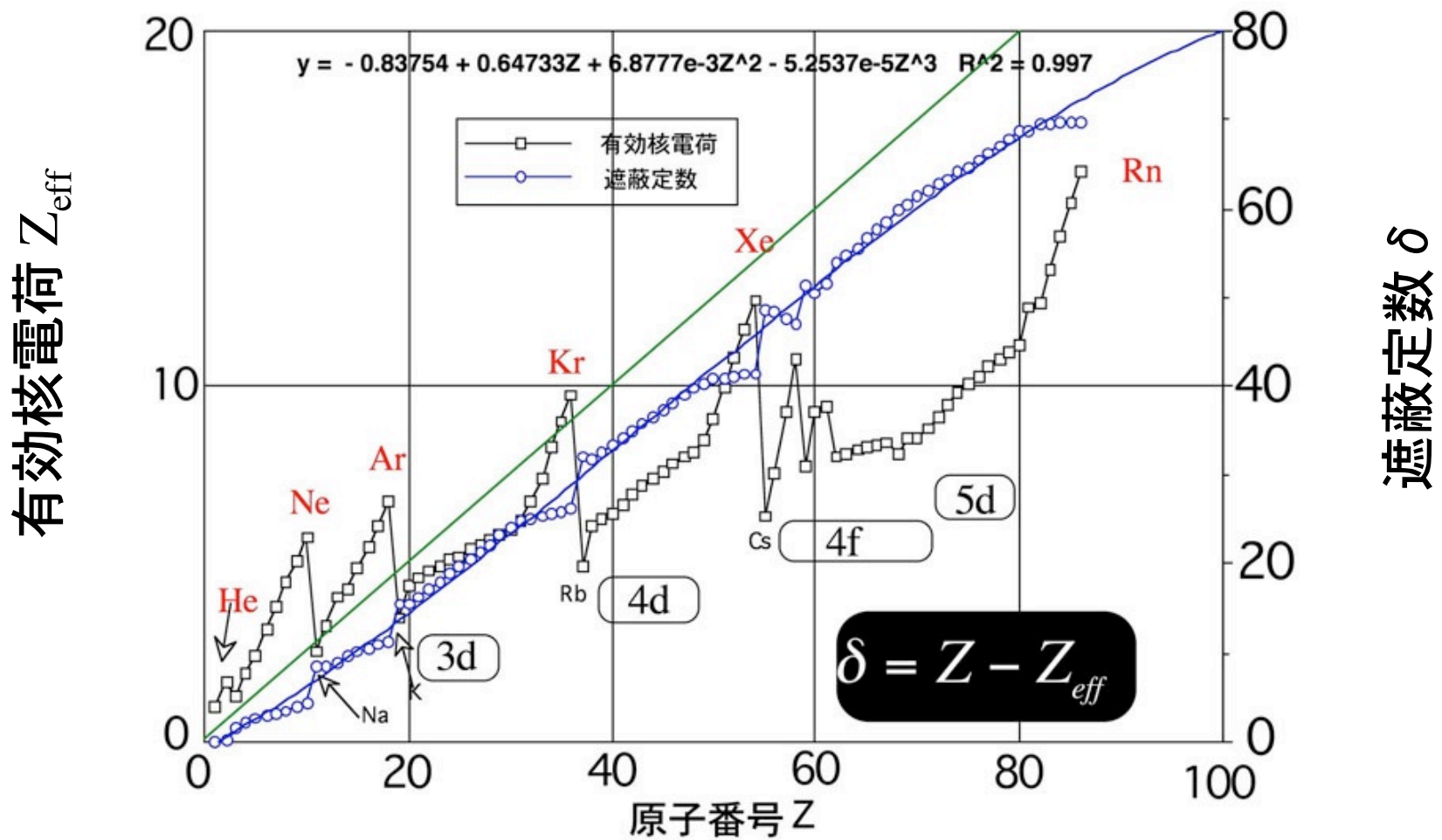
元素	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p
H	1.000							
He	1.688							
Li	2.691	1.279						
Be	3.685	1.912						
B	4.680	2.576	2.421					
C	5.673	3.217	3.136					
N	6.665	3.847	3.834					
O	7.658	4.492	4.453					
F	8.650	5.128	5.100					
Ne	9.642	5.758	5.758					
Na	10.626	5.571	6.802	2.507				
Mg	11.619	7.392	7.826	3.308				
Al	12.591	8.214	8.963	4.117	4.066			
Si	13.575	9.020	9.945	4.903	4.285			
P	14.558	9.825	10.961	5.642	4.886			
S	15.541	10.629	11.977	6.367	5.482			
Cl	16.524	11.430	12.993	7.068	6.116			
Ar	17.508	12.230	14.008	7.757	6.764			
K	18.490	13.006	15.027	8.680	7.726	3.495		
Ca	19.473	13.776	16.041	9.602	8.658	4.398		
Sc	20.457	14.574	17.055	10.340	9.406	4.632	7.120	
Ti	21.441	15.377	18.065	11.033	10.104	4.817	8.141	
V	22.426	16.181	19.073	11.709	10.785	4.981	8.983	
Cr	23.414	16.984	20.075	12.368	11.466	5.133	9.757	
Mn	24.396	17.794	21.084	13.018	12.109	5.283	10.528	
Fe	25.381	18.599	22.089	13.676	12.778	5.434	11.180	
Co	26.367	19.405	23.092	14.322	13.435	5.576	11.855	
Ni	27.353	20.213	24.095	14.961	14.085	5.711	12.530	
Cu	28.339	21.020	25.097	15.594	14.731	5.858	13.201	
Zn	29.325	21.828	26.098	16.219	15.369	5.965	13.878	
Ga	30.309	22.599	27.091	16.996	16.204	7.067	15.093	6.222
Ge	31.294	23.365	28.082	17.760	17.014	8.044	16.251	6.780
As	32.278	24.127	29.074	18.596	17.850	8.944	17.378	7.449
Se	33.262	24.888	30.065	19.403	18.705	9.758	18.477	8.287
Br	34.247	25.643	31.056	20.218	19.571	10.553	19.559	9.028
Kr	35.232	26.398	32.047	21.033	20.434	11.316	20.626	9.769



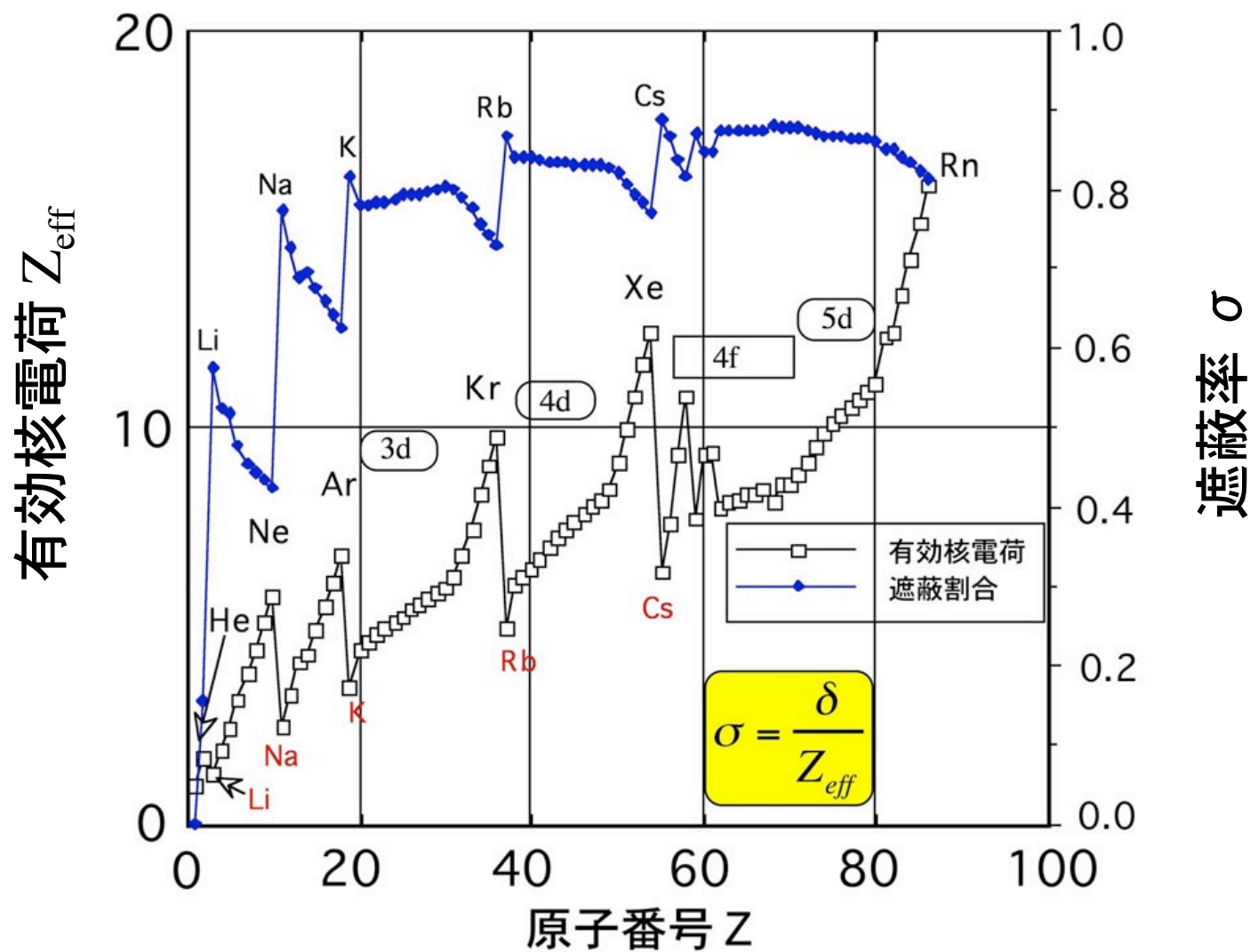
- ① $ns^1 \sim np^q (n=2,3,4,5,)$ に対して、0.6~0.9/電子
- ② $ns^2(n-1)d^0 \sim ns^2(n-1)d^q (n=4,5,6)$ に対して、0.15~0.25/電子
- ③ 4f電子に対しては、0.1/電子程度

有効核電荷 (1)

有効核電荷 (2)



有効核電荷と遮蔽定数



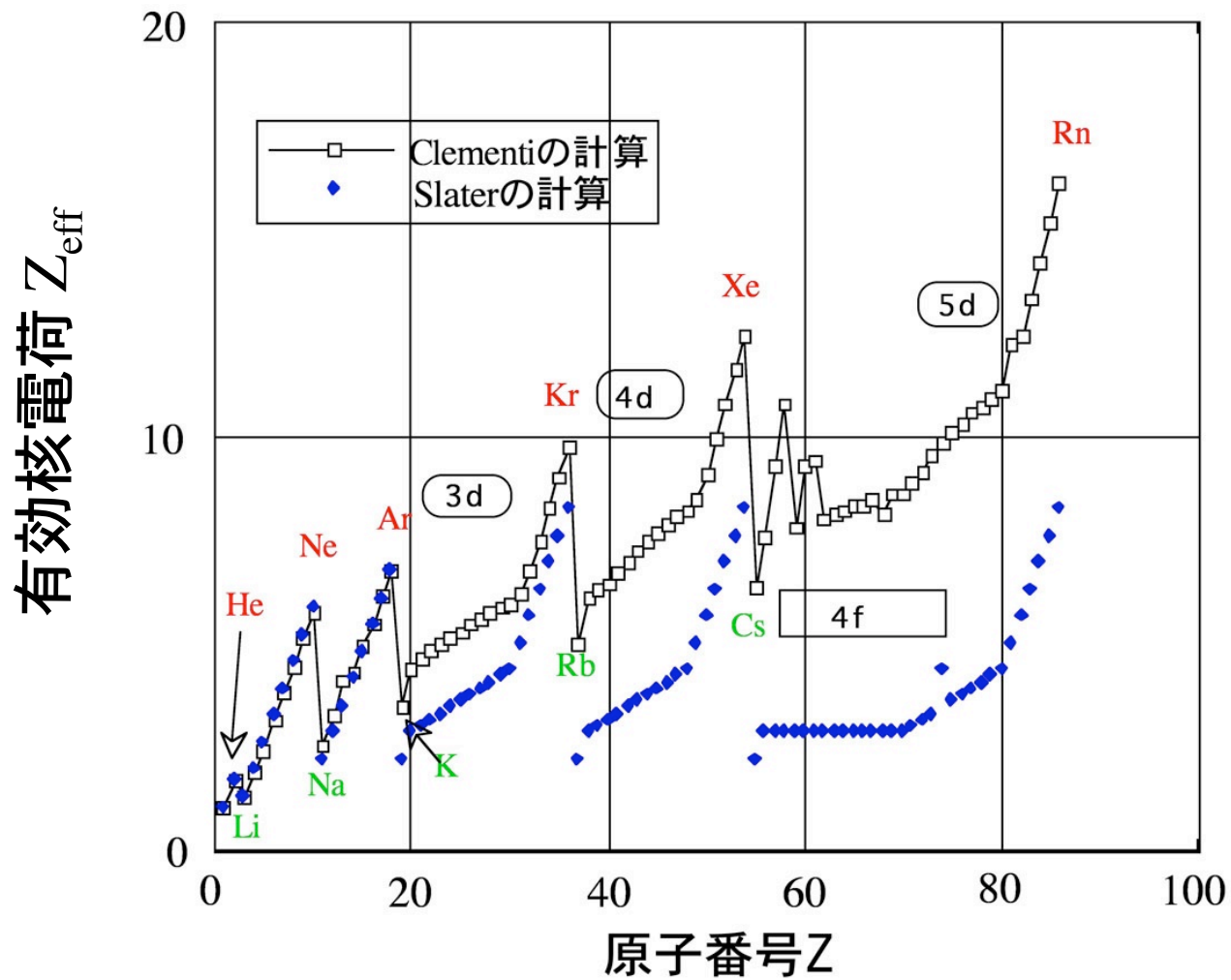
有効核電荷と遮蔽率

Slaterの有効核電荷の求め方

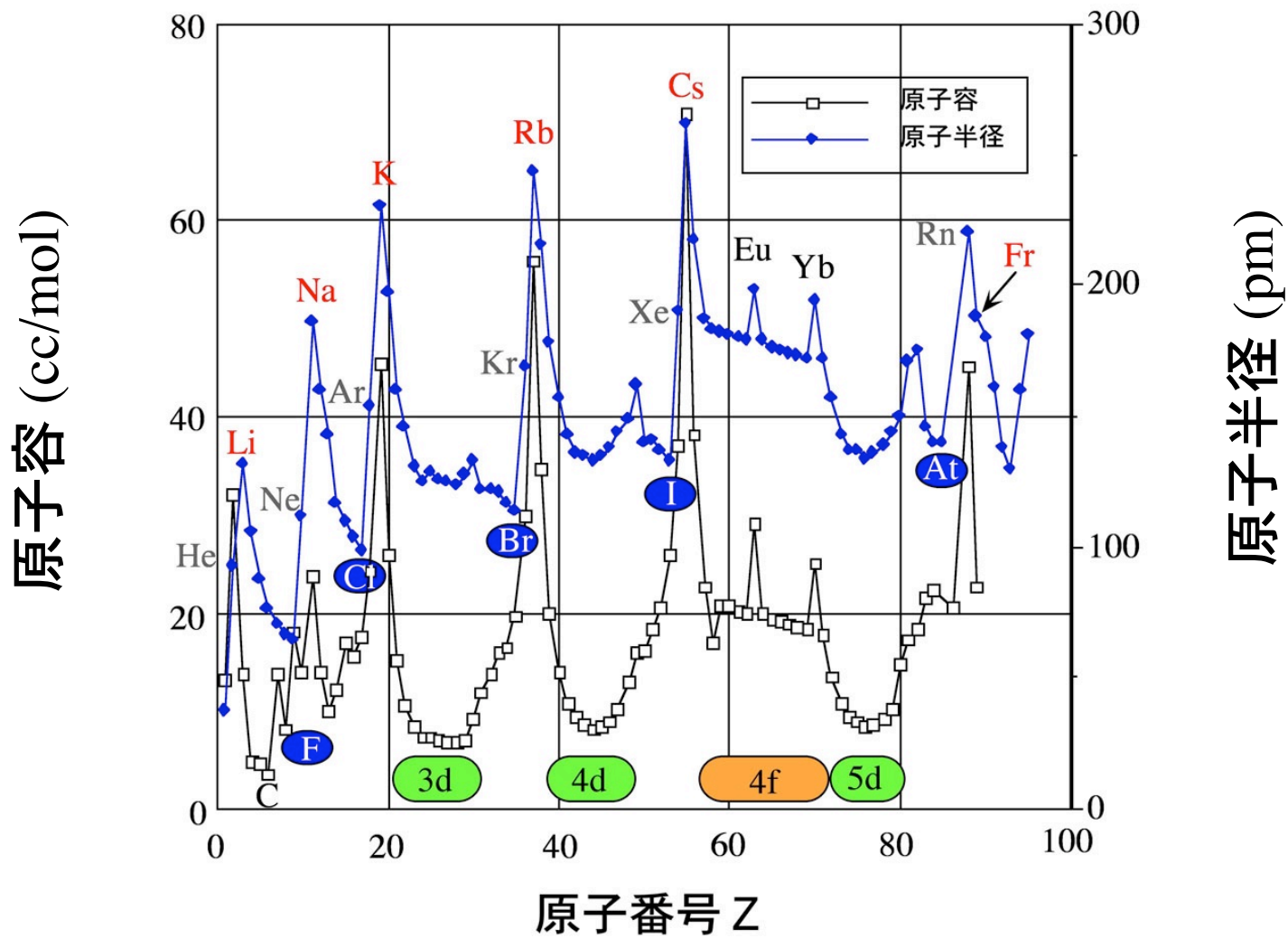
電子配置を軌道により組み分けする： $[1s][2s2p][3s3p][3d][4s4p][4d][4f][5s5p][5d][5f]$ ・・・すなわち，主量子数 n で $[]$ にくくるのであるが，その中で d, f 電子は別扱いとする．いま，主量子数 n にある電子の遮蔽定数 δ を求めることを考えよう．この電子より高い軌道 $(n+1)$ にある電子による遮蔽はゼロとする．同じ n にある他の電子の遮蔽は電子1個あたり0.35、 n より内側にある $(n-1)$ 殻の電子1個については0.85、 $(n-2)$ 殻より内部の電子はすべて1と仮定する．また， d や f 電子では，その内部殻の電子はすべて完全に遮蔽に寄与すると仮定する．これをまとめると，次のようになる．

- (1) $[ns, np]$ グループの電子にとって，その右側（外側）のグループの電子は遮蔽に寄与しない．
- (2) $[ns, np]$ グループの電子にとって，同じグループの他の電子は0.35の電荷分の寄与がある．ただし $1s$ は0.3とする．
- (3) $[n-1]$ グループの各電子は0.85の寄与をする．
- (4) $[n-2]$ またはそれ以下のグループは1.0の寄与をする．
- (5) $[nd], [nf]$ グループの電子にとって，(1),(2)の規則はそのままであるが，左側（内側）のグループのすべての電子が1.0の寄与をする．

有効核電荷を求めるSlaterの経験則



SlaterとClementiの有効核電荷

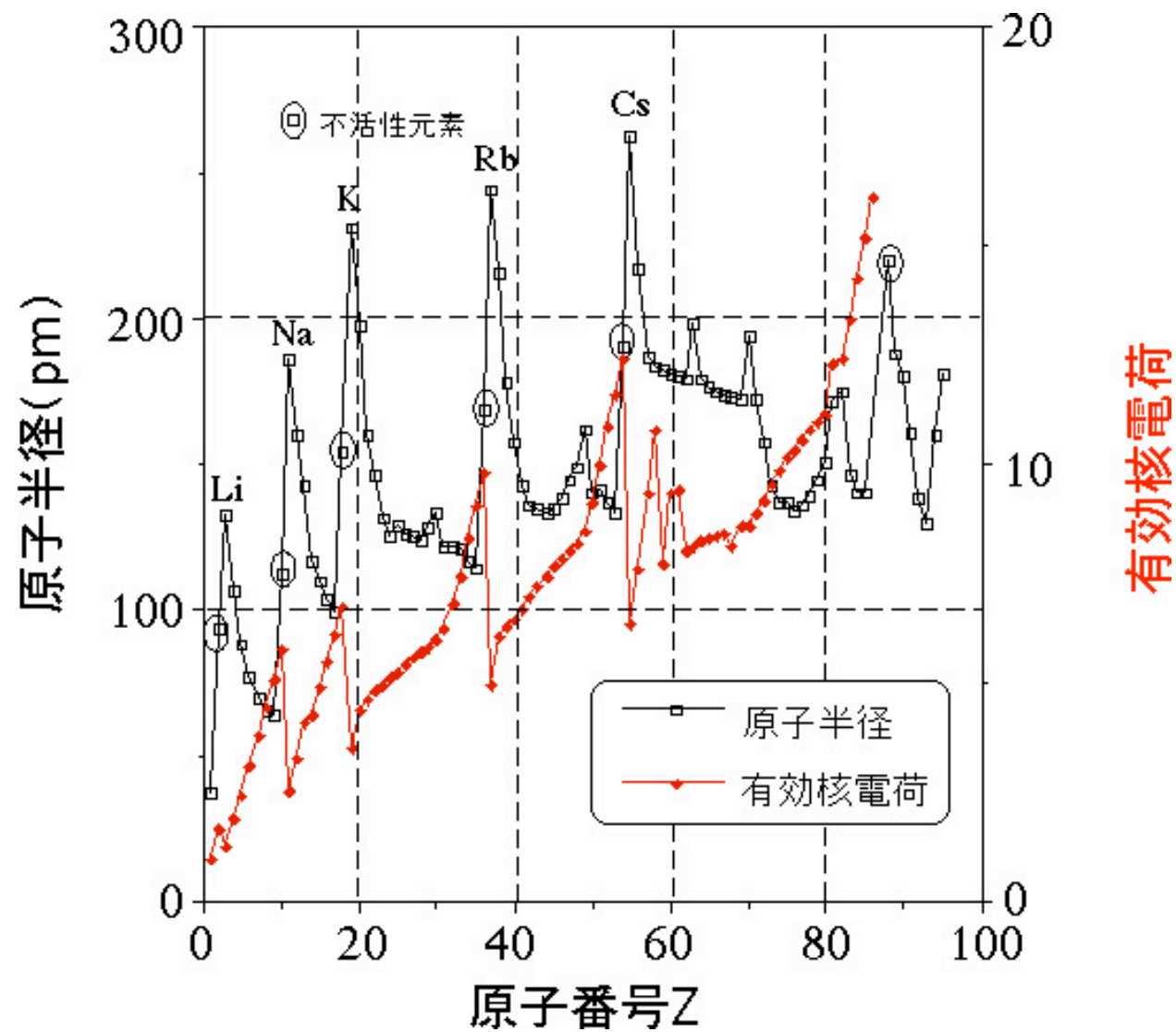


原子容と原子半径

1		2		3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18	
1 H 37 208 ⁺																		2 He 93																	
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;"> 原子半径 (金属結合または共有結合) イオン半径 (数字の肩は価数を示す) </div>																		← pブロック元素 →																	
																		3B		4B		5B		6B		7B									
3 Li 132 68 ⁺	4 Be 106 88 ⁺																	5 B 88 21 ⁺	6 C 77 -	7 N 70 140 ⁺	8 O 66 140 ⁺	9 F 64 136 ⁺	10 Ne 112												
11 Na 186 97 ⁺	12 Mg 160 66 ⁺	← dブロック元素 →																13 Al 143 61 ⁺	14 Si 117 40 ⁺	15 P 110 185 ⁺	16 S 104 186 ⁺	17 Cl 99 181 ⁺	18 Ar 154												
		3A		4A		5A		6A		7A		8		1B		2B																			
19 K 231 133 ⁺	20 Ca 197 99 ⁺	21 Sc 160 81 ⁺	22 Ti 146 76 ⁺	23 V 191 74 ⁺	24 Cr 125 69 ⁺	25 Mn 129 66 ⁺	26 Fe 126 64 ⁺	27 Co 125 63 ⁺	28 Ni 124 62 ⁺	29 Cu 128 96 ⁺	30 Zn 133 83 ⁺	31 Ga 122 62 ⁺	32 Ge 122 53 ⁺	33 As 121 69 ⁺	34 Se 117 200 ⁺	35 Br 114 196 ⁺	36 Kr 169																		
37 Rb 244 152 ⁺	38 Sr 216 116 ⁺	39 Y 178 106 ⁺	40 Zr 157 74 ⁺	41 Nb 149 74 ⁺	42 Mo 136 62 ⁺	43 Tc 135 72 ⁺	44 Ru 133 77 ⁺	45 Rh 185 75 ⁺	46 Pd 138 64 ⁺	47 Ag 144 113 ⁺	48 Cd 149 103 ⁺	49 In 162 81 ⁺	50 Sn 140 71 ⁺	51 Sb 141 92 ⁺	52 Te 137 224 ⁺	53 I 133 220 ⁺	54 Xe 190																		
55 Cs 262 170 ⁺	56 Ba 217 136 ⁺	57 La 187 122 ⁺	72 Hf 157 76 ⁺	73 Ta 143 68 ⁺	74 W 137 62 ⁺	75 Re 137 72 ⁺	76 Os 134 81 ⁺	77 Ir 136 75 ⁺	78 Pt 139 70 ⁺	79 Au 144 137 ⁺	80 Hg 150 112 ⁺	81 Tl 171 95 ⁺	82 Pb 175 84 ⁺	83 Bi 146 108 ⁺	84 Po 140 65 ⁺	85 At 140 -	86 Rn																		
87 Fr	88 Ra 220 150 ⁺	89 Ac 188 118 ⁺	104 Rf	105 Ha														カルコゲン 元素	ハロゲン 元素	不活性 元素															
← sブロック元素 →		ランタノイド		58 Ce 183 107 ⁺	59 Pr 182 106 ⁺	60 Nd 181 104 ⁺	61 Pm 180 106 ⁺	62 Sm 179 100 ⁺	63 Eu 198 98 ⁺	64 Gd 179 97 ⁺	65 Tb 176 93 ⁺	66 Dy 175 91 ⁺	67 Ho 174 89 ⁺	68 Er 173 89 ⁺	69 Tm 172 87 ⁺	70 Yb 194 86 ⁺	71 Lu 172 85 ⁺																		
アルカリ 元素		アルカリ 土類 元素		アクチノイド		90 Th 180 94 ⁺	91 Pa 161 98 ⁺	92 U 188 97 ⁺	93 Np 130 95 ⁺	94 Pu 160	95 Am 181	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr																
																		← fブロック元素 →																	

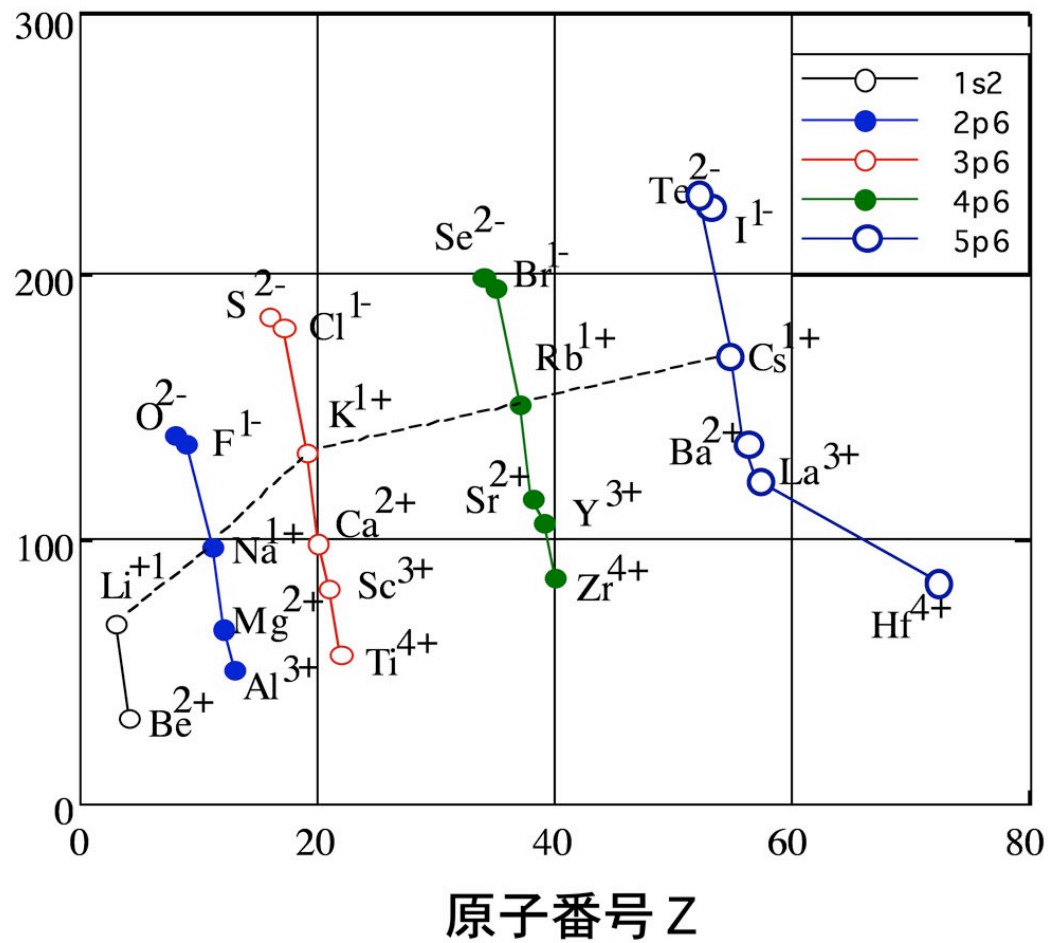
井口紳夫：元素と周期率（基準房）より

原子半径とイオン半径



原子半径と有効核電荷

イオン半径 (pm)



等電子イオン半径と原子番号