

2013.04.25(木4) 化学結合論

ボーアの水素様原子

hydrogen-like atom

電子が一個だけ

H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>, ...

等速円運動(半径a)

核は重いので動かない

$$m_p / m_e \sim 2000$$

量子条件

[1]

古典力学で等速円運動を等速円運動で行わせておく。

∫: 1周期に渡って積分してね

p: 運動量

q: pに対応する座標

接線方向の距離が $2\pi a$ になるので、 $\int dq = 2\pi a$

2体問題は1体問題と同じにできる。

[わけがわからない]

[これで高校の話は終わり?]

①

$$\oint p dq = p 2\pi a = nh \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

遠心力 = クロン力

$$\frac{p^2}{mea} = \frac{Z^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 a^2}$$

$m_e$ : 電子の質量

$\epsilon_0$ : 真空の誘電率

$$p 2\pi a = nh$$

量子条件

許される軌道半径は  $n$  によって決まる。

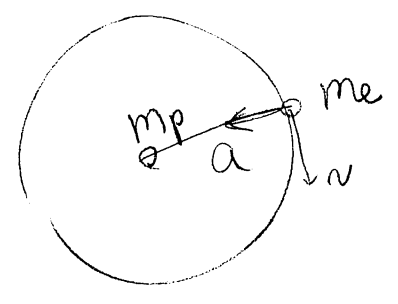
$$a = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m_e Z e^2}$$

運動エネルギー

全エネルギー

$$E_n = + \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Z^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 a}$$

$$= - \frac{m_e Z e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



$$mv = p$$

$$p = m_e^2 v^2$$

$$m_e \frac{dv}{dt} = F$$

$$\frac{p^2}{m_e^2 a} = m_e^2 v^2$$

cf. 核も動く => すると、

$$\mu^{-1} \equiv m_p^{-1} + m_e^{-1}$$

遠心力      クロハカ

~~1/r^2~~       $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2} Z^2 e^2$

$E_m \rightarrow E_n$  の際の発光の  $\nu$

$$E_m = E_n + h\nu$$

$$\frac{c}{\lambda} = \nu = \frac{1}{h}(E_m - E_n)$$

c 光速

$m_e$  を  $\mu$  (換算質量) で置きかえればよい

と = 17 号

## 量子力学

Bohrの理論

量子条件の根拠が不明

2個以上の電子を持つ原子のスペクトルの説明がうまくいかない

量子力学 quantum mechanics

Heisenberg

Schölinger

Heisenbergの不確定性原理

②

$$\Delta x \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \text{ Dirac 定数}$$

↑  
Planck 定数

3

$$\hbar = 6.62606896 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

$$P = mv = m \frac{dr}{dt}$$

① 例 1g の玉の  $\Delta x = 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow \Delta P_x ? \Delta V_x ?$

$$\Delta P_x = 6.6 \times 10^{-34} (\text{J}\cdot\text{s}) \div 10^{-10} (\text{m}) \cdot \frac{1}{4\pi} = 5.3 \times 10^{-25} \text{ N}\cdot\text{s}$$

$$1 \text{ N}\cdot\text{s} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2} \cdot \text{s}$$

$$= 1 \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$$

≠

※

$$M = 10^{-3} \text{ kg}$$

$$\Delta V_x = \Delta P_x / M = 5.3 \times 10^{-22} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$= 5.3 \times 10^{-12} \text{ \AA}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$M = 10^{-30} \text{ kg}$$

$$\Delta V_x = 5.3 \times 10^{15} \text{ \AA/s}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

## 波動関数

一般には複素数の値を持って良いことになっている…

多重積分で前に書いた方が好きなのは、後ろに核とインテグラルと  $dx, dy, dz$  の対応がどれとどれなのか分からないから。

ボーアの定常状態に相当するものを見つける方法？

時間に依存しないSchödinger方程式

time-independent Schödinger equation

Bohr理論の定常状態に対応した状態を見つける方法

cf. 時間に依存するSch.eq.  $\Leftarrow$  運動方程式

今は時間変化することを狙ってなくて…

波動関数 ψ

系の状態: 波動関数 ψ

一粒子の場合 ψ(x, y, z)

$$|\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz : \begin{matrix} x \sim x+dx, \\ y \sim y+dy \\ z \sim z+dz \end{matrix} \text{に}$$

粒子の見出される確率

全確率 = 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(x, y, z)|^2 = 1$$

③

Ĥ: ハミルトニアン

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

↑ ↑  
 線型演算子 実数 波動関数

cf. 線型代数