

## 化学A受講者の皆さんへ

以下の2ページは、話す時間がなかったまとめの2ページです。必要な内容は、すべて講義中にお話ししましたので、これからの試験勉強では必ず講義ノートを読み返すようにして下さい。そして、この2ページのまとめを利用して、化学Aの講義で扱った内容の全体像を整理して下さい。キーワードがちりばめられている2ページと考えて下さい。

これから春学期末の試験期間に入ります。勉強を計画的に進めることも大事ですが、体調を崩さないだけの気配りも併せて大切です。どうか1日を、1時間を充実して過ごして下さい。この講義では、意図的に中間テストとして、6月中旬に講義内容を理解し直す機会を作りました。しかし、期末試験は範囲もさらに広いですし、試験問題では基礎学力を踏まえて思考力を働かせてもらう必要があります。これは、皆さんにその場しのぎではない、本当の「実力」を身につける大切さを、早く理解し体得してもらいたいという私からのメッセージです。早めに過去の問題を見て、求められている内容をチェックしながら、試験勉強を進めて下さい。

現在、社会は皆さんに、いわゆるブランドではなく、個人の力量を強く求めています。200名を超える皆さんと一緒に学ぶことができたことは、私には喜びでもありましたが、一方で皆さんの個人個人に合せたきめ細やかな学習には、もっと努力が必要であろうと思っています。毎回、復習にも時間をかけましたが、もともとの知識量が異なる皆さんが、できるだけ多く満足が得られるレベルを、今後探す努力を怠らないようにしたいと思います。またどこかの講義で一緒に勉強できることを楽しみにしています。

### 【化学Aカフェ 追加のお知らせ】

7月29日(火) 2限(10時45分から)、3限(13時から)に、自由質問時間を設定します。各回10名程度で、質問を受けて皆さんの前で解説するという形で実施します。希望者は、下記の形式で申し込んでください。

申し込み方法 メール: nakajima@chem.keio.ac.jp

件名: 化学Aカフェ希望

内容: 氏名、学籍番号、2限、3限の希望 の3つを記入してください。

申し込みの後、私からメール受信の旨を返信します。人数が確定した後に、前日までに矢上キャンパスの集合場所を皆さんが発信したアドレスに返信します。尚、対象は、私のクラス(学門3)の学生さんに限ることにします。

最後に、試験に関数電卓を忘れないように！

中嶋 敦(化学科 教授)

# 化学Aのまとめ

## 1, 粒子性と波動性

すべての物質は粒子性と波動性両方をもつ。ド・ブロイの考え方  $\lambda = h/p$

光の粒子性：光電効果 ( $\varepsilon = h\nu$ )      電子の波動性：Davisson, Germerの実験

→ Braggの反射条件  $2d\sin\theta = n\lambda$  による電子回折現象

## 2, 水素原子のBohrモデル

ラザフォードの実験：原子の構造 → 原子核（質量を担う） + 電子

水素原子の発光スペクトル：離散準位  $1/\lambda = R(1/n^2 - 1/m^2)$   $n=1$  ライマン,  $n=2$  バルマー

ボーアの原子モデル：(1)遠心力と静電引力のつりあい, (2)ド・ブロイ波長の整数倍＝円周長

## 3, シュレディンガーの波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U\psi(x) = E\psi(x)$$

波動関数とエネルギー：波動関数の2乗が存在確率、離散的エネルギー準位構造を記述

1次元の箱の中の粒子：波動関数  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$  エネルギー  $E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}$  ( $n=1,2,3,\dots$ )

## 4, 水素原子の波動関数

座標変換：直交座標  $(x, y, z) \rightarrow$  極座標  $(r, \theta, \phi)$  したシュレディンガー方程式

・ 波動関数  $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi)$       ・ エネルギー  $E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$

・ 動径分布関数  $D(r)$   $D(r) = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\phi$

電子スピン量子数  $s$  の存在  $\Rightarrow s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$       4個の量子数  $n, l, m, s$

原子核の正電荷  $+Z$  の水素様原子      (原子核  $+Ze$ , 電子1個のみ  $-e$ )

波動関数：水素原子の波動関数の  $a_0$  (ボーア半径) を  $a_0 / Z$  と置き換え

エネルギー：  $E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$  ( $Z^2$  に注意)      原子軌道の縮重度： $n^2$

以下、メモ \_\_\_\_\_

## 5. 多電子原子と周期律

多電子原子の軌道エネルギー

「主量子数  $n$  だけでなく、方位量子数  $l$  にもエネルギーが依存する。」  $\Rightarrow$  遮蔽効果

多電子原子の電子の詰まり方

①	s 軌道	2 電子	②	パウリの排他原理
	p 軌道	6 電子	③	フントの規則
	d 軌道	10 電子	④	$(n + l)$ 則
	f 軌道	14 電子		

元素の周期律：イオン化エネルギー、電子親和力、原子半径、...

## 6. 2原子分子の化学結合

等核 2 原子分子： 結合性分子軌道と反結合性分子軌道の形成      共有結合

例えば 2 つの 1s 軌道からは、 $\psi_+ = \frac{1}{2(1+S)^{1/2}}(1s_A + 1s_B)$        $\psi_- = \frac{1}{2(1-S)^{1/2}}(1s_A - 1s_B)$

2 つの ns 軌道からは、 $\sigma_g ns$ ,  $\sigma_u^* ns$  がそれぞれ分子軌道として形成される。

2 つの np 軌道 (3 重縮重) からは、 $\sigma_g 2p_z$ ,  $\sigma_u^* 2p_z$ ;  $\pi_u 2p_x$ ,  $\pi_g^* 2p_x$ ;  $\pi_u 2p_y$ ,  $\pi_g^* 2p_y$

結合次数 = { (結合性軌道にある電子数) - (反結合性軌道にある電子数) } / 2

$B_2$ ,  $O_2$  分子の常磁性；分子軌道内の不対電子によって、磁石に引き付けられる。

異核 2 原子分子 AB： 電子移動によってクーロン引力によるイオン結合性が加わる  
電子を引き付ける尺度： 電気陰性度      双極子モーメントの発生

## 7. 混成軌道

原子軌道の再配列  $\Rightarrow$  混成軌道を形成       $sp^3$  混成、 $sp^2$  混成、 $sp$  混成  
分子の形状が決まる

共役  $\pi$  電子系の形成  $\Rightarrow$   $\pi$  電子の非局在化

ポリエンの共役  $\pi$  電子系と光吸収

$\rightarrow$  1 次元の箱の中の粒子として、 $\pi$  電子をモデル化

最高被占軌道 (HOMO)、最低空軌道 (LUMO)      HOMO-LUMO 間の光吸収が最も長波長の光吸収

以下、メモ

---