

<原子の構成>

質量欠損 = 結合エネルギーに相当する質量 ($E = \Delta Mc^2$)

$$\Delta M = Z(m_p + m_e) + N \cdot m_n - M$$

(^{56}Fe で最大値をとる \rightarrow Feが最も安定な同位体)

あ、意外と多い...
暇人な自分...

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} n^2$$

($r_1 = a_0 = \text{Bohr半径}$)

<原子と電子>

1. Bohr理論とは?

電子に量子条件及び振動数条件を課すことで、
水素原子の電子の回転半径が離散的に打つこと、また
" エネルギーが " " を説明した。

*問題点 { 仮定に根拠が薄い。
多電子原子に適用できない。

2. 物質波

$$\begin{cases} E = h\nu \rightarrow \text{波動性} \\ p = \frac{h}{\lambda} (= m v) \rightarrow \text{粒子性} \end{cases}$$

(例) $V[V]$ の電位差に、電子を1つ置いたとき $\lambda = \text{波長}$ は?
 $qV = \frac{1}{2} m_e v^2 \iff v = \sqrt{\frac{2qV}{m_e}}$
 $\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2q m_e V}}$

3. 波動方程式

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

	名前	ψ に与えるもの	とりうる値
n	主量子数	空間的広がり	1, 2, 3, 4, ...
l	方位量子数	対称性	0, 1, 2, ..., $n-1$
m	磁気量子数		$-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

} n^2 (通り)

\rightarrow ① エネルギー

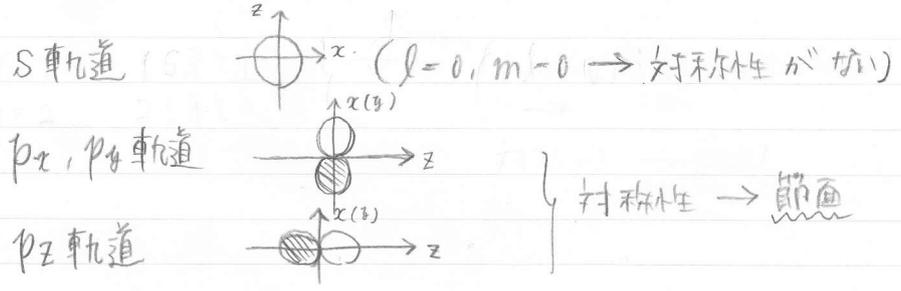
(水素様原子) $E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$ n にのみ依存 (n^2 に縮重している)
 (E_1 :基底状態, E_∞ :イオン化) (*多電子原子では l にも依存)

② 存在確率

$$D_{n,l}(r) = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 d\theta d\phi$$

($|\psi|^2$ は存在確率を与える)
 $= 4\pi r^2 |R_{n,l}(r)|^2$ * 電子分布が最も原子核の近くに偏っているのは (s軌道)

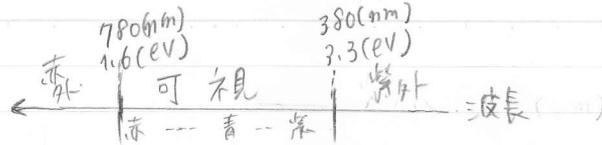
• 原子軌道



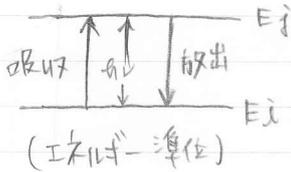
<光と物質の色>

電磁波

$$c = \lambda \nu$$



1. 吸収発光



物質がエネルギー $|E_j - E_i| = h\nu$ を

{ 放出するとき、その振動数に相当する波長の光に発光の補色に見える。
 { 吸収するとき、

* 太陽光が吸収されないとき

→ 透過, もしくは反射(散乱)する。

2. 黒体放射

一定温度に保たれた物質から電磁波が放出される現象。

(太陽 (6000K) : 紫外線, 可視光, 赤外線)
 (人間 (300K) : 赤外線)

3. 光電効果

金属にエネルギーを与えたとき、電子が放出される現象。



(イオン化エネルギー $\{E(M^+) - E(M)\}$ は $[h\nu - E_{kin}]$ と等しい。)

<元素の周期律>

軌道のエネルギー

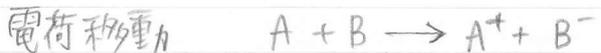
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d \dots$$

{ Pauliの排他原理
 { Hundの法則

= 1つの原子軌道に電子は2つまでしか入らない。
 = (エネルギーが同じ軌道が複数あるとき) 電子はなるべく別々の軌道にスピンの向きがそろったように入る。

<化学結合>

1. イオン結合

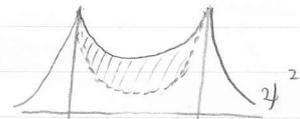


この時必要なエネルギー E は $E = (A \text{ のイオン化エネルギー}) - (B \text{ の電子親和力})$

$E < \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$ となったとき、電荷移動がおきる。

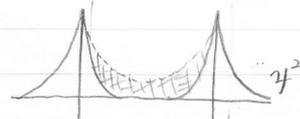
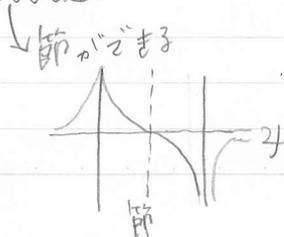
2. 共有結合

• 結合性軌道 (同位相の原子軌道の重なりによる)



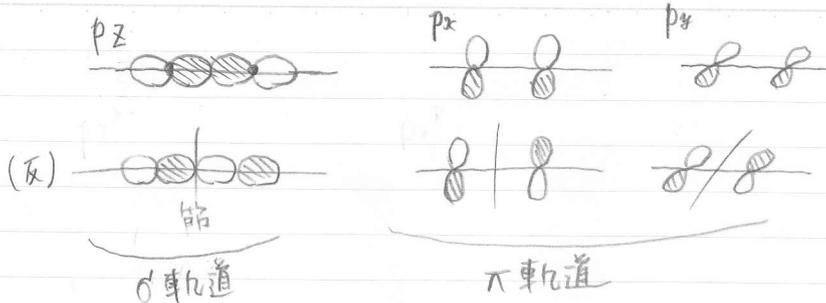
電子密度が増加

• 反 " (逆位相 ")



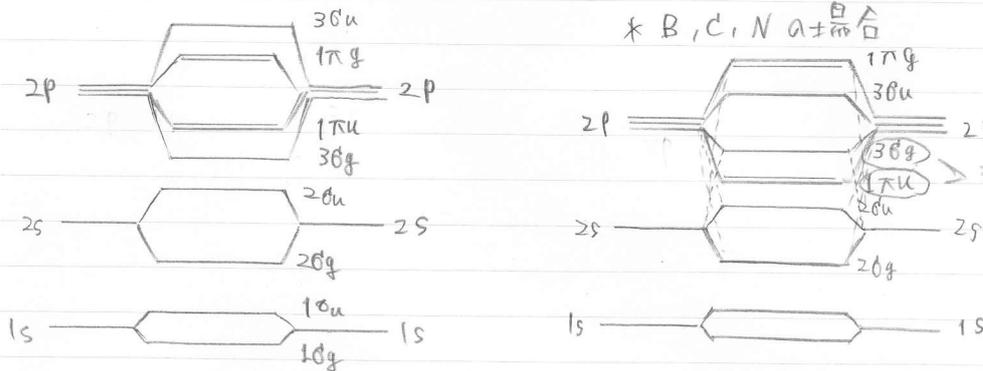
減少

分子軌道



σ軌道 = 結合軌周りの任意の回転に対して関数形が変わらない。
 π軌道 = 分子軸周りに180°回転させると符号が変わる。

エネルギーダイアグラム



* (結合次数)

$$= \frac{1}{2} \left\{ (\text{結合性軌道に入っている電子の数}) - (\text{反結合性軌道に入っている電子の数}) \right\}$$

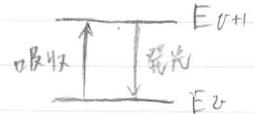
< 光と分子 >

1. 運動の自由度

	並進	回転	振動	計
単原子	3	0	0	3
2原子	3	2	1	6
多原子(直線)	3	2	3N-5	3N
多原子(非直線)	3	3	3N-6	3N

2. 振動運動

エネルギー $E_v = h\nu(v + \frac{1}{2})$ ($v = 0, 1, 2, \dots$)
 量子数
 赤外光に近いエネルギー



(双極子モーメントが変化するとき(対称変角) : 赤外活性)
 " " (対称伸縮) : 赤外不活性

3. 回転運動

エネルギー $E_J = J(J+1) \frac{h^2}{8\pi^2 I R^2}$ ($J = 0, 1, 2, \dots$)
 マイクロ波付近のエネルギー

* 計算問題で気をつけること!

$$\begin{cases} [J] = [N \cdot m] = [kg \cdot m^2 / s^2] \\ 1 [eV] = 1.602 \times 10^{-19} [J] \end{cases}$$