構造化学

10/9(金)

量子論の必要性

原子軌道　核＋電子

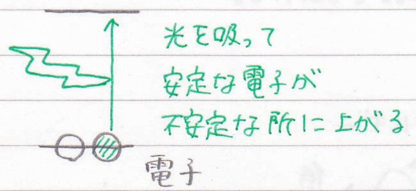
結合 → { 不安定な軌道 / 安定な軌道 } ↑エネルギー

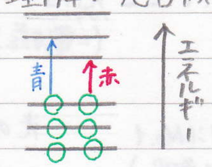
・分子の色が分かる

・色を理解し、デザインできる。→ 応用：染料、塗料、太陽電池、有機EL、プリンター

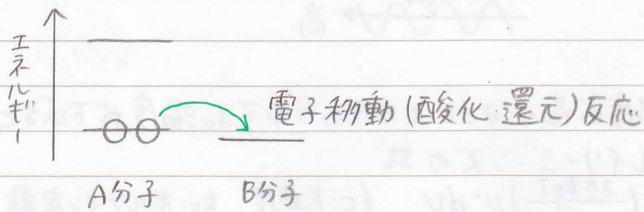
環境問題：オゾンホール、温暖化

理解：光合成





反応



・電子移動しやすさが解る

・反応の理解、デザインができる。→ 応用：触媒、電池

理解：電子伝達系（例：ミトコンドリアでのATP合成）

量子化学 → 電子の状態、エネルギーを理解する学問

どのように利用できるのか

↑ 原子・分子の電子状態

シュレディンガー方程式　　分子の運動

量子力学の成り立ち

No. Date

10/9 (金)

古典物理学の破綻

- 黒体輻射
- 光電効果
- 水素原子 → Bohr理論 → 行列力学

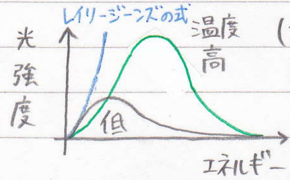
波動性 → 量子力学

- 電子の波動性 → de Broglie波 → 波動力学

・黒体輻射

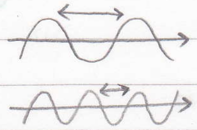
炉 → 温度測定重要

加熱していくと発光 → 分光器で調べる。
(=電磁波)

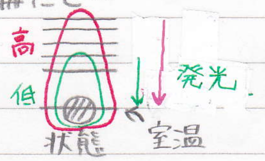


(プリントNo.1 図1参照)

光のエネルギー



10/16 (金) 古典論だと…



温度が高くなると上方にも分布する。温度が下がるとき発光する。

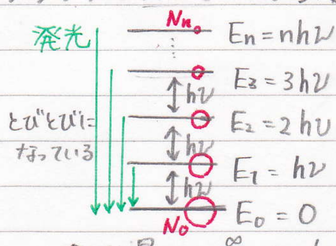
レイリージーンズの式

$$\left(\frac{8\pi k_B T}{c^3}\right)\nu^2 d\nu$$

(c: 光速度　k_B: ボルツマン定数
T: 温度　ν: 振動数)
↔ エネルギー

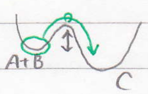
しかしレイリージーンズの式では ν^2 が含まれており上のようなグラフ形状になる。
→ 合わない。うまく説明できない。

プランクの法則: 振動数νの振動子が吸収・発散するエネルギー ⇒ hνの整数倍
(h: プランク定数)



分布 $\frac{N_n}{N_0} = \exp\left(-\frac{E_n - E_0}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{nh\nu}{k_B T}\right)$

… ボルツマン分布



全体量　$\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{nh\nu}{k_B T}\right)$

mの状態の確率　$\exp\left(-\frac{mh\nu}{k_B T}\right) \Big/ \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{mh\nu}{k_B T}\right)$

エネルギー　$mh\nu \times \left\{\exp\left(-\frac{mh\nu}{k_B T}\right) \Big/ \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{nh\nu}{k_B T}\right)\right\}$

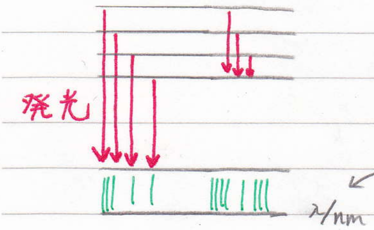
(プリントNo.1)参照して、最終的なエネルギーの形は

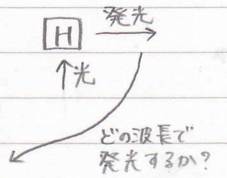
$$\frac{8\pi h}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \nu^3 d\nu$$

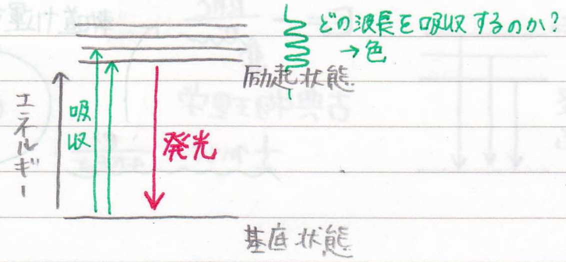
量子仮説

10/16 (金)

水素原子のスペクトルとボーア原子







$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

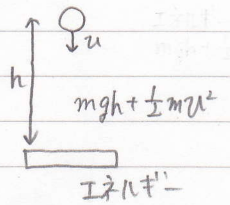
$\Delta E = \left(-\frac{Rhc}{n^2}\right) - \left(-\frac{Rhc}{m^2}\right) \rightarrow E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$ (R:リュードベリ定数)

仮説

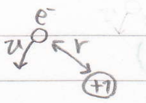
① とびとびのエネルギー

② エネルギー差を反映する振動数の発光・吸収

③ 電子運動は古典力学に沿う。

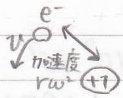


同様に考えて



$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{mv^2}{2}$

エネルギー



$mr\omega^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$

力

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$E = \frac{E^2}{E} = \left(-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)^2 \Big/ \left(-\frac{mv^2}{2}\right) = \frac{-me^4}{2(4\pi\varepsilon_0 m r v)^2} = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2 \ell^2}$$

軌道角運動量

10/23(金)

古典物理学の破綻

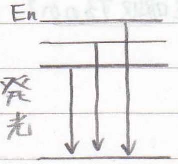
黒体輻射 —— レイリー-ジーンズの式 ↔ プランクの法則 (とびとびのエネルギー)

水素原子の構造 — 発光スペクトル ↔ とびとびのスペクトル

光電効果

10/23 (金)

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

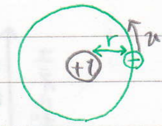


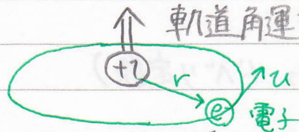
$E_n=-\frac{Rhc}{n^2}$

↕

古典物理学

$\frac{1}{2}mv^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$





軌道角運動量 $\ell = r \times p$ ($p = mv$)

位置ベクトル　運動量

$|\ell|=|r\times p|=|r||p|\sin\theta = rp = mrv$ ($\theta=90°$より)

自転している→スピン角運動量あり

→ 軌道・スピン角運動量は共に上向きの磁気モーメントを作り、磁石のもととなっている。

以上より、$E=\frac{E^2}{E}=\left(-\frac{1}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)^2\Big/\left(-\frac{1}{2}mv^2\right)=\frac{-me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2 l^2}=-\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2n^2}=-\frac{Rhc}{n^2}$

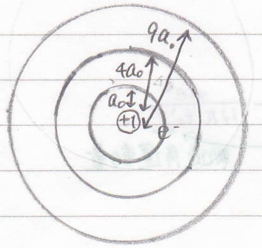
$E=\frac{1}{2}mv^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ ← 古典物理学　　軌道角運動量　　$l=\frac{nh}{2\pi}$　経験則

一致

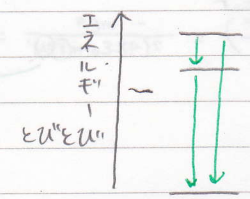
$R=1.09678\times10^7\ m^{-1}$ (観測)

$R=\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2c}=1.0974\times10^7\ m$

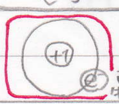
ボーア理論

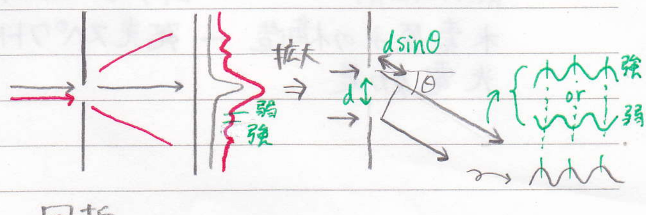


a_0: Bohr 半径



Bohr

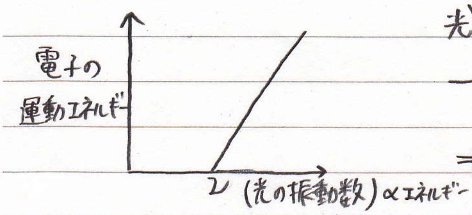
	電子	光=電磁波
粒子性	 古典物理学	光電効果 $E=h\nu$の粒子 ↕ 古典物理
波動性	de Brolie波	干渉・回折

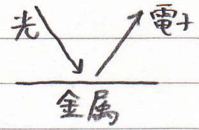


回折

10/23(金)

光電効果





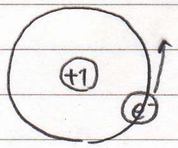
⇒光の粒子性 (光は$E=h\nu$の粒子… Einstein)

電子→回折→波動性

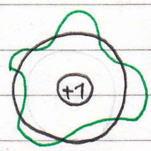
$\lambda = \frac{h}{p}$ … de Brolie の物質波

波長　運動量

Bohr理論



粒子 $l = rp = \frac{nh}{2\pi}$



$2\pi r = n\lambda$ 物質波

$2\pi r = n\frac{h}{p}$

$rp = \frac{nh}{2\pi}$

10/30(金)

光電効果

光の粒子性

① 電子の放出 ─ 大きな振動数必要
　　　　　　 └ 振幅大(強光)でも放出しない。

② 光の振動数大 ─ 電子運動エネルギー大
　　　　　　　 └ 電子のとび出す数は同じ

de Brolie 波

Bohr

電子 → 電子線回折

人間… 1.7m 60kg の場合の波長 ~ 8.0×10^{-36} m →無視

微粒子(電子・原子)では波の性質を考慮しなければならない。

Heisenberg の不確定性原理と矛盾

不確定性原理…電子のように質量の小さいもの(9.1083×10^{-28}g)では、位置と運動量とを測定すると、その測定が粒子の運動状態に影響を及ぼし、測定値に原理的な不確かさを伴う。

$\Delta x\,\Delta p \gtrsim h$ (位置のゆらぎ × 運動量のゆらぎ)