

化学A 担当教官 中嶋 敦 化学科教授

講義回数 全14-15 回

内容 原子構造・化学結合入門（初等量子化学）

成績 学期末試験（1回）90分・・・5人の教官からの共通出題
3～4回のクイズ演習（出席点） 電卓使用可（関数電卓）

目的 化学物質を微視的（ミクロ）に見るための基本的な概念を紹介し、
原子構造・化学結合に関する事柄への理解を深める。

19世紀	古典力学 電磁気学 熱力学	I. Newton J. C. Maxwell L. E. Boltzmann de Broglie
20世紀	量子力学	Einstein Heisenberg Compton Dirac Bragg Langmuir Planck Lorentz Curie Bohr Born 1927 Solvay Conference on Quantum Mechanics (ベルギー、ブリュッセル)

相対論

説明のつかない実験事実

- ・ 黒体輻射、光電効果、原子の輝線スペクトル

講義内容のもくじ

- 1, 粒子性と波動性
- 2, 水素原子のBohrモデル
- 3, シュレディンガーの波動方程式
- 4, 水素原子の波動関数
- 5, 多電子原子と周期律
- 6, 2原子分子の化学結合
- 7, 混成軌道
- (8, いろいろな化学結合)

シュレディンガーの波動方程式

成績 学期末試験 (1回)
・・・ 5人の教官からの共通出題

3～4回のクイズ演習 (出席点+正答率)
電卓使用可 (関数電卓)

文献 茅幸二、中嶋敦著
岩波講座「化学の考え方」 (岩波書店)
伊藤正時他著 「物理化学演習」 (裳華房)

ヘイワード著、立花明知訳
「入門量子化学」 (化学同人)
ウィンター著、西本吉助訳 「フレッシュマンのための化学結合論」
(化学同人)
小林常利著、「基礎化学結合論」 (培風館)
平尾公彦・加藤重樹著
「化学の基礎」 (講談社サイエンティフィク)

博士チュートリアルアワーのお知らせ

- 1) 開室時間
化学A：金曜日昼 12時00分～13時30分 (4月18日 (金) ～7月18日 (金))
- 2) 場所
第4校舎 独立館地下1階DB104・学習指導室

化学A カフェ 開催 (自由質問時間)

下記の2回程度を予定

7月 11日 (金) 5時限終了後

7月22日 (火) 以降の試験期間中

正式な日程・場所は化学Aの講義でお知らせします。

連絡先 中嶋 敦 (理工学部化学科)

直通電話： 045-566-1712

←直接質問したいのならここに予約

電子メール： nakajima@chem.keio.ac.jp (面談の予約用)

ホームページ： <http://sepia.chem.keio.ac.jp/Nakalab/>

居室： 矢上キャンパス 22棟 404A室

第1章 粒子性と波動性（二重性）

1. 1 光の粒子性と波動性

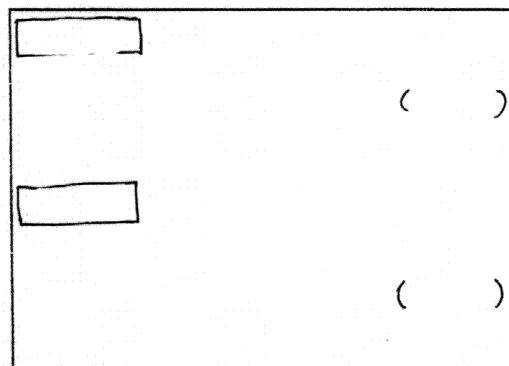
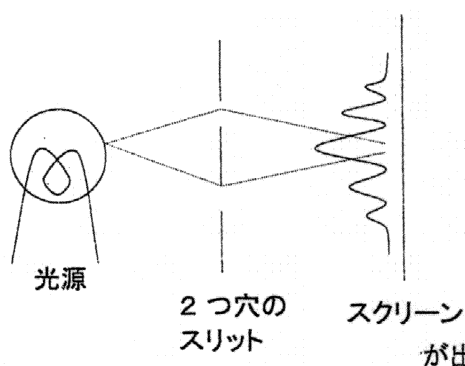
a, 光（ ）の波動性

光は, である。

(光速 で伝播する波)

⇒ が波としての代表的な現象例

の実験



が出来る ⇒

b, 光の粒子性

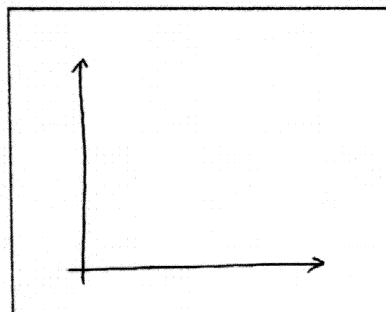
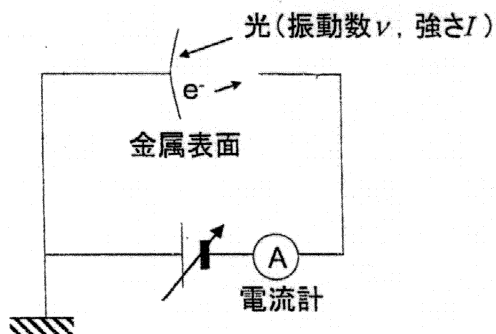
⇒ が代表的な現象例 (プリントp.2 参照)

の実験 (1902) と

説 (1905)

金属表面に光を当てると電子 (特に) という) が飛び出る

このとき, 光電子の運動エネルギー E は するが,
とは無関係である。



光電子1個あたりの は、

$$E = \quad = \quad \text{—} \quad (\text{ここで } h \text{ は} \quad)$$

で表される。そして、

↓

光が

↓

振動数 ν の光は、

以下では、

を増しても



である。

$$\varepsilon = \quad \dots (1.1)$$

(説 (1905))

ここで、 である。

1. 2 光の二重性と物質波

光 $\left\{ \begin{array}{l} \text{波動} \dots \\ \text{粒子} \dots \end{array} \right.$

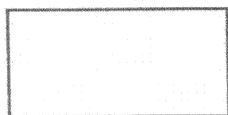
の考え方

光や電子は

をもっている。

粒子の

との間に



$$(h : \text{プランク定数}) \dots (1.2)$$

が成り立つ。()

Braggの反射条件
(プリントp.3 参照)

2つの光路差＝ $\dots (1.5)$

のとき強め合う。(n:)

(1.4)を(1.5)に代入すると,

$$2d \sin \theta =$$

$$\therefore \sqrt{V} = \dots (1.6)$$

のとき, 電子線の回折は

を決めれば

従って, 等間隔に現れるピークは, に由来する回折現象であり,

その間隔 a は, $a =$ である。

【第1章のまとめ】

光も電子も、粒子性と波動性の両方をもつ。

→

どちらの性質が強く反映されるのかは に依存するが、
では、波動性が強調される。

第2章 水素原子のBohrモデル

2. 1 () の実験 (プリントp. 4 参照)

α 粒子線 () を金箔 () に衝突させる。

金 (Au) : 質量数197

⇒ ほとんど全ての α 粒子が

は 10^{-5} の確率

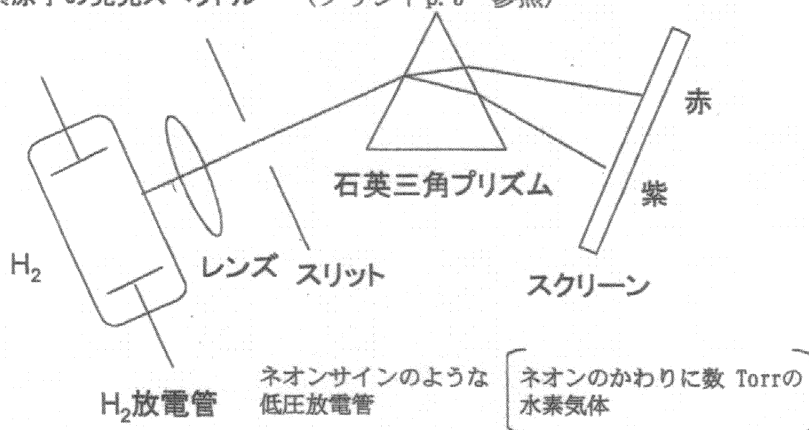
↓
と,

とから構成されている。

(正に帯電)

質量比 電子/陽子=

2. 2 水素原子の発光スペクトル (プリントp. 5 参照)



スクリーン上には放電管から出た光が
得られる。

した

水素原子の発光スペクトルは
そして、その解析から、波長 λ は一般的に、

であった。

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \dots (2.1)$$

(n, m は, $m > n \geq 1$ を満たす整数)

で表せることがわかった。(R は

)

名称: ライマン () 系列: , バルマー () 系列:

(プリントp. 6 参照)

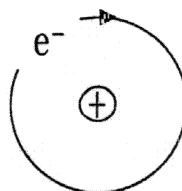
2. 3 ボーア (Bohr) の原子モデル (プリントp. 7 参照)

原子 ←

Nagaoka (長岡半太郎) の

正電荷の原子核のまわりを、たくさんの

⇒荷電粒子が
存在し続けられないという矛盾。



とりまいていて

ので、安定に

ボーアの原子モデル (プリントp. 7 参照)

電子が原子核のまわりを をし、 による と、原子核 (陽子) の とが、つりあっている。

この電子の波が時間的に () 安定であるためには、電子の の が円運動 (半径: r) の しなければならない。

$$2\pi r = \dots (2. 2)$$

de Broglie波長 λ は、(1. 2) 式より、

$$\lambda = \dots (1. 2)$$

であるから、

$$mvr = \dots (2. 3)$$

を、 () 満たさねばならない。

→ 円軌道上の粒子のもつ に対する条件

このモデルを用いると、2. 2で示した水素原子の発光スペクトルが、
ことを以下のようにうまく説明できる。

まず、遠心力= より、

$$\dots (2. 4)$$

(2. 3) 式の
 r は、

を用いて、(2. 4) の v を消去すると、
($n: n \geq 1$ の整数)

$$r(n) = \dots (2. 5)$$

電子のエネルギー E は、
エネルギーの和、

と ポテンシャル

$$E = \dots (2. 6)$$

で与えられる。

(2. 6) に (2. 4) と (2. 5) を代入すると、電子のもつエネルギーは、

$$E = \dots (2. 7)$$

という、 の値になる。

(2. 7) 式より、 のエネルギー差 ΔE は、

$$\Delta E = \dots (2. 8)$$

となる。

$\Delta E =$ であるから、 は、

$$\frac{1}{\lambda} = \dots (2. 9)$$

と表されることになる。

(2. 9) 式は、(2. 1) 式と、 $R = \dots (2. 10)$

とすれば一致する。

実験から求めた R と (2. 9) 式の定数項 はともに、

() であった。 \Rightarrow が示された。

を中心にもつ1個の電子() に拡張すると、

$$R_z = \dots (2. 11)$$

(2. 10) は $Z=1$ の場合。また、水素様原子の軌道エネルギーは、

$$E(n) = \dots (2. 12)$$

である。

【第2章のまとめ】

水素原子の線スペクトル $\frac{1}{\lambda} =$

ボーアの原子モデル (1) $mvr =$

(2) $=$

軌道半径 $r(n) =$

軌道エネルギー $E(n) =$

(注意: $E \leq 0$)