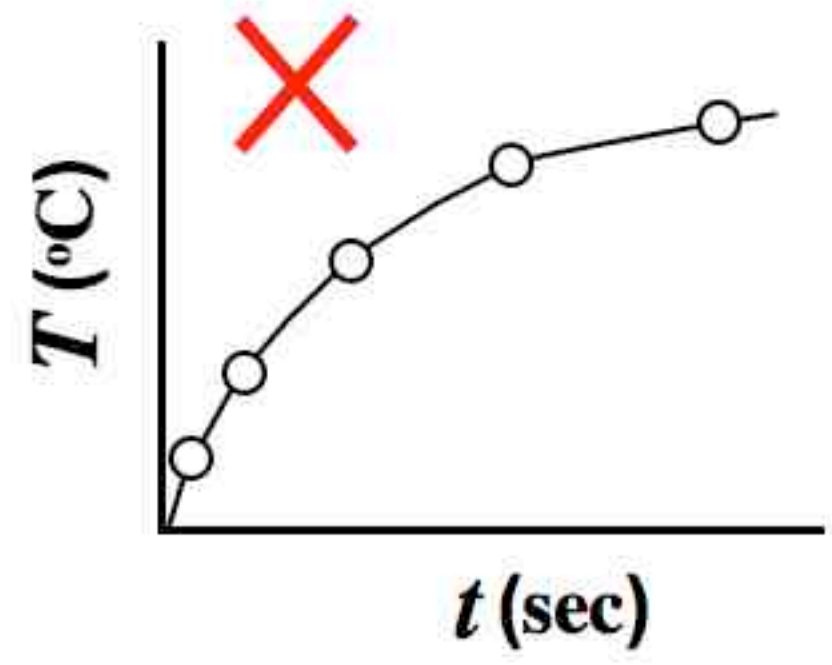
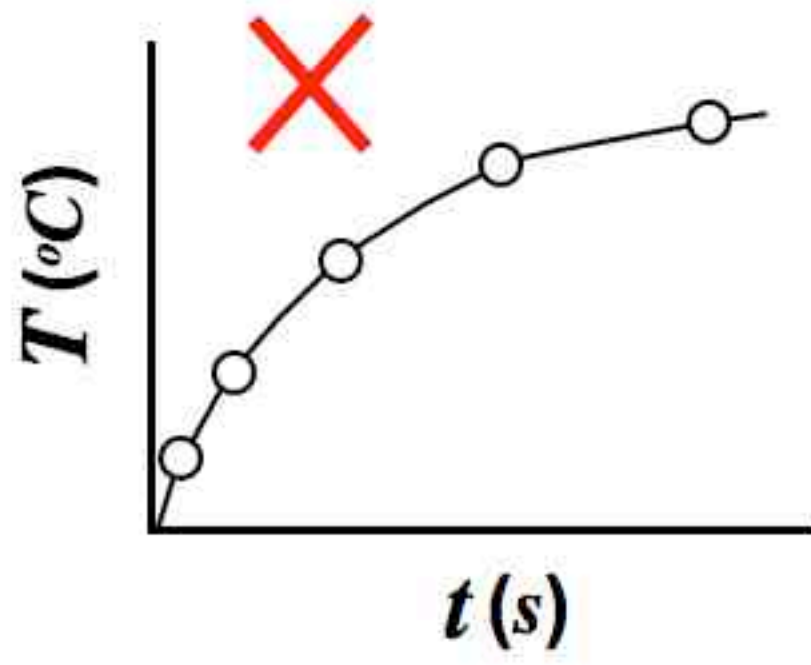
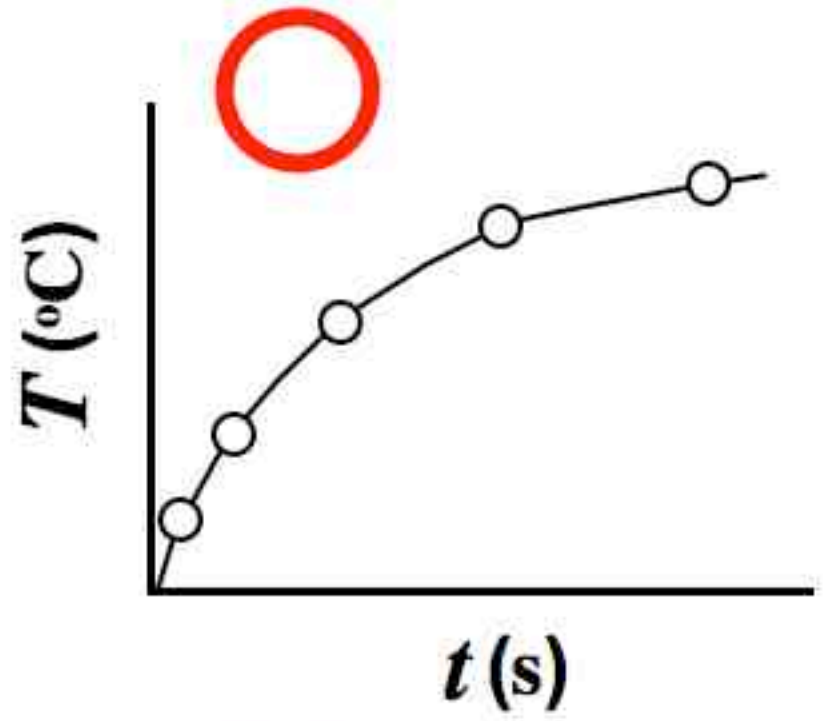
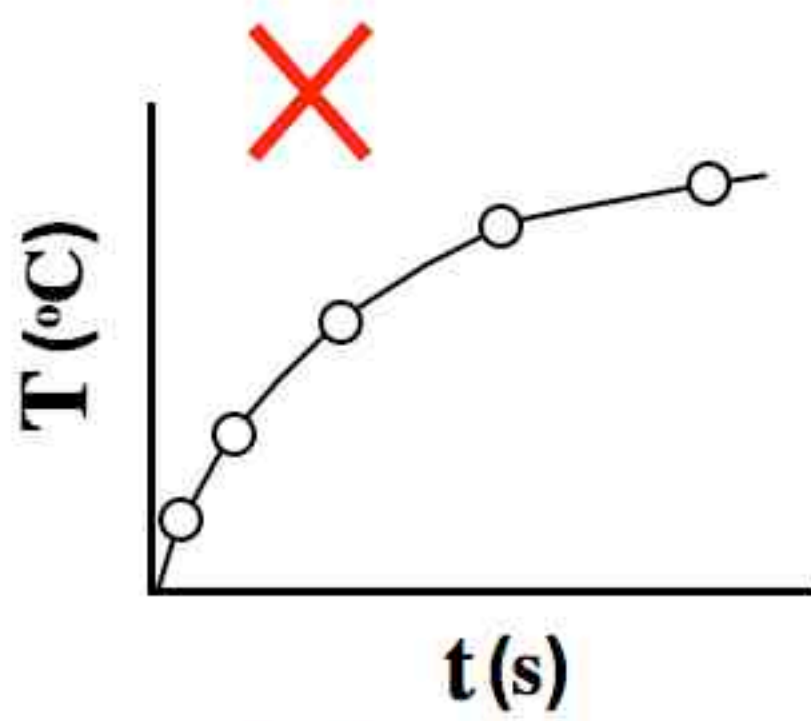


化学

(化学結合論)

平成19年 4月19日

津田 栄



S I 単位系、物理量表記法について (教科書表紙ウラ)

1. S I 基本単位と物理量 (物理量 = 数値 × 単位、必ず斜字体で！)

長さ、質量、時間、電流、熱力学温度、物質質量、光度

2. S I 接頭語

デカ、ヘクト、キロ、メガ、ギガ、デシ、センチ、ミリ、マイクロ、ナノ、ピコ、フェムト

3. 特別の名称と記号を持つ S I 組立単位

ヘルツ、ニュートン、パスカル、ジュール、ワット、クーロン、ボルト、ファラド、オーム、ジーメンス、ウエーバ、テスラ、ヘンリー、セルシウス度、ラジアン、ステラジアン

4. S I 以外の単位 (S I と併用される単位)

分、時、日、度、リットル、トン、オンGSTローム、バール、電子ボルト、統一原子質量

5. そのほかの単位

ダイン、標準大気圧、トル、エルグ、カロリー、ガウス、デバイ、ポアズ、ストークス

化学結合論に関する説明、式など

- | | |
|---------------|----------------------------|
| 付録 2 (212頁) | 原子の核運動量 |
| 付録 3 (214頁) | 波動と波動方程式 |
| 付録 4 (216頁) | ド・ブロイ派としての電子の波束、
不確定性原理 |
| 付録 5 (218頁) | 偏微分とラプラス演算子 |
| 付録 1 1 (234頁) | 有用な展開公式 |
| 付録 1 2 (234頁) | ギリシャ文字 |

ベクトルとスカラー (1)

大きさと方向の両方によって定められる量： ベクトル

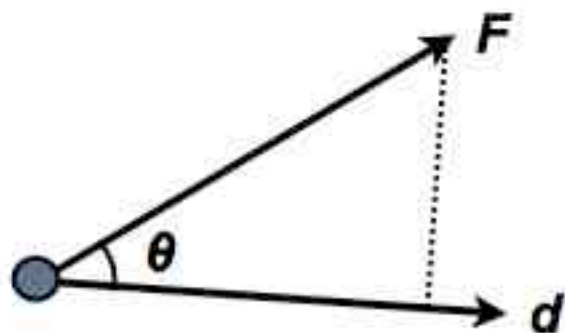
例) 速度、加速度、力、電場、磁場 A, B, \dots

大きさだけによって定められる量 : スカラー

例) 質量、エネルギー、電荷量、温度、電気抵抗 a, b, \dots

ベクトルのスカラー積 (内積)

$$A \cdot B = |A| |B| \cos \theta$$

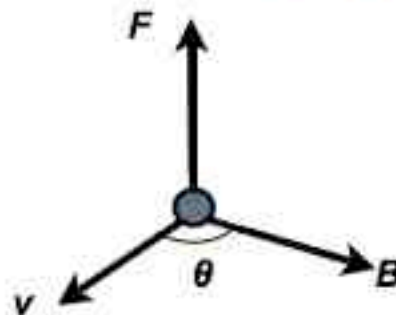


例) 質点に一定の力 F が働いているとき
この質点を d だけ動かすのに力 F が
する仕事量 W : $W = |F| |d| \cos \theta$

ベクトルのベクトル積 (外積)

$$A \times B = |A| |B| \sin \theta c$$

(注. c は C 方向の単位ベクトル)



例) 磁場 B 中を速度 v で動く荷電粒子
(電荷 q) に働く力 (ローレンツ力) F :
 $F = |q| v B \sin \theta$

ベクトルとスカラー (2)

スカラーを細文字のイタリック体で a, k, L と書くのに対し、ベクトルを表すときは太文字のイタリック体で $\mathbf{v}, \mathbf{c}, \mathbf{A}$ などと書く。また、ベクトルを幾何学的に表すには矢印（有向線分）を用いる。ベクトル \mathbf{A} の大きさは $|\mathbf{A}|$ あるいは細文字 A で表す。ベクトルの大きさのことをベクトル \mathbf{A} の絶対値という。

2つのベクトル \mathbf{A} と \mathbf{B} のスカラー積（scalar product、内積）は

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \theta = A B \cos \theta$$

と定義される。ここで θ は二つのベクトルのなす角。スカラー積を成分で表すと

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$$

である。名前の通りスカラー積の結果はスカラー量。大事なのは \mathbf{A} と \mathbf{B} が直交するときで、スカラー積がゼロになる。

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\because \cos \frac{\pi}{2} = 0)$$

逆にスカラー積がゼロになる二つのベクトルは直交している。

ベクトルとスカラー (3)

2つのベクトル**A**と**B**のベクトル積 (vector product、外積) は新たなベクトル**C**

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \sin \theta \hat{\mathbf{c}}$$

をつくる。ここで $\hat{\mathbf{c}}$ は **C** 方向の単位ベクトルで、その方向は **A** から **B** へ右ネジをひねったときにネジの進む向きで決まる。ベクトル積を成分で表すと

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = (A_y B_z - A_z B_y, A_z B_x - A_x B_z, A_x B_y - A_y B_x)$$

となる。

行列式をつかって表すと、

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} i + \begin{vmatrix} A_z & A_x \\ B_z & B_x \end{vmatrix} j + \begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix} k = \begin{vmatrix} i & j & k \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}$$

となる。

ベクトルとスカラー (4)

ベクトルのスカラー積 (内積) について、次のことが成り立つ。

- 1) A と B が直交 ($\theta = \pi/2$) しているとき、 $A \cdot B = 0$ 。
逆に、 $A \cdot B = 0$ ならば A と B は直交している。
- 2) 交換則 $A \cdot B = B \cdot A$
- 3) 分配則 $A \cdot (B + C) = A \cdot B + A \cdot C$
- 4) a をスカラーとして、 $a(A \cdot B) = (aA) \cdot B = A \cdot (aB)$
- 5) $i \cdot i = j \cdot j = k \cdot k$ (i, j, k は長さが 1 の単位ベクトル)
- 6) $A = A_x i + A_y j + A_z k$, $B = B_x i + B_y j + B_z k$ ならば、
 $A \cdot B = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$

ベクトルとスカラー (5)

ベクトルのベクトル積 (外積) について、次のことが成り立つ。

1) A と B が平行 ($A = B$ 、 $\theta = 0$) のときに、 $A \times B = 0$ 。

逆に、 $A \times B = 0$ ならば A と B は平行である。

2) $A \times B = -B \times A$ (ベクトル積では順序を勝手に変えられないことに注意)

3) $A \times (B + C) = A \times B + A \times C$

4) a をスカラーとして、 $(aA) \times B = a(A \times B) = A \times (aB)$

5) $i \times i = j \times j = k \times k = 0$ 、また $i \times j = k$ 、 $j \times k = i$ 、 $k \times i = j$

6) $A = A_x i + A_y j + A_z k$ 、 $B = B_x i + B_y j + B_z k$ ならば、
 $A \times B = (A_y B_z - A_z B_y) i + (A_z B_x - A_x B_z) j + (A_x B_y - A_y B_x) k$

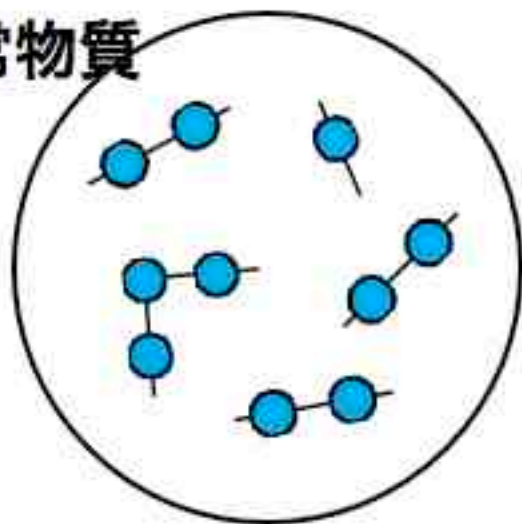
行列式を用いると、

$$A \times B = \begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} i + \begin{vmatrix} A_z & A_x \\ B_z & B_x \end{vmatrix} j + \begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix} k = \begin{vmatrix} i & j & k \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}$$

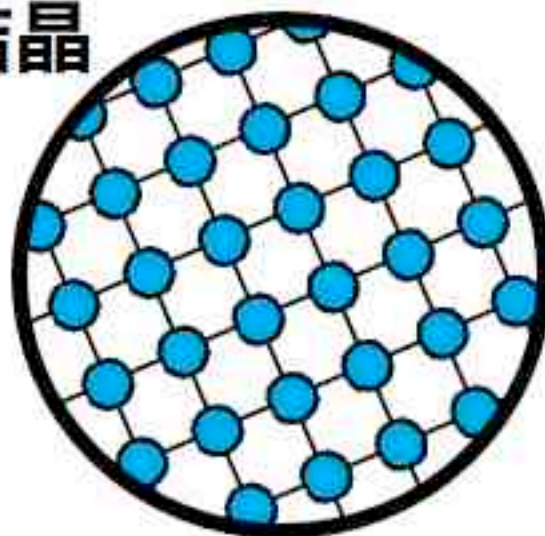
液体

固体

通常物質

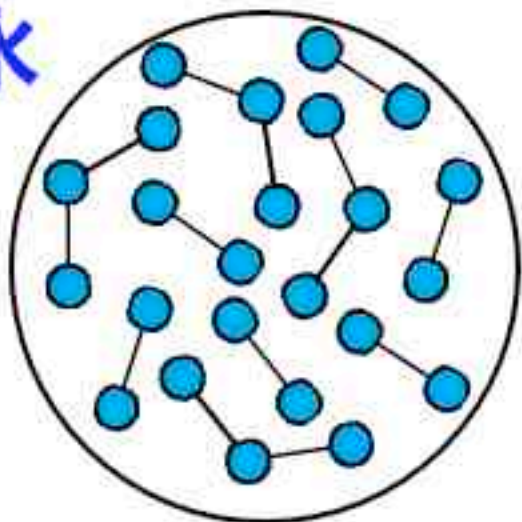


結晶

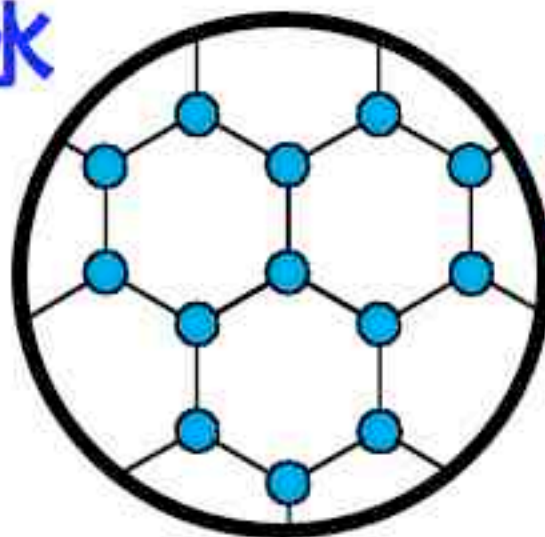


密度上がる
沈む

水



氷



密度下がる

浮く

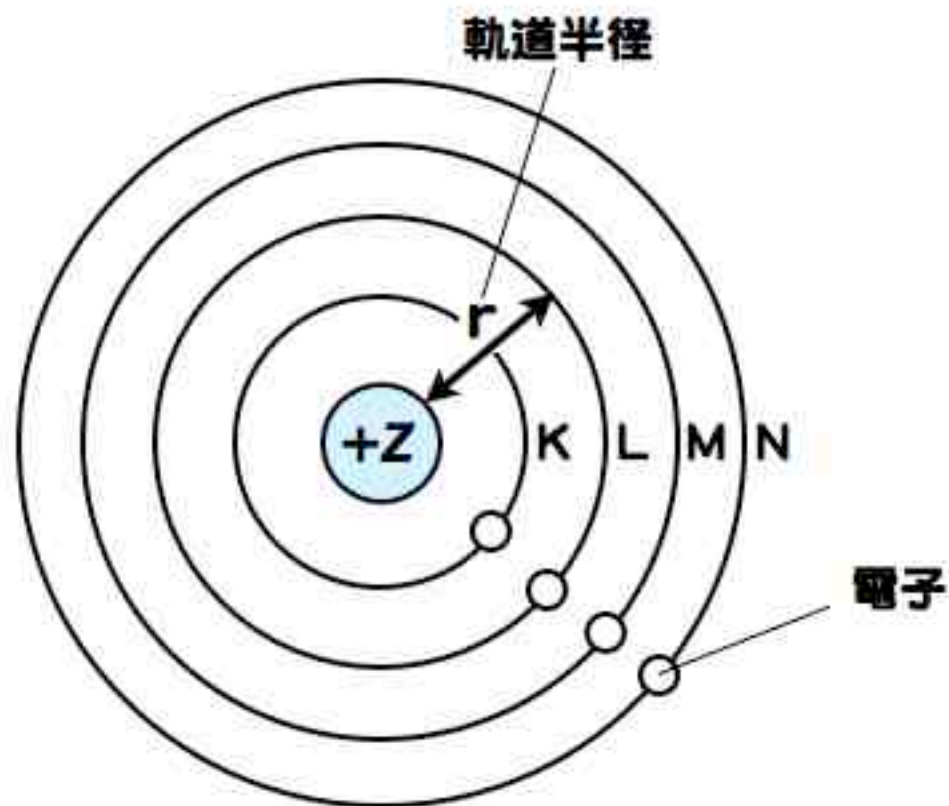
水素結合による分子間力が働いている

0°Cの水の密度：0.9998g/cm³、0°Cの氷の密度：0.9168g/cm³

感覚的に原子を知る (1)

古典的原子モデル (高校で習うモデル)

電子は原子核を中心とした同心円上の軌道に存在する。これを殻という。殻は原子核に近いものから順に K 殻、L 殻、M 殻、N 殻・・・と続いていく。



感覚的に原子を知る (2)

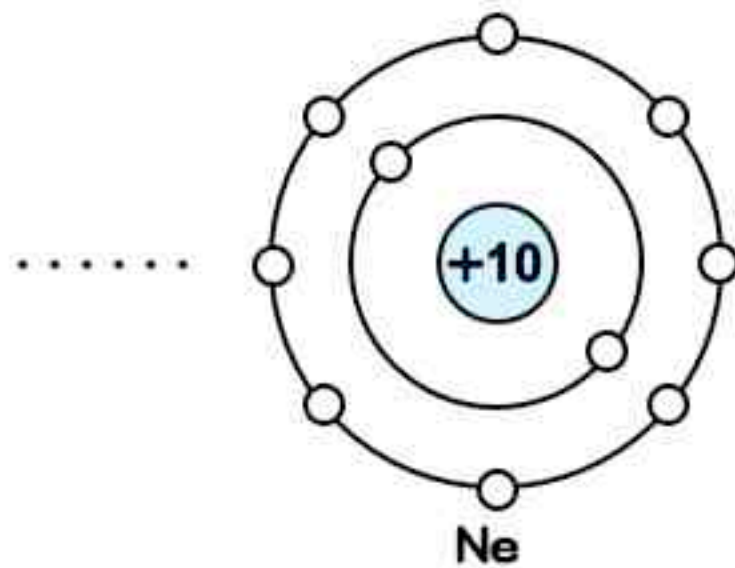
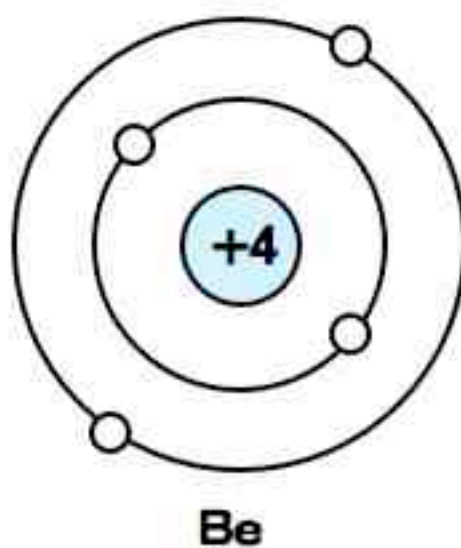
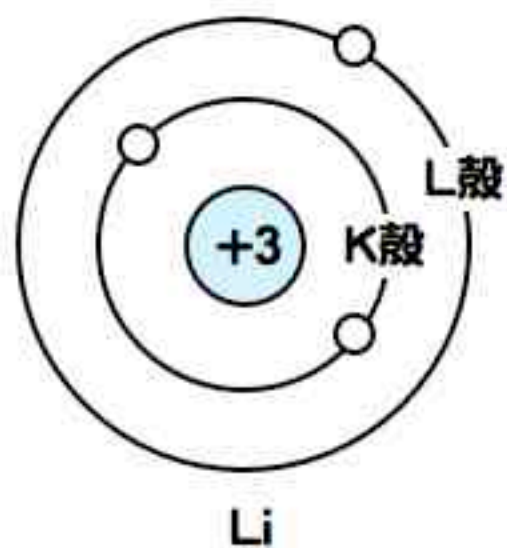
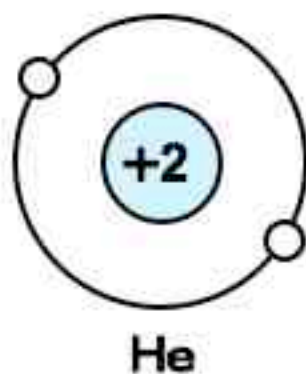
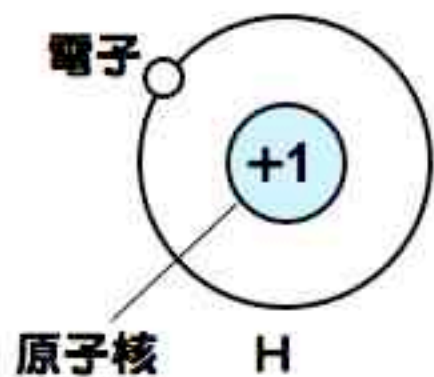
各殻には量子数が存在し、収容できる電子の最大個数(定員)が定まっている。最大個数は量子数を n とすると $2n^2$ 個である。

古典的原子モデル

量子数	名称	収容可能電子数
$n = 4$	N 殻	○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○ ○○○ 32個
$n = 3$	M 殻	○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○○ 18個
$n = 2$	L 殻	○○○○○○○○○○ 8個
$n = 1$	K 殻	○○ 2個

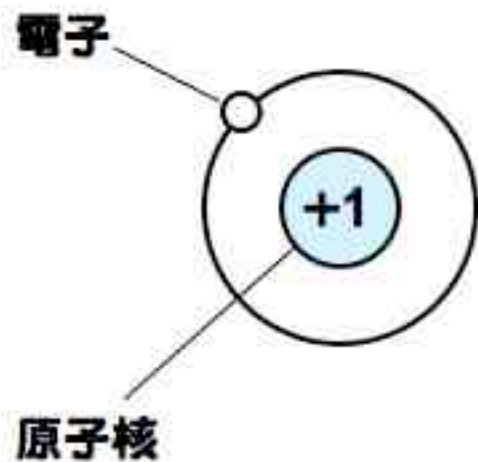
感覚的に原子を知る (3)

古典的原子モデル



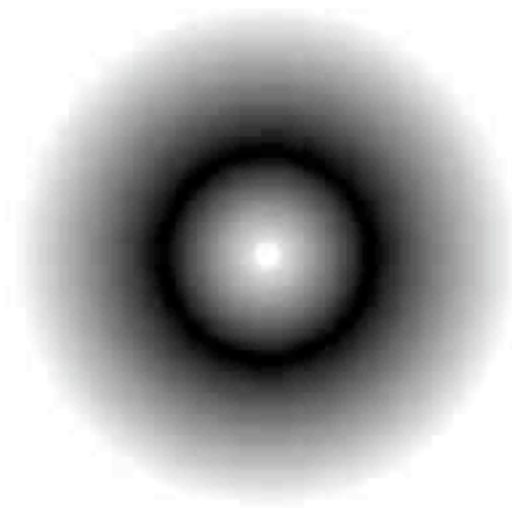
感覚的に原子を知る (4)

古典的原子モデル



水素原子イメージ

最新の原子モデル

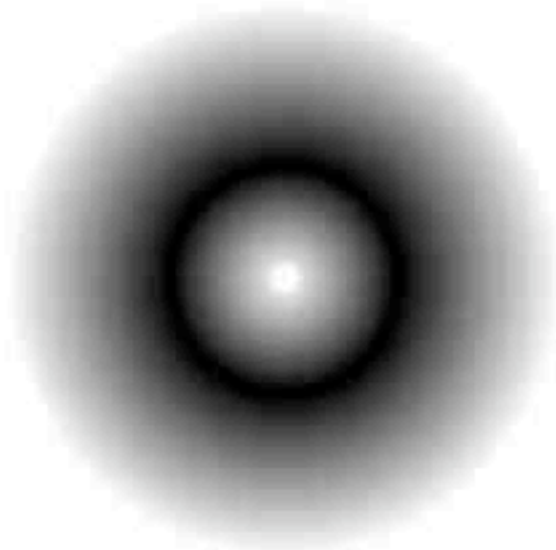


水素原子イメージ

感覚的に原子を知る (5)

地球上に存在する原子は、最小原子番号の水素原子から最大原子番号のウラン原子まで各種あるが、その直径はおよそ $1 \sim 2 \text{ \AA}$ (オングストローム、 0.1 nm) の範囲に入っている。その意味では原子に極端な大小はないと言える。

原子核は原子にくらべて非常に小さい。その直径はおよそ原子の1万分の1である。これは原子核の直径を 1 cm とした場合、原子の直径が 100 m になることを意味する。東京ドームを2個張り合わせて原子を作ったとすると原子核はピッチャーマウンドの位置にあるパチンコ玉、というイメージになる。



電子の存在確立 (電子分布)

