化学第二　V-2
第1回

東京工業大学大学院
電子物理工学専攻

真島豊

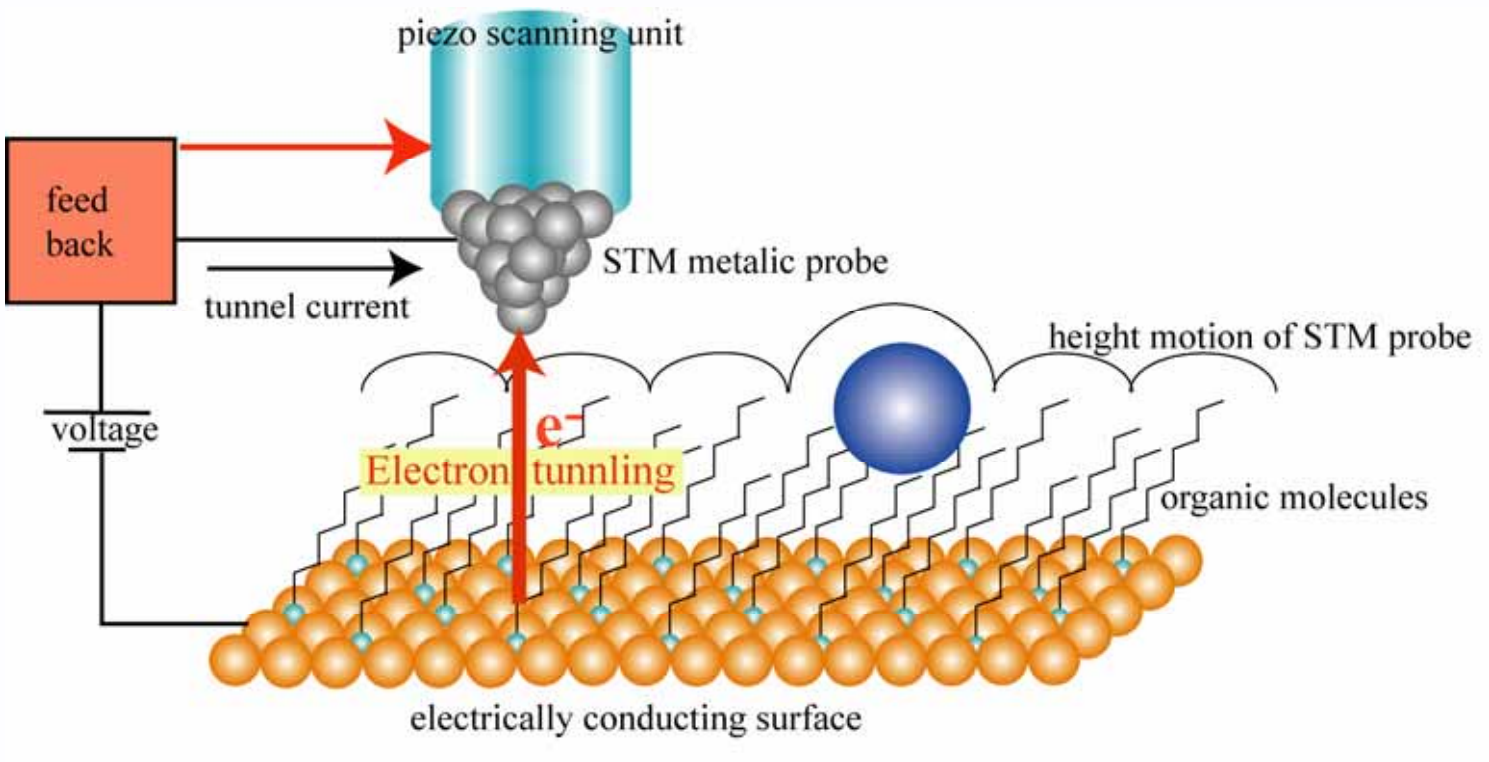
化学第二のgoal

物質の化学結合を理解し、化学結合と物質の電気的、化学的な性質［物性］との関係を明らかにする

- 水素原子　H
- 多電子原子
- 水素分子イオン　H_2^+
- 水素分子
- 異核2原子分子

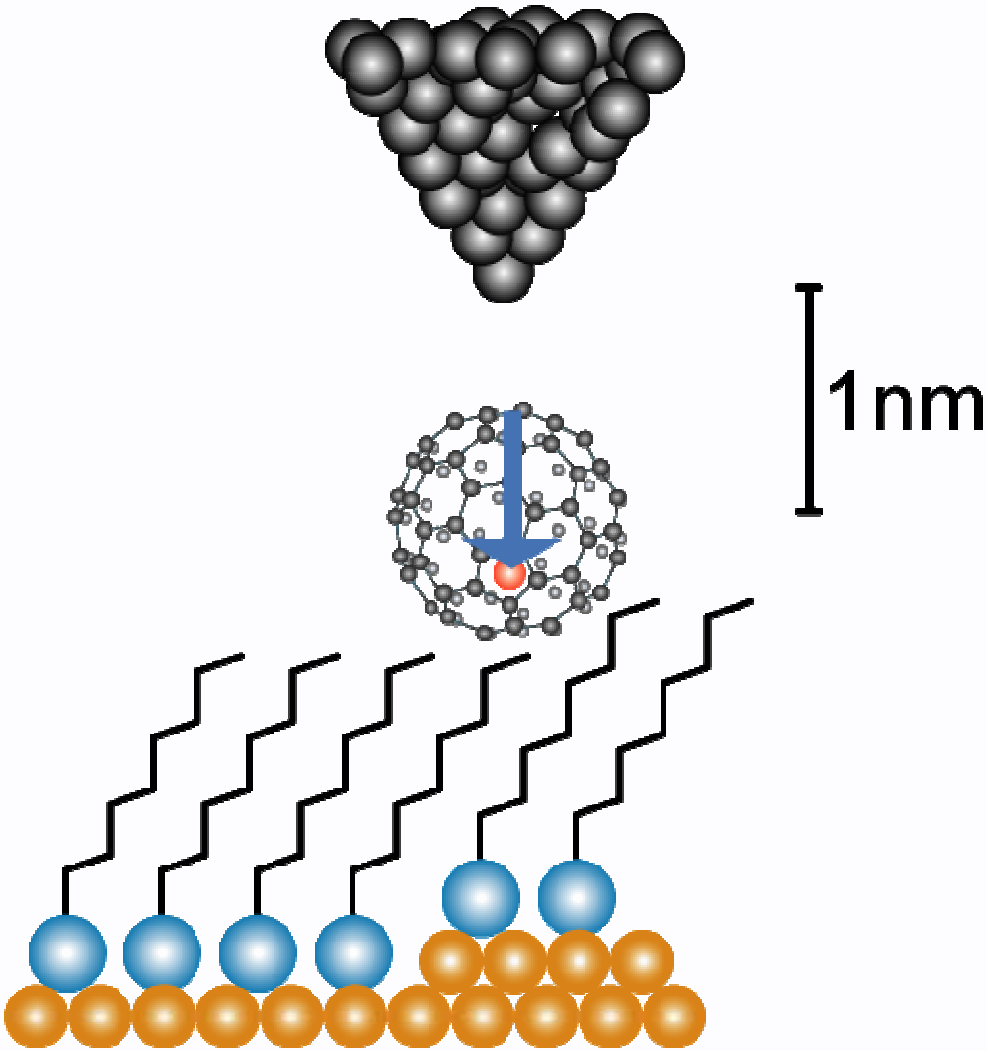
- σ軌道とπ軌道
- 軌道の混成
- π電子の特徴
- フロンティア軌道

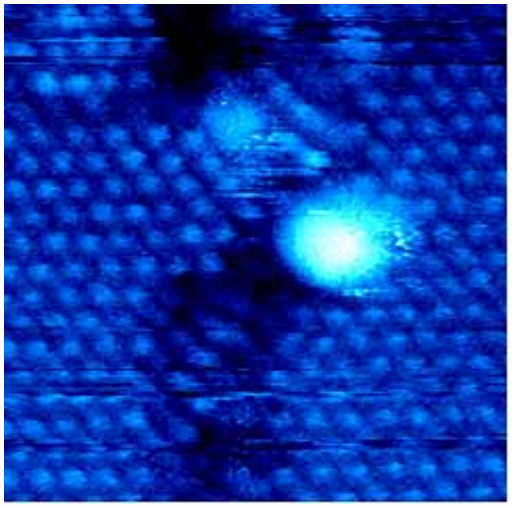
走査型トンネル顕微鏡
Scanning Tunneling Microscopy



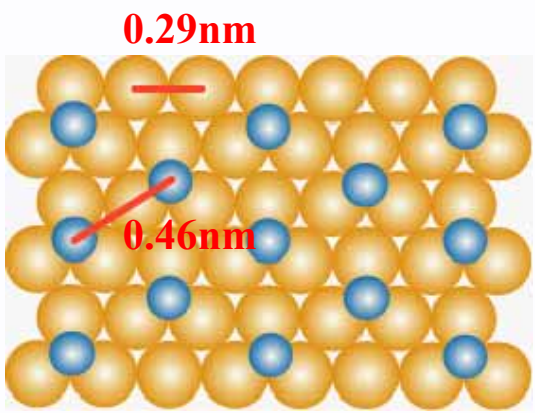
原子スケールでの表面凹凸像ならびに局所状態密度の観察が可能となる。

単一フラーレン分子スイッチ



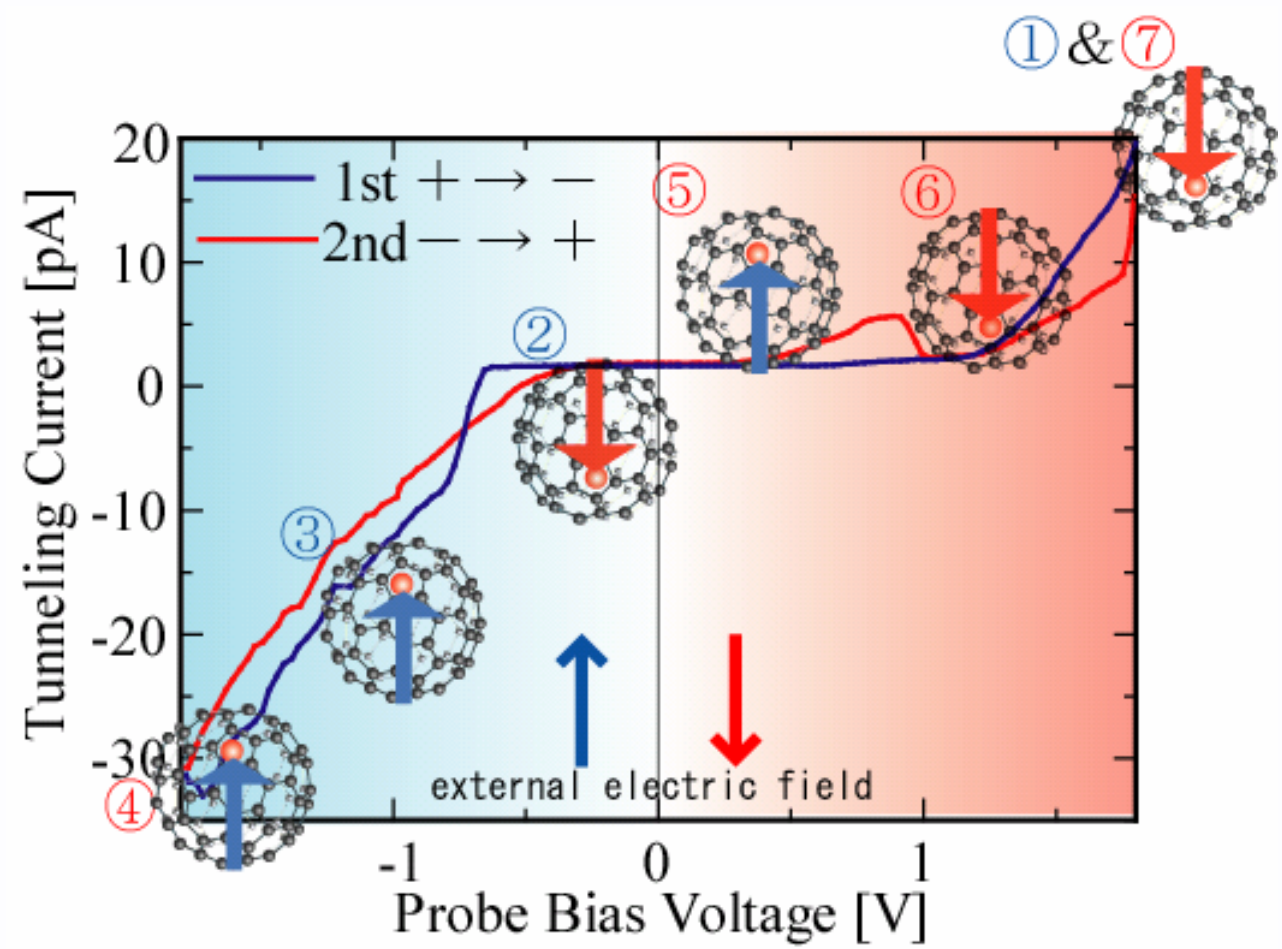


scan size 7 × 7[nm^2]



Single Molecular Orientation Switching of an Endohedral Metallofullerene, *NanoLetters*, 5, 1057 (2005).

単一フラーレン分子スイッチ特性



Bias voltage sweep direction

①→②→③→④→⑤→⑥→⑦

1-0　本日のメニュー

1-1　水素原子における電子の波動関数のポイント
1-2　電子のポテンシャルエネルギー　$V_{(r)}$
1-3　シュレディンガーの波動方程式(直交座標)
1-4　シュレディンガーの波動方程式(極座標)
1-5　水素原子の1s軌道の波動関数

波動関数

- 波動関数…一つの状態を表す
- 波動関数の絶対値の２乗は確率密度を表す

ボーアの原子軌道　量子化した軌道

原子の大きさ　10^{-10}[m]

$\Delta x \sim 10^{-10}$[m], $m = 0.9 \times 10^{-30}$[kg]

$\Delta p \sim h/\Delta x$

$\Delta E = m/2(\Delta v)^2 = 2.4 \times 10^{-17}$ [J] ~ 150 [eV]

1-1 水素原子における電子の波動関数のポイント

- 水素原子は一番構造が単純な原子である。
  →水素の波動関数は、他の原子あるいは分子の基本

- 水素原子は陽子(質量m_h 、電荷 $+e$)と電子（質量 m_e 、電荷 $-e$ ）からなる。

- 電子の波動関数は3次元

- ポテンシャルエネルギー$V_{(r)}$は、原子核(陽子)と電子の距離に依存する。

1-2　電子のポテンシャルエネルギー $V_{(r)}$ (陽子 $+e$ と電子 $-e$)

ポテンシャルエネルギー $V(r)$は、

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$ となる

ところで、クーロン引力 $F(r)$ はポテンシャルエネルギーを r で微分したものと等しいので、

$$F(r) = \frac{dV(r)}{dr} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = -e\left(\frac{-e}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\right) = -eE(r)$$

となりクーロン引力は電界に電荷をかけたものと等しい。

※クーロンの法則を積分するとポテンシャルエネルギー

1-3 シュレディンガーの波動方程式

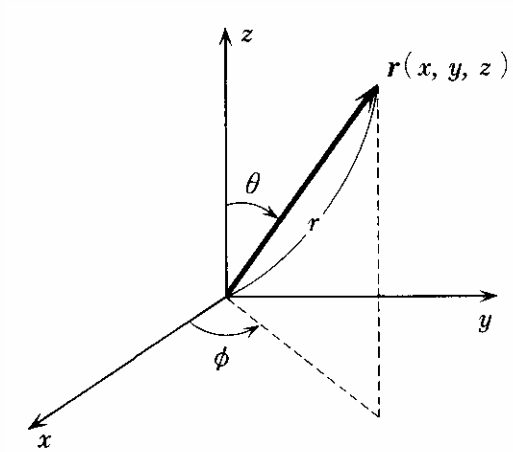
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z)+V(r)\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

ただし、r は原子核と電子の距離で　$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$　である

1-4 シュレディンガー波動方程式(極座標表示)

極座標

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$



極座標を用いたシュレディンガーの波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\Psi(r,\theta,\phi)+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r,\theta,\phi)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi(r,\theta,\phi)\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Psi(r,\theta,\phi)\right)$$
$$+V(r)\Psi(r,\theta,\phi)=E\Psi(r,\theta,\phi)$$

1-5　水素原子の1s軌道の波動関数

水素原子の電子の波動関数は、

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

で与えられる

$R_{n,l}(r)$は動経方向の波動関数、$\Theta_{l,m}(\theta),\Phi_m(\phi)$は角度依存性を表す波動関数である

1s軌道は動経方向の波動関数のみ

$$\Psi(r,\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0{}^3}}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

であらわされる