

本当に時間がない人のための構造化学

(これだけ読んでも単位は来ません (^ ^ ;) たぶん・・・)

電子の質量 m_e : 9.109×10^{-31} kg

電気素量 e : 1.609×10^{-19} C

プランク定数 h : 6.626×10^{-34} Js

ディラック定数 $h/2\pi$: 1.055×10^{-34} Js いわゆる「 \hbar バー」

中性子の質量 m_n : 1.674×10^{-27} kg

ボルツマン定数 k : 1.381×10^{-23} JK⁻¹

ボーア半径 a_0 : 5.292×10^{-11} m

光の速さ c : 2.998×10^8 ms⁻¹

陽子の質量 : 1.673×10^{-27} kg

リュードベリ定数 R_H : 1.09677×10^7 m⁻¹

1 eV = 1.602×10^{-19} J

以下、公式などなど・・・

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_n = -R_H ch \frac{1}{n^2}$$

$$r_n = a_0 n^2$$

$$v = \frac{c}{\lambda} = c\nu$$

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

ライマン系列 (紫外領域) $m=1, n=2,3,4 \dots$

バルマー系列 (可視領域) $m=2, n=3,4,5, \dots$

パッシェン系列 (赤外領域) $m=3, n=4,5,6 \dots$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

不確定性原理 $\delta x * \delta p \geq h$ or $\delta x * \delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

右と左の値は異なる。授業では左をやったが、多くの文献では右の式を使っていた。

$$p^2 = -\hbar^2 \Delta \quad \Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \quad \text{運動量と微分演算子の関係}$$

(つまり不確定性原理とは関係はない式である。)

$$\text{シュレディンガー方程式} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r})$$

$$\text{一次元の箱の中の波動関数} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (a \text{ は箱の長さ})$$

$$\text{角運動量 } L = mrv \rightarrow p = \frac{L}{r} \quad p \text{ は運動量}$$

極座標のラプラシアン

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

リチウムのハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{m} \Delta_1 - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{\hbar^2}{m} \Delta_2 - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{\hbar^2}{m} \Delta_3 - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{23}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{31}}$$

エネルギーの求め方

$$E = \int \psi^* \hat{H} \psi dv = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

H₂の分子軌道ハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{m} \Delta_1 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1a}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1b}} - \frac{\hbar^2}{m} \Delta_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2a}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2b}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ab}}$$

電気陰性度

ポーリング $x_H = 2.1$ $x_F = 4.0$ で最大とする。

$$96.5 \text{ kJ/mol} \times (x_A - x_B)^2 = D_{AB} - \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2} \quad \text{or} \quad D_{AB} - \sqrt{D_{AA} \times D_{BB}}$$

D_{AB} AB の結合エネルギー

D_{AA} A₂ の結合エネルギー

D_{BB} B₂ の結合エネルギー

マリケン

$$X_M = \frac{1}{2}(I + A) \quad I: \text{イオン化エネルギー} \quad A: \text{電子親和力}$$

以上、ノートより抜粋でした。詳しくはシケプリを見てください。