

2013.04.18(木4) 化学結合論(化学1年)

化学類向けというのは、たくさん有機化学とか無機化学とかの講義を受けることをもともと前提としている。

化学結合論っているんなやり方があるけど、高校の科学の教科書に書いてあるような、イオン結合・水素結合・配位結合…色々網羅して簡単な説明を高校よりもバージョンアップして話す…というようなことはあんまり考えていません。そういうことを15回やってもいいけど、共有結合に絞った話をする。それが私の化学類向けという意味になっちゃう。化学結合論のカatalog的な話をする必要はないと考えている。そこの所をまず…もし化学類以外の人手この講義を取りたいという人がいたら、覚悟していただく。かなり偏った話をするので。

何故そういう話をするかということ、何人か化学類以外の学生が登録していました。登録してもいいんだけどそういうことなんだよというのを理解してください。

出席を取ったりレポートを課したり、小テストをしたりします。平常点をつけてた方が成績を出しやすいと思うので。

目標

共有結合の定性的な理解

何故、中性の原子が結合するのか。

高校の時にやったルイスストラクチャーで納得できるか？これが本当の分子の姿だと思っている人はほとんどいないと思うんだけど、もう一歩進めた定性的な理解を得るとというのがこの講義の目的です。

[このクラスで高校の時に物理を履修しなかった人？]

(Newton力学 + 電磁気学) では、原子の安定性は説明できない。

ボーアの理論は一応説明するんだけど、原子がつぶれちゃわないというのは、古典力学をどれだけいじっても理解できない。プロトンと電子があれば原子が構成されるんだけど、古典力学と電磁気学を適用すると原子なんて全然安定じゃなくて、クーロンforceで原子と原子核が結合してしまって、 1\AA とか原子の大きさを保っているわけがないというのを習ったはずです。

中間的な理論としてボーアの理論というのがあるんだけど、原子の安定性を理解するためには量子力学がどうしても必要。もちろん原子が説明できなくて、分子・化学結合が説明できるわけがなくて、だから、どうしても量子力学的な理解が必要になる。

例えばイオン結合はなんで原子がつぶれないかということを見れば、プラスのチャージとマイナスのチャージを持っているのでその間の引力と、何故か原子自身が大きさを持っているからつぶれないんだというのがなんか説明できるような気がするんだけど、共有結合はそういうごまかしが効かない。

斎藤先生の講義と時間を入れ替えたんだけど、斎藤先生が最初のあたりはなんで量子力学が必要なのかみたいなことを話されるのではと思う。二重になるので、量子力学はこういう者だと認めてくださいと決まりを下りて説明して、それを元に化学結合は定性的にはこういう風に説明できるよと、少なくともボーアの理論よりは筋が通って説明をできるようにする。

量子力学

基本的原理がないということに不満を持つかもしれないが、基本的な原理というのは何からも導かれないことが普通です。ニュートン力学で $F=ma$ というのは実験的にそうだったからという以上のものはない。

2年次の量子化学でしっかりやることになる。その時は少し進んだ数学も使って、半分定量的な話ができるようになる。もっと緻密な話が聞きたい人はそこまでまっ準備をしておいてください。

教科書

シラバスに一応3つ本を上げている。

ブルソン: かなり薄い本

同じ著者: 厚い本

流れ

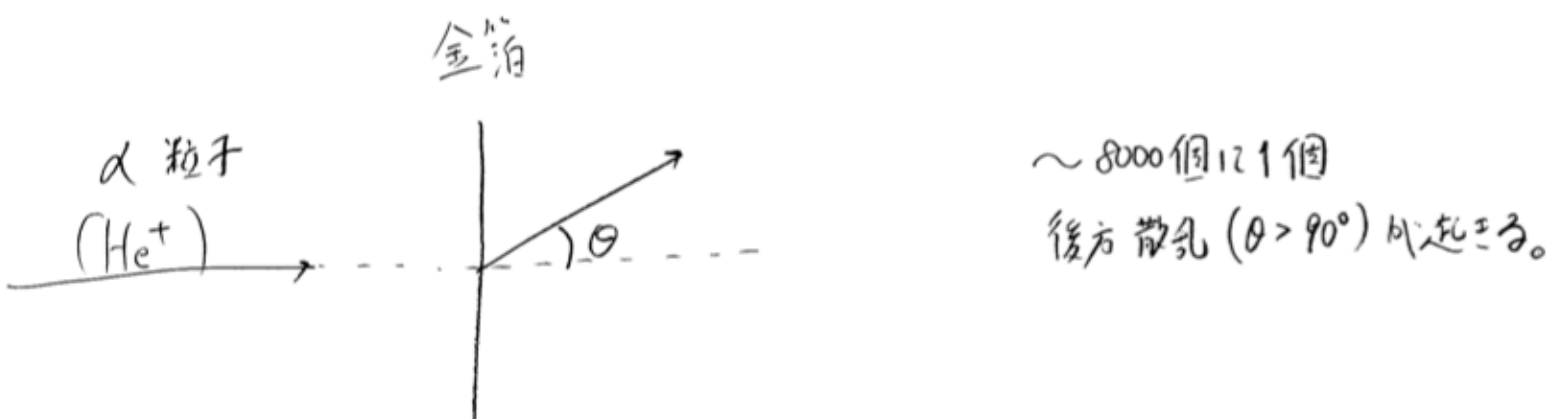
原子

二原子分子

多原子分子(できるだけ)

原子の安定性(高校の復習みたいなこと)

Rutherfordの原子模型(Gegen, Marsdenの実験)



Rutherfordが古典的な電磁気学を使って、反発を受けてると仮定したとき、正の電荷はすごく小さいところに集約していると考えerとうまく考えられる。 10^{-14} m だと。原子は 1\AA くらいだから 10^{-10} m 。だから1万分の一くらい。

原子の惑星モデル

電荷を帯びている者が加速度運動すると必ず電磁波をほうしゅつします。回っている面の真横から見ると、電子は、振動しているように見えるから、なんとなくそんな感じがするでしょ？電磁気学を使えば必ずそうなる。面亡い方向に電磁波がほうしゅつされます。運動エネルギーを失っていきながら、実際は、たちまちのうちに半径がどんどん小さくなって、ヒューって小さくなる。

水素原子はとても簡単(原子と電子の2体問題なので)。水素原子で計算するとき必要なのは、チャージと、電子の質量(原子核はとても重いものとする)と、初期半径を普通の水素の大きさ($5 \cdot 10^{-11}$ m)にしておくと、半径がaから0になるのに必要な時間はだいたい 10^{-11} 秒。

なので、古典力学と電磁気学では原子の安定性が説明できません。

それを解決するために高校の時に習ったボーアの量子条件とかあるんだけど、話の筋としてまず光の粒子性を。

光の粒子性

これもないように入っていくことはできませんが、必要な結果を出しておきます。
Plankの熱放射の研究 + Einsteinの光電効果の研究

光は古典力学では、電磁波では波です。波の振幅の2乗がエネルギーに比例するんだけど、自由に振幅を買えることができるからエネルギーの最小単位はないはず。どれだけ小さなエネルギーも取れることになっているんだけど、すごくあつい1000Kとかの物体から何が出てくるかという研究をやっていたのがPlank。光を当てるとどうなるかという理論的な研究をしていたのがEinstein。

$h\nu$ (ν : 光の振動数)の整数倍のエネルギーしか取ることができない。

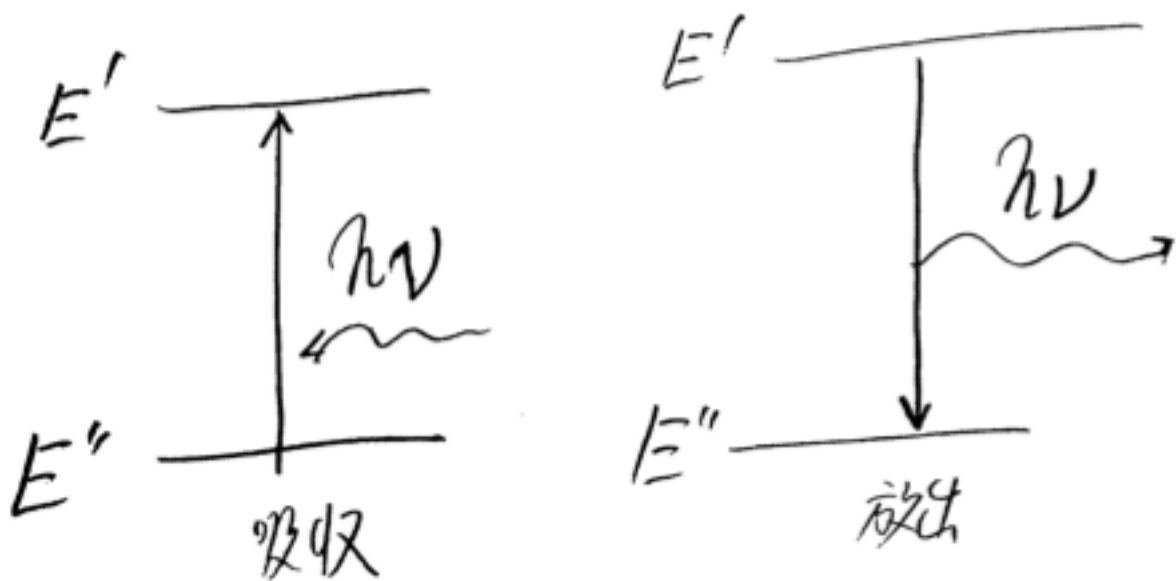
h : Plank定数($6.626 \dots \times 10^{-34}$ [Js])

Plank定数がすごく小さいのでほとんど連続に見えていた。

ボーアの理論は非常に不自然なモデルなのです。でも認めざるを得ない事情があった。

水素原子の発光スペクトル。

H_2 が $2H$ に分かれる。



Balmer

$$1/\lambda = R (1/2^2 - 1/n^2)$$

Rydberg

$$1/\lambda = R (1/2''^2 - 1/n'^2)$$

$$n'' < n' ???$$

R: Rydberg定数

ボーアの理論

古典物理 + 2つの仮定

(1)

電子の軌道は古典的に求められるもののうち、量子条件を満足するものだけが安定な、定常状態の軌道として実現される。

$$\oint p dq = n h \quad (n = 1, 2, \dots)$$

p: momentum

q: coordinate

(2)

原子が光を放出・吸収するのは、定常状態間を遷移するときのみであり、放出・吸収される光の振動 ν は

$$h\nu = E' - E''$$

できまる。

E' , E'' は関係する2つの定常状態のエネルギー