

# 化学基礎って何！

オンライン化学基礎2020  
ガイダンス資料(東京農工大)

阿部穰里  
(所属は都立大)

# 皆さんのイメージは・・・

## 元素周期表

1 1.008 H 水素																	18 4.003 He ヘリウム
3 6.941 Li リチウム	4 9.012 Be ベリリウム											13 10.81 B ホウ素	14 12.01 C 炭素	15 14.01 N 窒素	16 16.00 O 酸素		
11 22.99 Na ナトリウム	12 24.31 Mg マグネシウム											13 26.98 Al アルミニウム	14 28.09 Si ケイ素	15 30.97 P リン	16 32.07 S 硫黄		
19 39.10 K カリウム	20 40.08 Ca カルシウム	21 44.96 Sc スカンジウム	22 47.88 Ti チタン	23 50.94 V バナジウム	24 52.00 Cr クロム	25 54.04 Mn マンガン	26 55.85 Fe 鉄	27 58.93 Co コバルト	28 58.69 Ni ニッケル	29 63.55 Cu 銅	30 65.39 Zn 亜鉛	31 69.72 Ga ガリウム	32 72.61 Ge ゲルマニウム	33 74.92 As ヒ素	34 78.96 Se セレン		
37 85.47 Rb ルビウム	38 87.62 Sr ストロンチウム	39 88.91 Y イットリウム	40 91.22 Zr ジルコニウム	41 92.91 Nb ニオブ	42 95.94 Mo モリブデン	43 99 Tc テクネチウム	44 101.1 Ru ルテチウム	45 102.9 Rh ロジウム	46 106.4 Pd パラジウム	47 107.9 Ag 銀	48 112.4 Cd カドミウム	49 114.8 In インジウム	50 118.7 Sn スズ	51 121.8 Sb アンチモン	52 127.6 Te テルル		
55 132.9 Cs セシウム	56 137.3 Ba バリウム	57-71 ランタノイド	72 178.5 Hf ハフニウム	73 180.9 Ta タンタル	74 183.8 W タングステン	75 186.2 Re レニウム	76 190.2 Os オスマニウム	77 192.2 Ir イリジウム	78 195.1 Pt 白金	79 197.0 Au 金	80 200.6 Hg 水銀	81 204.4 Tl タリウム	82 207.2 Pb 鉛	83 209.0 Bi ヒ素	84 210 Po ポロニウム		
87 (223) Fr フランシウム	88 (226) Ra ラジウム	89-103 アクチノイド	104 (261) Rf ラザフォードジウム	105 (262) Db ドブニウム	106 (263) Sg シーボーギウム	107 (262) Bh ボーリウム	108 (265) Hs ハウンジウム	109 (266) Mt メイトネリウム									
57 138.9 La ランタン	58 140.1 Ce セリウム	59 140.9 Pr プラセオジム	60 144.2 Nd ネオジム	61 (145) Pm プロメチウム	62 150.4 Sm サマリウム	63 152.0 Eu ユロピウム	64 157.3 Gd ガドリウム	65 158.9 Tb テルビウム	66 162.5 Dy ジスプロシウム	67 164.9 Ho ホウメチウム	68 167.3 Er エルビウム	69 168.9 Tm イットリウム	70 173.0 Yb イットリウム				
89 (227) Ac アクチニウム	90 232.0 Th トリウム	91 231.0 Pa プロトアクチニウム	92 238.0 U ウラン	93 (237) Np ネプツニウム	94 (239) Pu プルトニウム	95 (243) Am アメリシウム	96 (247) Cm キュリウム	97 (247) Bk バークリウム	98 (252) Cf カリフォルニウム	99 (252) Es アインシュタインウム	100 (257) Fm フェルミウム	101 (258) Md メンデルレービウム	102 (259) No ノーベリウム				

# こんな感じ？



"Chemicals in flasks" by Joe Sullivan - Flickr. Licensed under CC 表示 2.0 via ウィキメディア・コモンズ - [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Chemicals\\_in\\_flasks.jpg#/media/File:Chemicals\\_in\\_flasks.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Chemicals_in_flasks.jpg#/media/File:Chemicals_in_flasks.jpg)

化学基礎とは、

物理と数学

だ！

# 化学基礎とは

## 物理

- ニュートン力学(古典力学) → 量子力学(new)

## 数学

- 微積分 → (偏微分(new))
- 線形代数・ベクトル・行列
- 複素数
- 三角関数
- 確率統計

化学を語るのに、  
このすべてが  
必要！？

化学は物理と数学と  
コンピュータを使って説明できる。

# この問題が解けるかな？

1. 以下の数列の一般式を求めよ。

$$\frac{9}{5}, \frac{4}{3}, \frac{25}{21}, \frac{9}{8}, \frac{49}{45}, \frac{16}{15}, \dots$$

1は解けるまで  
5分は考えよう！

2. 周期表に隠れている数字の規則を見つけよ。


周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	1 H 水素 Hydrogen 1.00798																		2 He ヘリウム Helium 4.0026
2	3 Li リチウム Lithium 6.988	4 Be ベリリウム Beryllium 9.01218											5 B 硼(ホウ)素 Boron 10.814	6 C 炭素 Carbon 12.0106	7 N 窒素 Nitrogen 14.0069	8 O 酸素 Oxygen 15.9994	9 F 弗(フッ)素 Fluorine 18.9984	10 Ne ネオン Neon 20.1797	
3	11 Na ナトリウム Sodium 22.9898	12 Mg マグネシウム Magnesium 24.306											13 Al アルミニウム Aluminum 26.9815	14 Si 矽(ケイ)素 Silicon 28.085	15 P 燐(リン) Phosphorus 30.9738	16 S 硫黄 Sulfur 32.06	17 Cl 塩素 Chlorine 35.452	18 Ar アルゴン Argon 39.948	
4	19 K カリウム Potassium 39.0983	20 Ca カルシウム Calcium 40.078	21 Sc スカンジウム Scandium 44.9559	22 Ti チタン Titanium 47.867	23 V バナジウム Vanadium 50.9415	24 Cr クロム Chromium 51.9961	25 Mn マンガン Manganese 54.938	26 Fe 鉄 Iron 55.845	27 Co コバルト Cobalt 58.9332	28 Ni ニッケル Nickel 58.6934	29 Cu 銅 Copper 63.546	30 Zn 亜鉛 Zinc 65.38	31 Ga ガリウム Gallium 69.723	32 Ge ゲルマニウム Germanium 72.630	33 As 砒(ア)素 Arsenic 74.9216	34 Se セレン Selenium 78.971	35 Br 臭素 Bromine 79.904	36 Kr クリプトン Krypton 83.798	
5	37 Rb ルビジウム Rubidium 85.4678	38 Sr ストロンチウム Strontium 87.62	39 Y イットリウム Yttrium 88.9058	40 Zr ジルコニウム Zirconium 91.224	41 Nb ニオブ Niobium 92.9064	42 Mo モリブデン Molybdenum 95.95	43 Tc テクネチウム Technetium [98]	44 Ru ルテチウム Ruthenium 101.07	45 Rh ロジウム Rhodium 102.906	46 Pd パラジウム Palladium 106.42	47 Ag 銀 Silver 107.868	48 Cd カドミウム Cadmium 112.414	49 In インジウム Indium 114.818	50 Sn 錫(スズ) Tin 118.710	51 Sb アンチモン Antimony 121.760	52 Te テルル Tellurium 127.60	53 I ヨウ素 Iodine 126.904	54 Xe キセノン Xenon 131.293	
6	55 Cs セシウム Cesium 132.905	56 Ba バリウム Barium 137.327	※1	72 Hf ハフニウム Hafnium 178.49	73 Ta タンタル Tantalum 180.948	74 W タングステン Tungsten 183.84	75 Re レニウム Rhenium 186.207	76 Os オスマウム Osmium 190.23	77 Ir イリジウム Iridium 192.217	78 Pt 白金(プラチナ) Platinum 195.084	79 Au 金 Gold 196.967	80 Hg 水銀 Mercury 200.592	81 Tl タリウム Thallium 204.384	82 Pb 鉛 Lead 207.2	83 Bi ビスマス Bismuth 208.980	84 Po ポロニウム Polonium [210]	85 At アスタチン Astatine [210]	86 Rn ラドン Radon [222]	
7	87 Fr フランシウム Francium [223]	88 Ra ラジウム Radium [226]	※2	104 Rf ラザホージウム Rutherfordium [267]	105 Db ドブニウム Dubnium [268]	106 Sg シーボーギウム Seaborgium [271]	107 Bh ボーリウム Bohrium [272]	108 Hs ハッソウム Hassium [277]	109 Mt マイトネリウム Meitnerium [276]	110 Ds ダームスタチウム Darmstadtium [281]	111 Rg レントゲンニウム Roentgenium [280]	112 Cn コペルニシウム Copernicium [285]	113 Nh ニホニウム Nihonium [286]	114 Fl フルロビウム Flerovium [289]	115 Mc モスコビウム Moscovium [289]	116 Lv リバモリウム Livermorium [293]	117 Ts テネシウム Tennessine [293]	118 Og オガネソン Oganesson [294]	
※1 ランタノイド系	57 La ランタン Lanthanum 138.905	58 Ce セリウム Cerium 140.116	59 Pr プラセオジウム Praseodymium 140.908	60 Nd ネオジム Neodymium 144.242	61 Pm プロメチウム Promethium [145]	62 Sm サマリウム Samarium 150.36	63 Eu ユウロピウム Europium 151.964	64 Gd ガドリニウム Gadolinium 157.25	65 Tb テルビウム Terbium 158.925	66 Dy ジスプロシウム Dysprosium 162.500	67 Ho ホルミウム Holmium 164.930	68 Er エルビウム Erbium 167.259	69 Tm ツリウム Thulium 168.934	70 Yb イットリビウム Ytterbium 173.045	71 Lu ルテチウム Lutetium 174.967				
※2 アクチノイド系	89 Ac アクチニウム Actinium [227]	90 Th トリウム Thorium 232.038	91 Pa プロトアクチニウム Protactinium 231.036	92 U ウラン Uranium 238.029	93 Np ネプツニウム Neptunium [237]	94 Pu プルトニウム Plutonium [239]	95 Am アメリシウム Americium [243]	96 Cm キュリウム Curium [247]	97 Bk ベークリウム Berkelium [247]	98 Cf カリホルニウム Californium [251]	99 Es アインシュタインニウム Einsteinium [252]	100 Fm フェルミウム Fermium [257]	101 Md メンデレヴィウム Mendelevium [258]	102 No ノーベリウム Nobelium [259]	103 Lr ローレンシウム Lawrencium [262]				


# この問題が解けるかな？


1. 以下の数列の一般式を求めよ。

$$\frac{9}{5}, \frac{4}{3}, \frac{25}{21}, \frac{9}{8}, \frac{49}{45}, \frac{16}{15}, \dots$$

分子は $(n+2)^2$ っぽいけど  
偶数項が違う？


$$\frac{9}{5}, \frac{4 * 4}{3 * 4}, \frac{25}{21}, \frac{9 * 4}{8 * 4}, \frac{49}{45}, \frac{16 * 4}{15 * 4}, \dots$$


$$\frac{9}{5}, \frac{16}{12}, \frac{25}{21}, \frac{36}{32}, \frac{49}{45}, \frac{64}{60}, \dots$$


$$\frac{9}{9-4}, \frac{16}{16-4}, \frac{25}{25-4}, \frac{36}{36-4}, \frac{49}{49-4}, \frac{64}{64-4}, \dots$$

$$\frac{(n+2)^2}{(n+2)^2 - 2^2}$$

# 化学は数学だの例 1

## 水素原子の光

# 水素原子の放電から出る 光を分けると

434nm

410nm

486nm

656nm



波長：数列の問題だ！





数学者  
バルマー  
60歳  
女子高の先生

410, 434, 486, 656

365で割ってみよう

1.797, 1.332, 1.189, 1.123

だいたいこんな感じか？

1.800, 1.333, 1.190, 1.125

$9/5, 4/3, 21/25, 9/8$

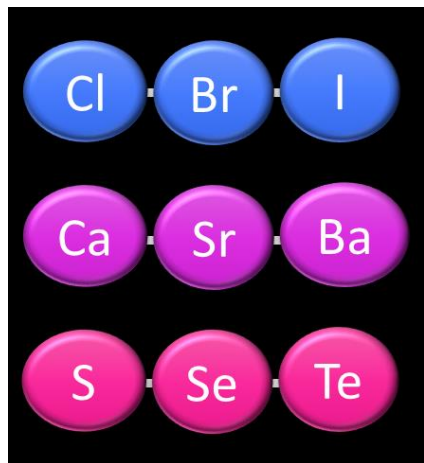
$$364.56 \frac{(n+2)^2}{(n+2)^2 - 2^2}$$

# 化学は数学だの例 2

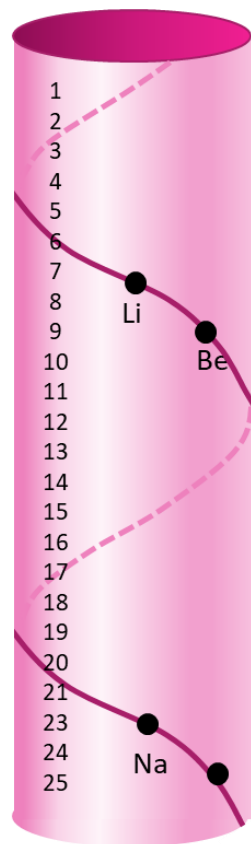
## 周期表

原素の番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	1 H 水素 Hydrogen 1.00798																		2 He ヘリウム Helium 4.0026
2	3 Li リチウム Lithium 6.968	4 Be ベリリウム Beryllium 9.01218											5 B 硼 Boron 10.814	6 C 炭素 Carbon 12.0106	7 N 窒素 Nitrogen 14.0069	8 O 酸素 Oxygen 15.9994	9 F 弗素 Fluorine 18.9984	10 Ne ネオン Neon 20.1797	
3	11 Na ナトリウム Sodium 22.9899	12 Mg マグネシウム Magnesium 24.306											13 Al アルミニウム Aluminum 26.9815	14 Si 珪 Silicon 28.085	15 P 燐 Phosphorus 30.9738	16 S 硫黄 Sulfur 32.066	17 Cl 塩素 Chlorine 35.452	18 Ar アルゴン Argon 39.948	
4	19 K カリウム Potassium 39.0983	20 Ca カルシウム Calcium 40.078	21 Sc スカンジウム Scandium 44.9559	22 Ti チタン Titanium 47.867	23 V バナジウム Vanadium 50.9415	24 Cr クロム Chromium 51.9961	25 Mn マンガン Manganese 54.938	26 Fe 鉄 Iron 55.845	27 Co コバルト Cobalt 58.9332	28 Ni ニッケル Nickel 58.6934	29 Cu 銅 Copper 63.546	30 Zn 亜鉛 Zinc 65.38	31 Ga ガリウム Gallium 69.723	32 Ge ゲルマニウム Germanium 72.630	33 As 砒素 Arsenic 74.9216	34 Se セレン Selenium 78.971	35 Br 臭素 Bromine 79.904	36 Kr クリプトン Krypton 83.798	
5	37 Rb ルビidium Rubidium 85.4678	38 Sr ストロンチウム Strontium 87.62	39 Y イットリウム Yttrium 88.9058	40 Zr ジルコニウム Zirconium 91.224	41 Nb ニオブ Niobium 92.9064	42 Mo モリブデン Molybdenum 95.95	43 Tc テクネチウム Technetium [99]	44 Ru ルルチウム Ruthenium 101.07	45 Rh ロジウム Rhodium 101.062	46 Pd パラジウム Palladium 106.42	47 Ag 銀 Silver 107.868	48 Cd カドミウム Cadmium 112.414	49 In インジウム Indium 114.818	50 Sn 錫 Tin 118.710	51 Sb アンチモン Antimony 121.760	52 Te テルル Tellurium 127.60	53 I ヨウ素 Iodine 126.904	54 Xe キセノン Xenon 131.293	
6	55 Cs セシウム Cesium 132.905	56 Ba バリウム Barium 137.327	※1	72 Hf ハフニウム Hafnium 178.49	73 Ta タンタル Tantalum 180.948	74 W タングステン Tungsten 183.84	75 Re レニウム Rhenium 186.207	76 Os オスmium Osmium 190.23	77 Ir イリジウム Iridium 192.217	78 Pt 白金 Platinum 195.084	79 Au 金 Gold 196.967	80 Hg 水銀 Mercury 200.592	81 Tl タリウム Thallium 204.384	82 Pb 鉛 Lead 207.2	83 Bi ビスマス Bismuth 208.980	84 Po ポロニウム Polonium [210]	85 At アスタチン Astatine [210]	86 Rn ラドン Radon [222]	
7	87 Fr フランシウム Francium [223]	88 Ra ラジウム Radium [226]	※2	104 Rf ラザフォード Rutherfordium [267]	105 Db ドブニウム Dubnium [268]	106 Sg シーボーギウム Seaborgium [271]	107 Bh ボーリウム Bohrium [272]	108 Hs ハンシウム Hassium [277]	109 Mt メイテネリウム Meitnerium [276]	110 Ds ダームスタリウム Darmstadtium [281]	111 Rg レングゲニウム Roentgenium [280]	112 Cn コペルニシウム Copernicium [285]	113 Nh ニホニウム Nihonium [286]	114 Fl フルロビウム Flerovium [289]	115 Mc モスコビウム Moscovium [289]	116 Lv リバモリウム Livermorium [293]	117 Ts テネシン Tennessine [293]	118 Og オガネソン Oganesson [294]	
※1 ランタノイド系	57 La ランタン Lanthanum 138.905	58 Ce セリウム Cerium 140.116	59 Pr プラセオジウム Praseodymium 140.908	60 Nd ネオジウム Neodymium 144.242	61 Pm プロメチウム Promethium [145]	62 Sm サマリウム Samarium 150.36	63 Eu ユウロピウム Europium 151.964	64 Gd ガドリニウム Gadolinium 157.25	65 Tb テルビウム Terbium 158.925	66 Dy ジスプロシウム Dysprosium 162.50	67 Ho ホルミウム Holmium 164.930	68 Er エルビウム Erbium 167.259	69 Tm ツリウム Thulium 168.934	70 Yb イットルビウム Ytterbium 173.054	71 Lu ルテチウム Lutetium 174.967				
※2 アクチノイド系	89 Ac アクチニウム Actinium [227]	90 Th トリウム Thorium 232.038	91 Pa プロトアクチニウム Protactinium 231.036	92 U ウラン Uranium 238.029	93 Np ネプツニウム Neptunium [237]	94 Pu プルトニウム Plutonium [239]	95 Am アメリシウム Americium [243]	96 Cm キュリウム Curium [247]	97 Bk ベルケリウム Berkelium [247]	98 Cf カリホルニウム Californium [252]	99 Es アインスタイニウム Einsteinium [252]	100 Fm フェルミウム Fermium [257]	101 Md メンデルエヴィウム Mendelevium [261]	102 No ノーベリウム Nobelium [269]	103 Lr ローレンシウム Lawrencium [262]				

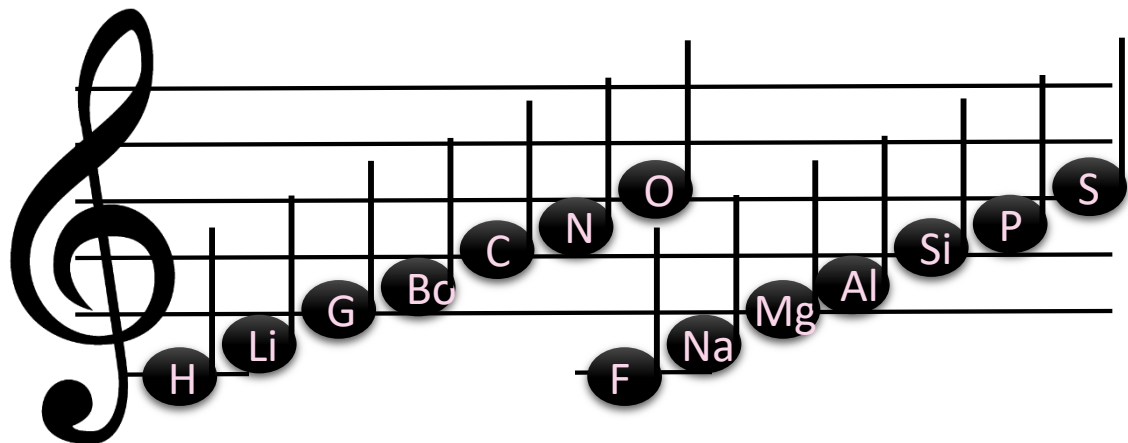
# 初期の周期表 (詳しくは別冊ニュートン参照)



デーベライナー  
(ドイツ人化学者)  
三つ組元素  
1829年



シャンクルトワ  
(フランス人鉱物学者)  
地のらせん 1862年  
数学が難しすぎて受け入れられず



ニューランズ  
(イギリス人化学者)  
オクターブの法則 1864年  
原子番号が大きくなると破綻

# メンデレーエフの第2周期表(1871)

Reihen	Gruppe I. — R'O	Gruppe II. — RO	Gruppe III. — R'O <sup>3</sup>	Gruppe IV. RH <sup>4</sup> RO <sup>2</sup>	Gruppe V. RH <sup>3</sup> R'O <sup>3</sup>	Gruppe VI. RH <sup>2</sup> RO <sup>3</sup>	Gruppe VII. RH R'O <sup>2</sup>	Gruppe VIII. — RO <sup>4</sup>
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	So=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	— — — —

7

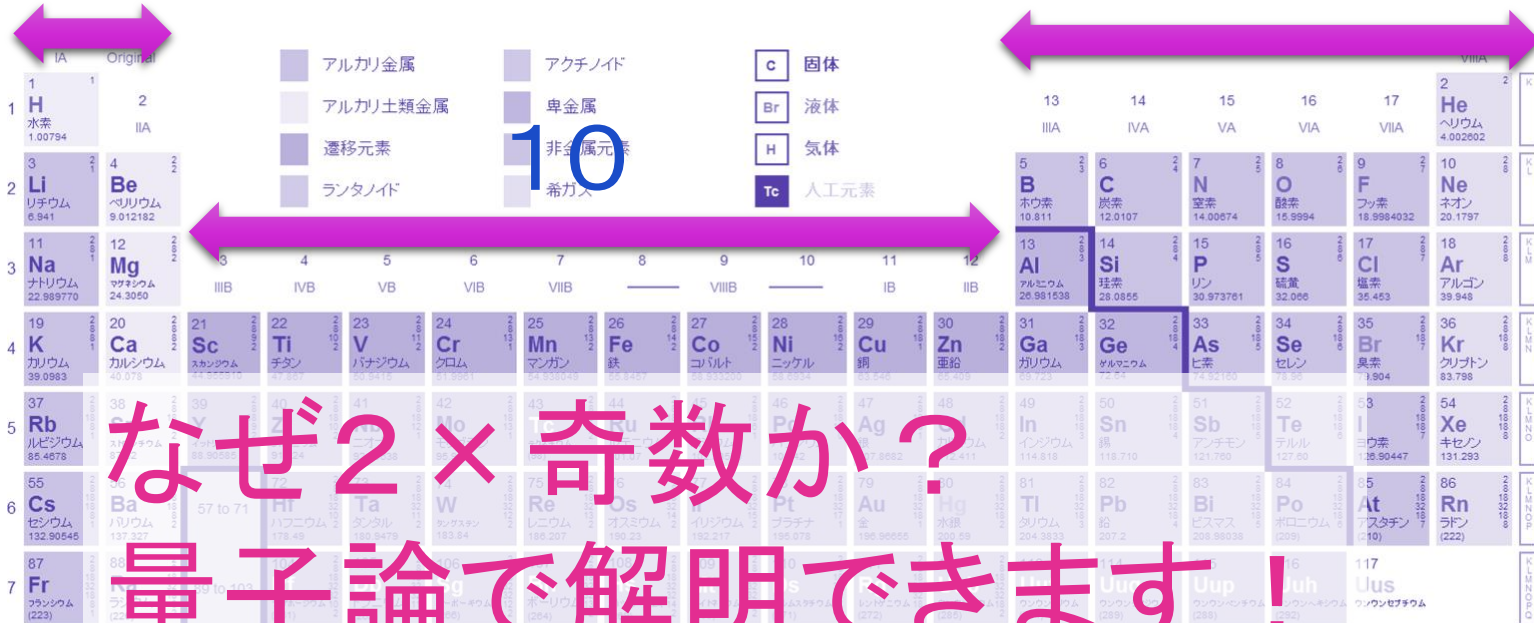
\* 当時希ガスは未発見

大好きなカードゲームをヒントに  
生み出されたという...(Wikipedia)

# 周期表の数字の規則

2

6

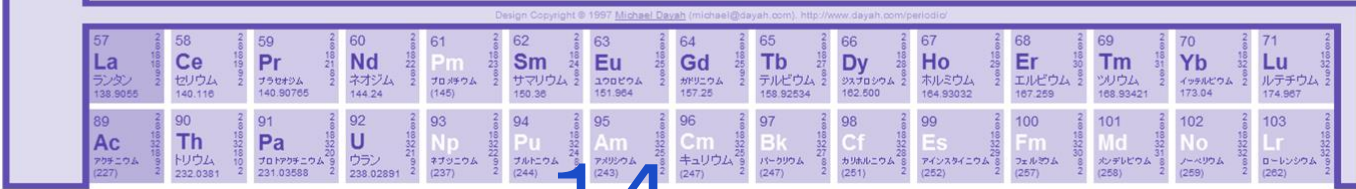


なぜ2×奇数か？  
量子論で説明できます！

Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.

Design Copyright © 1997 Michael Dayah (michael@dayah.com) http://www.dayah.com/periodic/

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.



2・1, 2・3, 2・5, 2・7: 2×奇数

# 化学基礎では

マインドマップ  
2枚分

- 高校の数学や物理を出発として  
化学現象の解明に必要な量子化学を勉強

## 勉強の心得

(自由に応用研究)

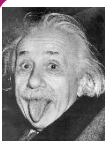
- IPPORが大切

Input, Practice, Practice, Output, Research

YouTube  
などで自習

講義の  
小テスト

自分の言葉で  
総括して表現(レポート)



光の速度は観測する人の速度によらず一定  
**特殊相対性理論**

$$E=(m^2c^4+p^2c^2)^{1/2}$$

\* 光に質量はない  
m=0, E=hv を代入

光の波動性: 干渉  
光の速度=電磁波の速度 → 波  
**光の粒子性**  
光電効果 **光のエネルギー E=hv**  
コンプトン効果 **光の運動量 p=hv/c=h/λ**

**二重スリット実験**


電子の波動性: 干渉に似た現象  
電子の粒子性: 1粒子の弾道が見える

観測問題: “観測していない状態”は観測できない  
光や電磁波が当たって状態が変わる  
観測されるまでが波、観測されると粒子?

**物質波: ドブロイ波**  
物質にも波長が定義できる

$$mv=p=hv/c=h/\lambda$$

電子も波  
なんじゃないかな?

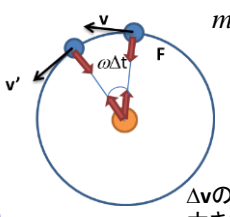



**運動方程式**  
F=ma  
目に見えるぐらい大きな物質での法則

**エネルギー保存則**  
E=T+U  
運動エネルギー+位置エネルギー

**力積(FΔt)**  
**運動量保存則(p=mv)**

**円運動に適用**




速度は接線方向  
加速度(dv/dt)は中心方向

$$mv\omega^2 = F$$

運動エネルギー  $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mr^2\omega^2$   
位置エネルギー  $U = -\frac{k}{r} = -mr^2\omega^2$   
エネルギー (和)  $E = -\frac{1}{2}mr^2\omega^2$

Δvの向きと大きさは?

**水素原子の中の電子**



惑星のように原子核周りを円運動?

410nm 434nm 486nm 656nm

✓ 電荷をもつ粒子の加速運動  
→ 電磁波を放出、エネルギー減る  
速度が下がり原子核にくっつく

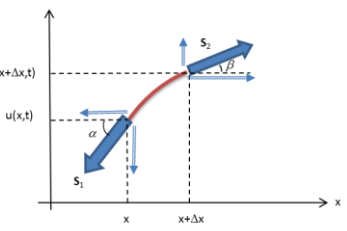
✓ エネルギーがとびとびにはならない

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

実験事実と矛盾  
水素原子から出る光の波長はとびとび

波動の問題に適応

波の運動方程式から



弦が振動している運動の一部

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

微分方程式

$$u(x,t) = \Theta(t)X(x) = A \cos \omega t \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

時間に依存しない波の式

$$-\frac{\omega^2}{v^2} X(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [X(x)]$$

**ボーアモデル**

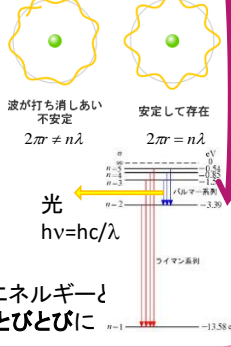
電子は原子核の周りを円運動するが、  
角運動量  $||\mathbf{r} \times \mathbf{p}|| = \frac{h}{2\pi}n, n=1,2,3,\dots$   
の値がとびとびにしかとれないと仮定しよう。

(量子化)

$$E_n = -\left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\right) \frac{1}{n^2} \quad r_n = \left(\frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}\right) n^2$$

結果的に、エネルギーと軌道半径もとびとびに

光  $h\nu=hc/\lambda$



波が打ち消しあい不安定  $2\pi r \neq n\lambda$   
安定して存在  $2\pi r = n\lambda$

水素原子にしか当てはまらない残念理論!

**波動関数とは何か?**  
電子の性質すべてを握る謎の関数  $\Psi$

波動関数の大きさの二乗  
→ 電子のある位置での**確率密度**  $\rho(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)$

確率の和=1  
波動関数の規格化条件  $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$

**何をすべきか?**  
 $\hat{H}\Psi = E\Psi$

すでに分かっている  
 $\hat{H}$  (演算子)の  
 $\Psi$  と  $E$  (定数)を求める。  
 $E \rightarrow$  吸収光、放出光の波長がわかる

**エネルギー保存則**  
E=T+U  
運動エネルギー+位置エネルギー

**波の式**  
 $-\frac{\omega^2}{v^2} X(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [X(x)]$

**物質波: ドブロイ波**  
物質にも波長が定義できる  
 $mv=p=hv/c=h/\lambda$

**シュレディンガー方程式**

Good job guys!



$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$  (1次元)

$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \Psi(x,y,z) + U(x,y,z)\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$  (3次元)

# シュレディンガー方程式



## 波動関数とは何か？

電子の性質すべてを握る謎の関数  $\Psi$

## 何をすべきか？

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

すでに分かっている

$\hat{H}$  (演算子)の

$\Psi$  と  $E$  (定数)を求める。

$E \rightarrow$  吸収光、放出光の波長がわかる

波動関数の大きさの二乗

$\rightarrow$  電子のある位置での**確率密度**  $\rho(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)$

確率の和 = 1

$$\text{波動関数の規格化条件} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x) dx = 1$$

一価、有限、連続

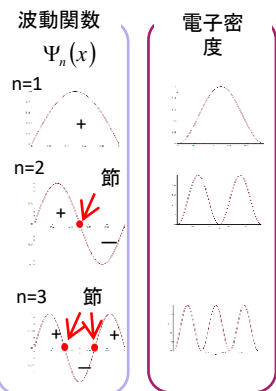
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{(1次元)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) + U(x, y, z)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad \text{(3次元)}$$

### 1次元井戸型ポテンシャル問題

- 簡単に解ける唯一の問題
- 境界条件から**量子化**される
- $\pi$ 共役系直線分子のモデル

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \rho_n(x) = \Psi_n^2(x) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad n=1,2,3,\dots$$



波動関数が負でも電子密度は正

### 2次元井戸型ポテンシャル問題

1次元井戸型の波動関数の積、エネルギーの和

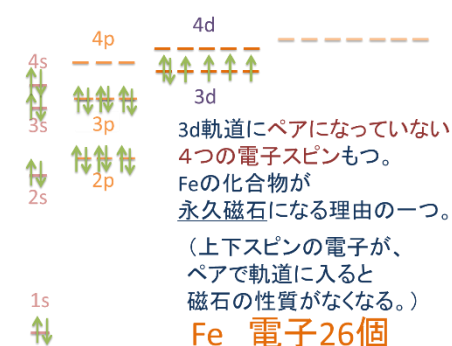
$$\Psi_n(x)\Psi_{n'}(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sqrt{\frac{2}{L'}} \sin\left(\frac{n'\pi y}{L'}\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n'\pi}{L'}\right)^2 \quad \text{3次元も同様}$$

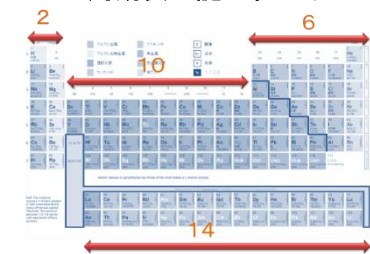
### 電子スピン(永久磁石のもと)

- 不均一磁場中で原子が2つに分かれて飛んでいく  $\rightarrow$  電子は2種類の磁石の性質(上向き、下向き)
- パウリの排他原理**  
一つの軌道に異なるスピンで2つまで電子が入る
- フントの規則**  
同じエネルギーの軌道が複数ある場合は、スピンをそろえて、別の軌道に入りたがる

### 原子における電子の詰まり方がわかる



### 周期表の謎がわかる



$$2 \cdot 1, 2 \cdot 3, 2 \cdot 5, 2 \cdot 7 : 2 \times \text{奇数}$$

$$(\text{スピンの数}) \times (s, p, d, f \text{軌道の数})$$

### 水素原子のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

そのままでは解けない  $\rightarrow$  変数分離をするため極座標で解く

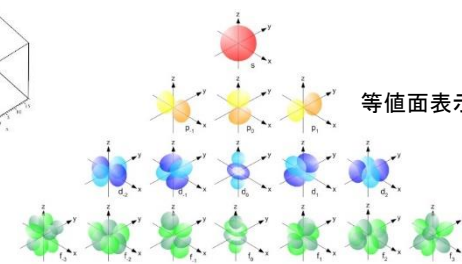
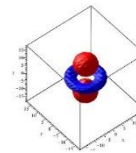
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \left( \frac{1}{r^2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left( \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \left( \frac{1}{r^2 \sin \theta} \right) \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

例えば3d<sub>0</sub>関数なら

$$R_{3d} = A_{3d} r^2 \exp(-r/3a_0)$$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$



等値面表示

s, p, d, f軌道(軌道といっても円運動ではない)

なぜかドーナツをお腹に巻いている...

- $n, l, m$ の3種の量子数
- $m$ が $2l+1$ 個存在しエネルギーは縮退 (s, p, d, fの数を与える)
- 動径関数、角度の関数(球面調和関数)

### 分子のシュレディンガー方程式

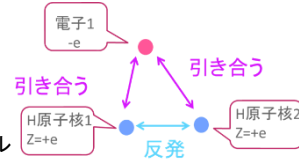
- ハミルトニアンは簡単に作れるが絶対に解けない(3角関係に解なし)
- 近似(妥協)するしかない

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$$

### H<sub>2</sub><sup>+</sup>分子の例

運動エネルギー演算子

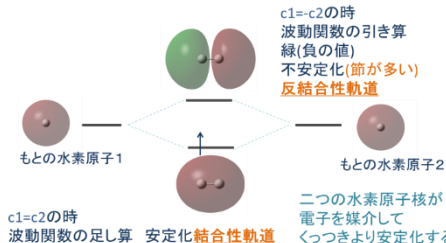
ポテンシャルエネルギー演算子



### 近似法

- 原子核を固定 (ボルンオッペンハイマー近似)
- 変分原理** (エネルギー最小が真の解)
- 原子軌道の線形結合**で分子軌道を記述  $\Psi(r) \approx c_1 \Psi_{1s, N1} + c_2 \Psi_{1s, N2}$

結局解くのは行列問題





化学基礎の講義では、  
皆さんが学びやすいスケジュールを作ります。

講義を受けない方も、  
自習動画を充実させていますので、  
ぜひ自分でIPPORで勉強してみてください！

## 勉強の心得

• IPPORが大切

Input, Practice, Practice, Output, Research

YouTube  
などで自習

講義の  
小テスト

自分の言葉で  
総括して表現(レポート)

(自由に応用研究)