

1. Introduction / はじめに...

This is only contents. Please take note. / これは目次だけです. ノートをとって下さい.
Takahashi recommends GSEP students to get used to Japanese.

2. Logical system of Mathematics (Logic), Classical mechanics, and Quantum mechanics
数学 (論理学) 古典力学, 量子力学の論理体系

- Definition, Axiom, Theorem : Mathematics (Logic)
定義, 公理, 定理 : 数学 (論理学)
- Definition, Principles, Law : Classical mechanics, and Quantum mechanics
定義, 原理, 法則 : 古典力学, 量子力学

3. Equation of Motion in Classical mechanics / 古典力学における運動方程式

Newton's equation of motion / ニュートンの運動方程式

Hamilton's canonical equations / ハミルトンの正準形式

Ex.) mass in gravity field (Analytical mechanics) / 例) 地球上の物体 (解析力学)

4. Classical mechanics to Quantum mechanics / 古典力学から量子力学へ

- de Broglie's matter wave / ドブロイの物質波
- Uncertainty principle / 不確定性原理
- Real number to Hermitian operators / 実数から演算子 (エルミート演算子) へ
Expression of physical quantities / 物理量の表し方
Matrixes : Matrix mechanics (Heisenberg) / 行列 : 行列力学 (ハイゼンベルグ)
Operators : Schrödinger's q. mechanics / 演算子 : シュレディンガーの量子力学

5. Schrödinger's quantum mechanics / シュレディンガーの量子力学

- Physical quantities : real number \rightarrow operator / 物理量 : 実数 \rightarrow 演算子
- Observable : Eigenvalue of operator / 観測量 : 演算子の固有値
- State : Wave function / 状態 : 波動関数

6. Schrödinger's equation for materials and approximation methods to solve it

物体に対するシュレディンガー方程式とそれを解くための近似方法

- One electron approximation / 1 電子近似 (スピンの取扱い)
- Jellium approximation / ジェリウム近似
- expansion of wave function / 波動関数の展開

etc...

Quantum mechanics (Q.M. is easy and simple !)

量子力学は簡単&単純 !

Approximation method is confusing (doubtful) = difficulty of Q.M.?

近似の仕方が複雑 (怪しい) = 量子力学の難しさ ?

7. Isolated hydrogen atom / 孤立水素原子

Analytic solution exists. / 解析解がある

Quantum number (principal..., azimuthal..., magnetic...) / 量子数 (主..., 方位..., 磁気...)

Probability density distribution / 存在確率分布

Energy observed = eigenvalue of Hamiltonian

観測されるエネルギー = ハミルトニアン固有値

Spectral lines emitted / 輝線スペクトル

Derivation of Rydberg constant \Leftrightarrow Magic number / リュードベリ定数の導出 \Leftrightarrow 昔は魔法数

8. Isolated one electron ion / 孤立 1 電子イオン

Analytic solution exists. / 解析解がある

9. Isolated neutral atom / 孤立中性原子

Periodic table, Ionization energy, Electric negativity, Atomic radius

周期律表, イオン化エネルギー, 電気陰性度, 原子半径

Energy of isolated multi-e. atom \simeq

term of isolated 1-electron atom energy + interaction term between electrons

多電子系孤立原子のエネルギー \simeq 1 電子系孤立原子のエネルギー項 + 電子間相互作用項

10. Hydrogen molecule ion (the simplest molecule) / 水素分子イオン (最も単純な分子)

LCAO approximation, Secular (characteristic) equation, Bonding and Anti-bonding orbital

LCAO 近似, 永年方程式, 結合軌道と反結合軌道

Formation energy of hydrogen molecule (Heat of reaction)

水素分子の生成エネルギー (反応熱)

Probability density distribution of electron / 電子の確立密度分布

11. Hetero-nuclear diatomic molecule ions / 異核 2 原子分子イオン

Coefficient applied to atomic orbitals in LCAO approximation and charge transfer

LCAO 近似における原子軌道関数の係数と電荷移動

(1) Ion bond, Covalent bond, Metallic bond

イオン結合, 共有結合, 金属結合

(2) Conductor, Semi-conductor, Insulator

導体, 半導体, 絶縁体

Bonding and Anti-bonding orbitals = valence band and conduction band

結合軌道と反結合軌道 = 価電子帯と伝導帯

(3) Hybrid orbitals (sp, sp², sp³), Diamond, Si-single crystal

混成軌道 (sp, sp², sp³) ダイヤモンド・シリコン単結晶,

(4) Diatomic molecule gases / 2 原子分子気体

(5) Organic compounds / 有機化合物

(6) Transient metals / 遷移金属

(7) Inert gases / 不活性ガス

(8) Van der Waals force, image force / ファンデルワールス力, 鏡像力, , ,

12. Free electron (electron gas) approximation 自由電子 (電子ガス) 近似

Expansion of wave function to plane waves \Leftrightarrow LCAO approximation

波動関数の平面波展開 \Leftrightarrow LCAO 近似

Bloch theorem, diffraction of electron beam, band / ブロッホ定理, 電子線の回折, バンド

13. Systematic understanding of materials based on atomic interaction (periodic table)

原子間結合状態に基づく物質の体系的理解 (周期律表)

Cohesive energy and Melting points of materials / 物質の凝集エネルギーと融点

Ductility, Malleability, Brittleness / 延性, 展性, 脆性

Ionic bonding, Covalent bonding, Metallic bonding / イオン結合性, 共有結合性, 金属結合性

Electrical conductivity, Thermal conductivity / 電気伝導性, 熱伝導性

14. Structure and characteristics of material (molecules) / 物質 (分子) の構造と性質

(1) Electrical conductivity : conductors, semi-conductors, and insulator

電気伝導性 : 導体, 半導体, 絶縁体

Semi-conductor : rectifying action and photo-emission of diode,

transistor, photo-transistor

半導体 : ダイオードの整流作用と発光作用, トランジスタとフォトトランジスタ

Fluorescent materials and electronic transition, Auger transition

蛍光物質と電子の遷移（遷移確率）、Auger 遷移

- (2) Thermal conductivity : electron or phonon / 熱伝導性 : 電子かフォノン
- (3) Magnetism : electronic spin, Angular momentum of electron, Magnetic Domain
磁性 : 電子のスピン, 電子軌道の角運動量, 磁区
- (4) Ductility, Malleability and Brittleness : Ductile Malleable metals, Brittle ceramics
延性,展性と脆性 : 金属の延性と展性, セラミックスの脆性
- (5) Crystal structure : SC, FCC, HCP, BCC, Diamond, etc...
結晶構造 : SC, FCC, HCP, BCC, Diamond, etc...
- (6) Melting temperature : Cohesive energy and Melting point (W, Hg, C)
融点 : 凝集エネルギーと融点 (W,Hg,C)
- (7) Reactivity : Fluorine coating (Teflon)
反応性 : フッ素コーティング (テフロン®, etc...) 加工

15. Statistical mechanics and Thermodynamics / 統計力学と熱力学

- definition of Temperature / 温度の定義
- definition of “equilibrium” / 「平衡」の定義
- definition of Free energy / 自由エネルギーの定義
- definition of Entropy / エントロピーの定義

Difficulty of thermodynamics arises from lack of the definition in the terms of physics !

熱力学の難しさは上記の量を物理的に定義していないことに起因している !

Without definition, we can not make any logical thinking !

定義が無いのに論理的に思考できるわけがない !

16. 統計(熱)力学的に説明される物質（分子）の構造と性質

- 統計(熱)力学とエルゴード性 : 時間平均, 数平均
- 運動方程式 (含, 量子力学&古典力学) と熱力学のかけ橋 : ボルツマン定数 k (ガス定数)
- 理想気体 (ideal gas, 完全気体 perfect gas)
- エネルギー当分配の法則

$$\left\langle \frac{1}{2} m u^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m w^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k T$$

- Maxwell 分布
- 正準集合とアレニウスプロット

＜エネルギーの授受がある, 粒子数も不変, 全エネルギーも不変な系＞

(系の外部とエネルギーおよび物質の出入りが無い)

→ 「エネルギー e_i を持つ確率 (割合) は $\exp(-e_i/kT)$ に比例する」 !!

- 自由エネルギーとエントロピーが必要になる理由 $S = k \ln W$: ボルツマンの関係式,

(1) 気体の比熱, 固体の比熱

- 気体の比熱

$$C_p = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \quad C_v = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v$$

$$C_p - C_v = Nk \quad : \text{マイヤーの関係 (Mayer's relation)}$$

- 固体の比熱 (比熱容量, Specific Heat Capacity)

アインシュタイン(Einstein)モデル (互いに独立な N 個の調和振動子)

デバイ(Debye)モデル

(2) 化学ポテンシャル, 半導体界面

(3) 表面張力と界面張力

17. 量子統計力学的に説明される黒体放射

プランクの放射則 (黒体放射, 黒体輻射, プランク放射)

$$I(T, \nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad \text{もしくは} \quad I(T, \lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad \text{但し, } \nu = \frac{c}{\lambda}$$

放射温度計

18. エネルギーの移動（熱伝導と電気伝導）

ウィーデマン・フランツ則（Wiedemann-Franz law）

$$\frac{K}{\sigma} = LT, \quad \text{但し, } L = 2.45 \times 10^{-8} (\text{W}\Omega/\text{K}^2) \text{ で一定.}$$

19. 物質の移動（物質の拡散と活性化エネルギー／酔歩理論）

20. 状態の遷移（化学反応と活性化エネルギー，素過程と律速過程）