

ポテンシャル曲面の化学(2)

あとで、クイズが出ます。
できるだけ、メモしておくことを、
オススメします。



7月21(木)13:00-14:30

担当: 大野 公一

1. 化学とポテンシャル曲面

2. 化学結合ができる仕組み

3. 分子内ポテンシャルと分子振動

4. 分子間ポテンシャル

5. 原子と分子のポテンシャル

6. 化学反応とポテンシャル

原子同士は
どのような仕組みで
結合するのか？

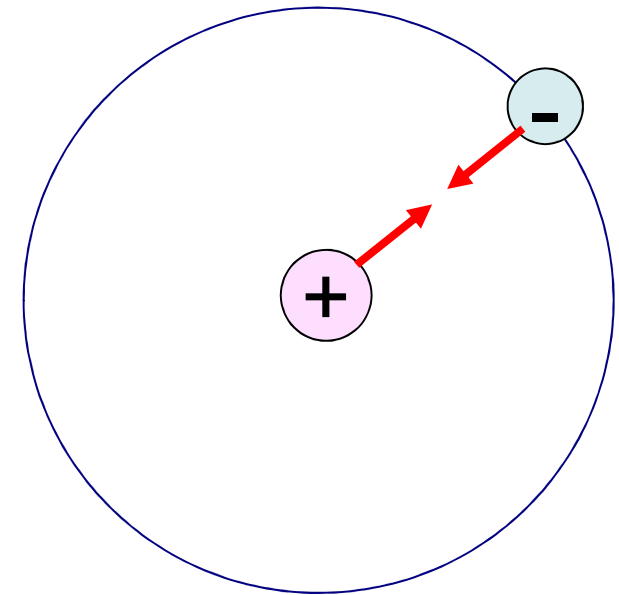


原子の内部構造

- 原子は**原子核**と**電子**からなる。
- 原子核は**正**、電子は**負**の電荷をもつ。
- 正負の電荷は互いに**引き合う**。

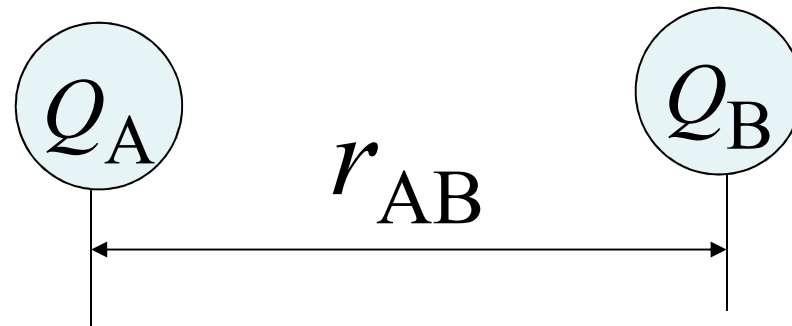
- 原子核は**重**く、電子は**軽**い。
- 原子核のまわりを電子が**回る**。

- 原子番号 = 核に含まれる陽子数
= 核の周りの電子数



荷電粒子間のクーロン力

$$F = k Q_A Q_B / r_{AB}^2$$



電気量 Q の積に比例し、

距離 r の2乗に反比例する力 F が働く

クーロン力 と 万有引力

$$F_C = k Q_A Q_B / r_{AB}^2 \quad F_G = G M_A M_B / r_{AB}^2$$

電気量 Q の積に比例 質量 M の積に比例

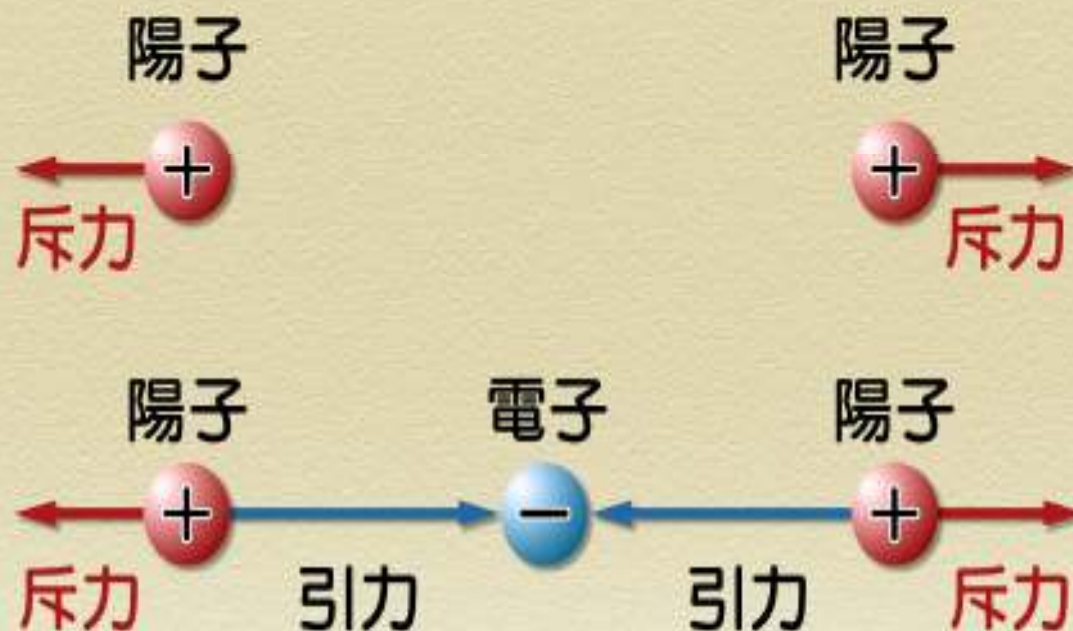
どちらも 距離 r の2乗に反比例する力 F が働く

$$k e e / G m m = ? \quad (\text{電子間のクーロン力と万有引力})$$

(4.17 × 10⁴²)

荷電粒子間のクーロン力

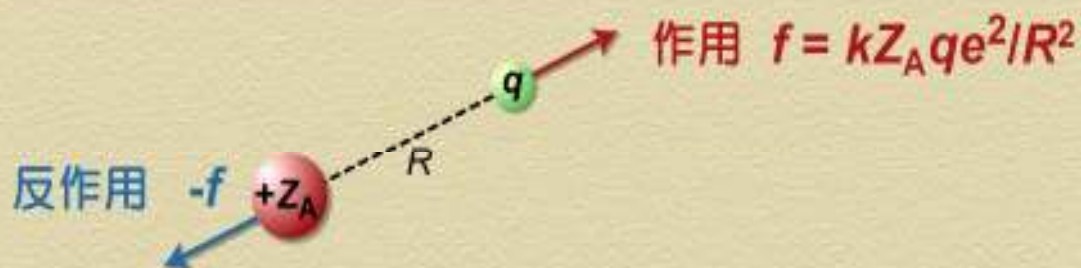
$$F = Q_A Q_B / (4\pi\epsilon_0 r_{AB}^2)$$



ファインマンの静電定理(1939年)

個々の原子核に働く静電気力

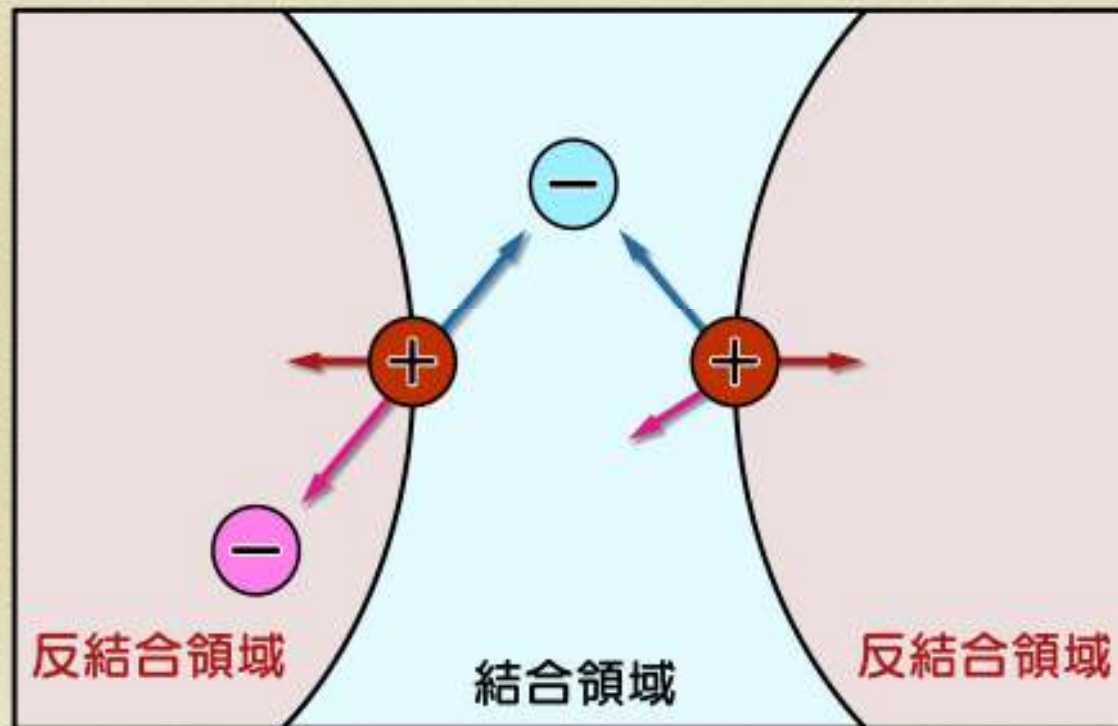
$$F_A = \sum(-f)$$



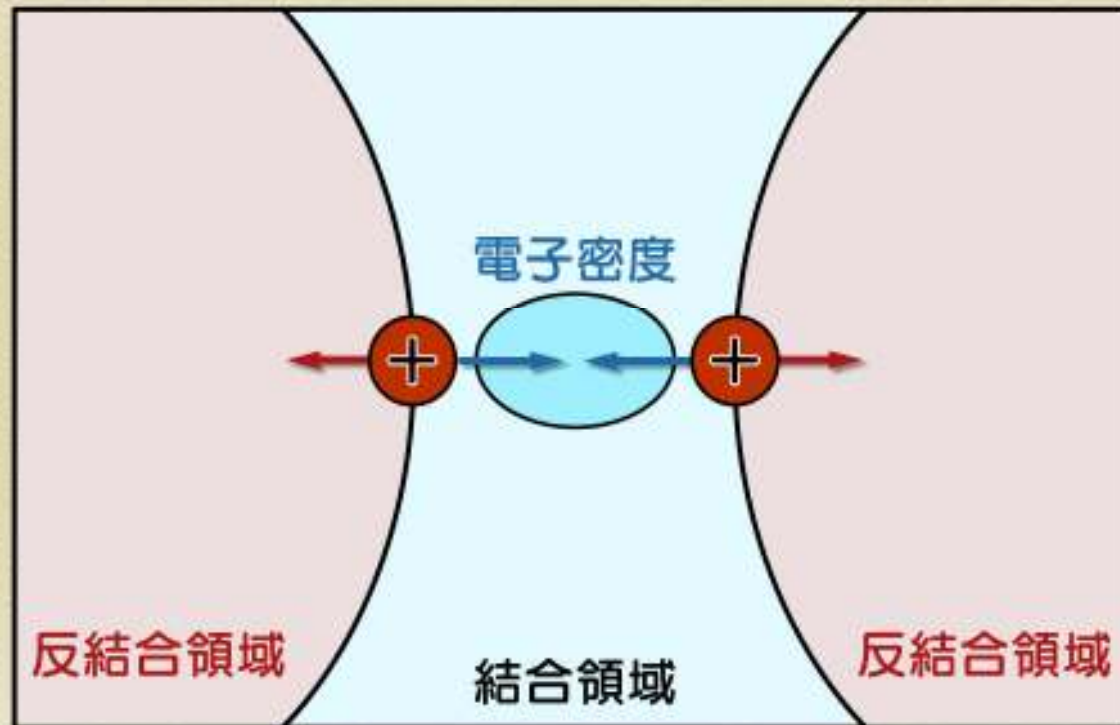
$F_A =$ (他の原子核からの反作用の合力) + (電子密度 $\rho(r)$ からの反作用の合力)

$$\int \rho(r) dr = N \quad (\text{全電子数})$$

結合力と反結合力



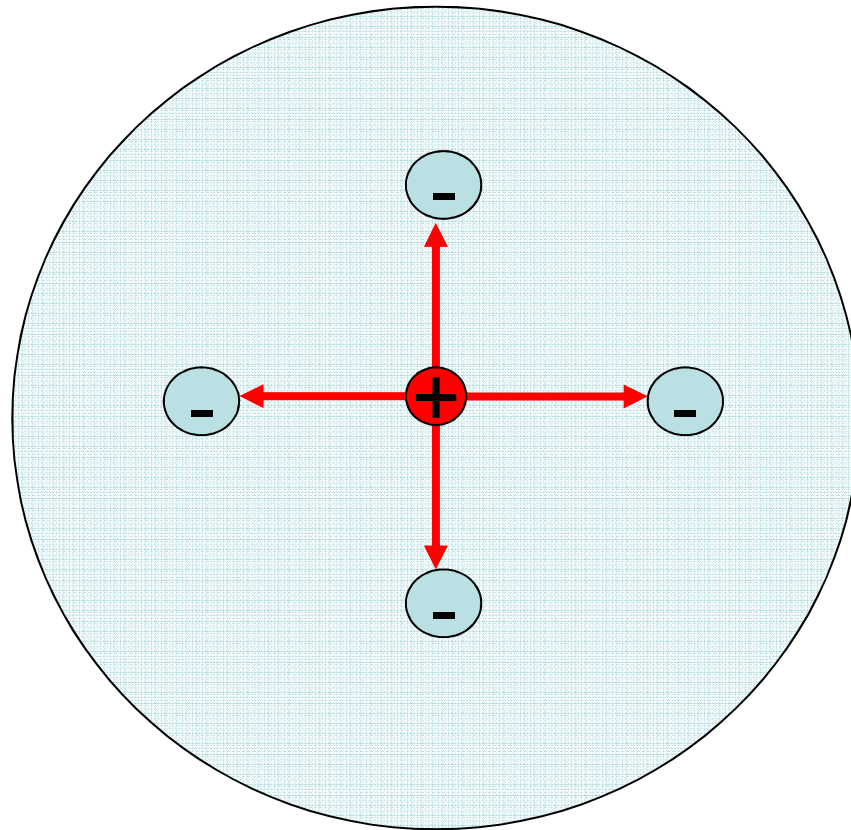
電子密度と結合力



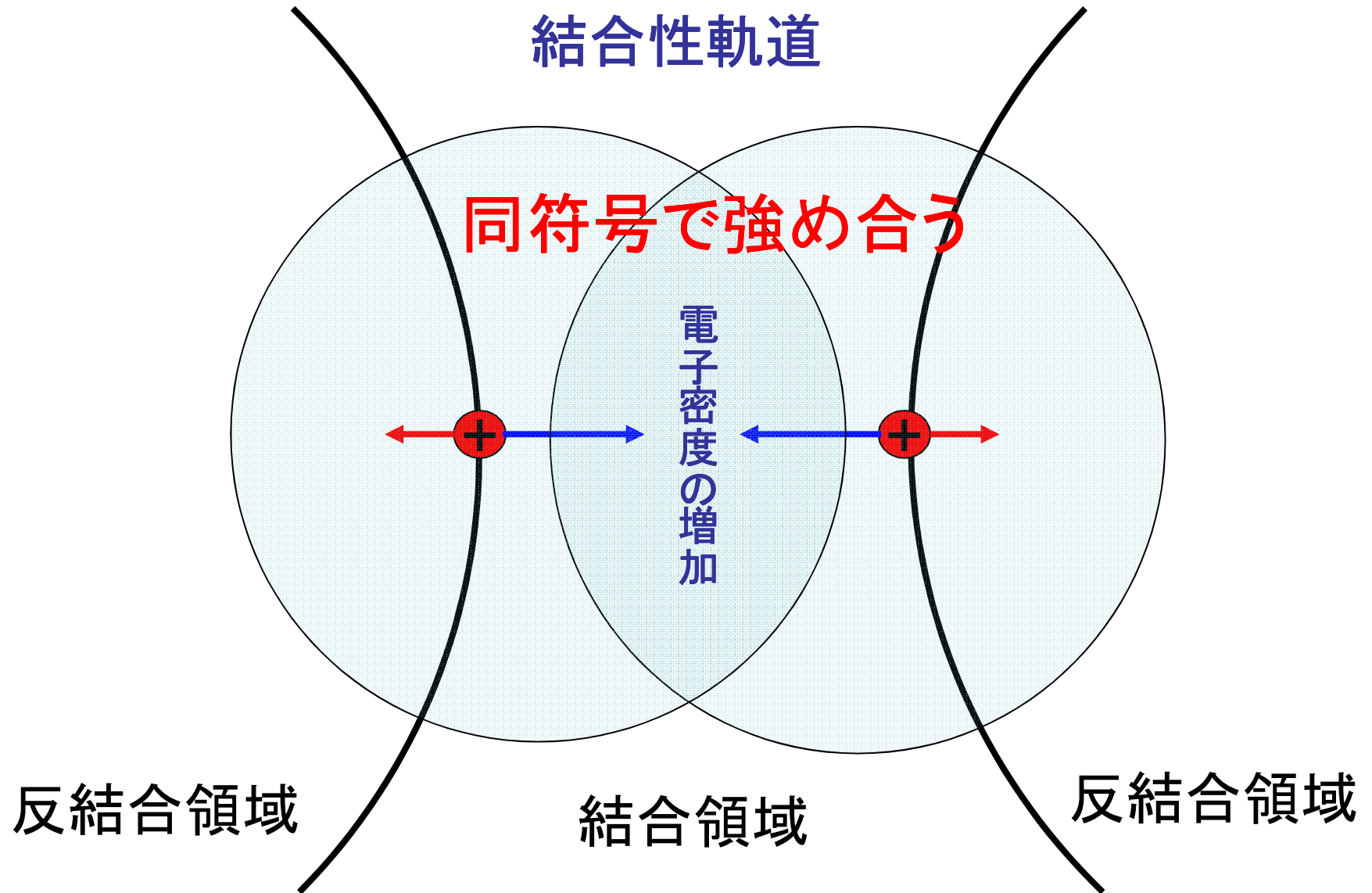
電子の波動性（量子力学）

- 電子は、その所在を一定位置に止めず、波のように、「うねり」ながら空間を運動する。
- 電子の波の「うねり」は、電子が通る経路ではなく、電子が出現する「頻度」(確率)を表す。
- 電子の出現頻度の空間分布(電子密度)を、空間に浮かぶ水滴の濃さのように表すと、雲のように見えるので、「電子雲」とよばれる。
- 電子の波を「電子波」(でんしは)という。

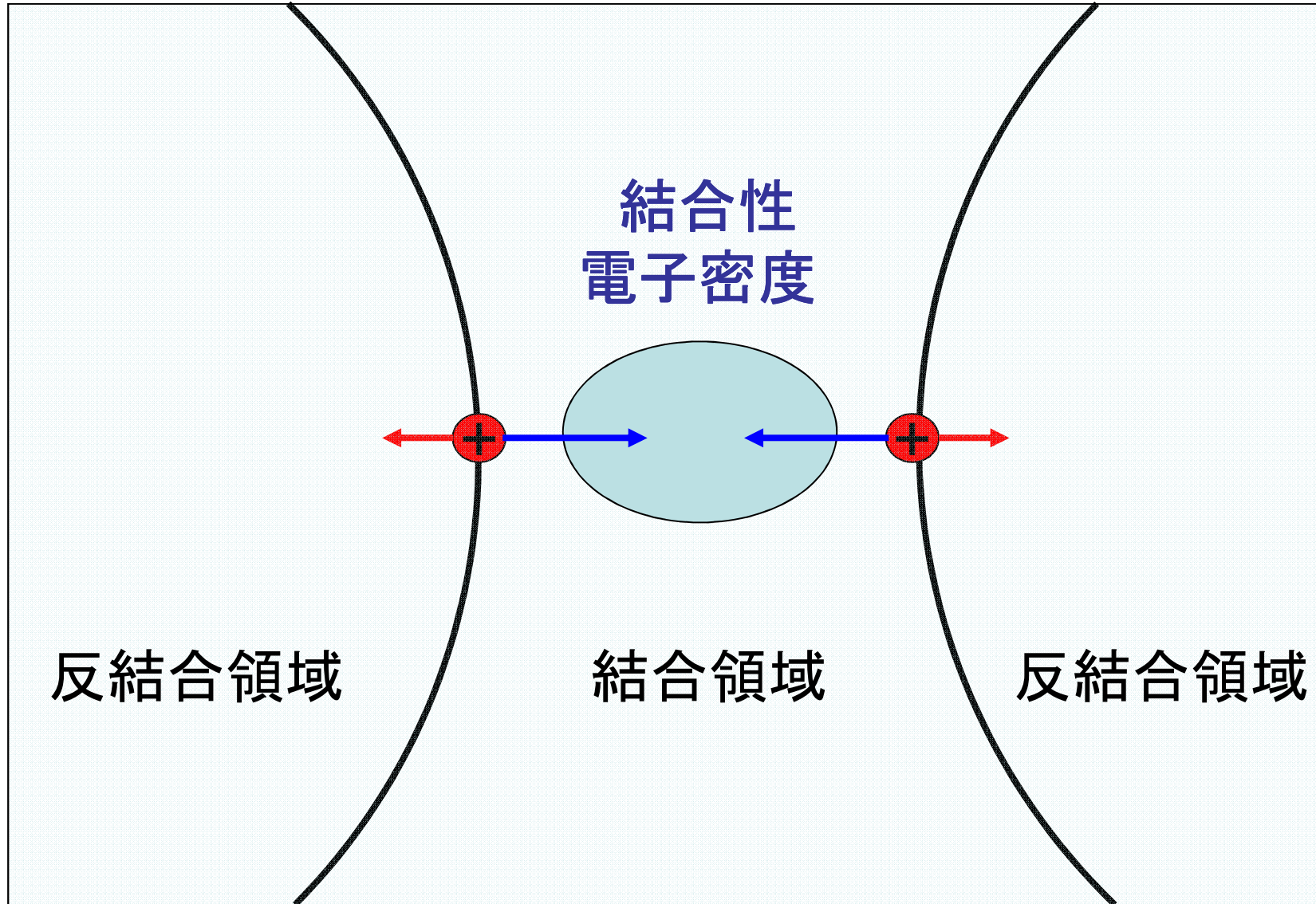
原子中の電子波は、
中心対称をもつため、
原子核を引っ張る力が、
完全にキャンセルする。



結合性の電子波の発生



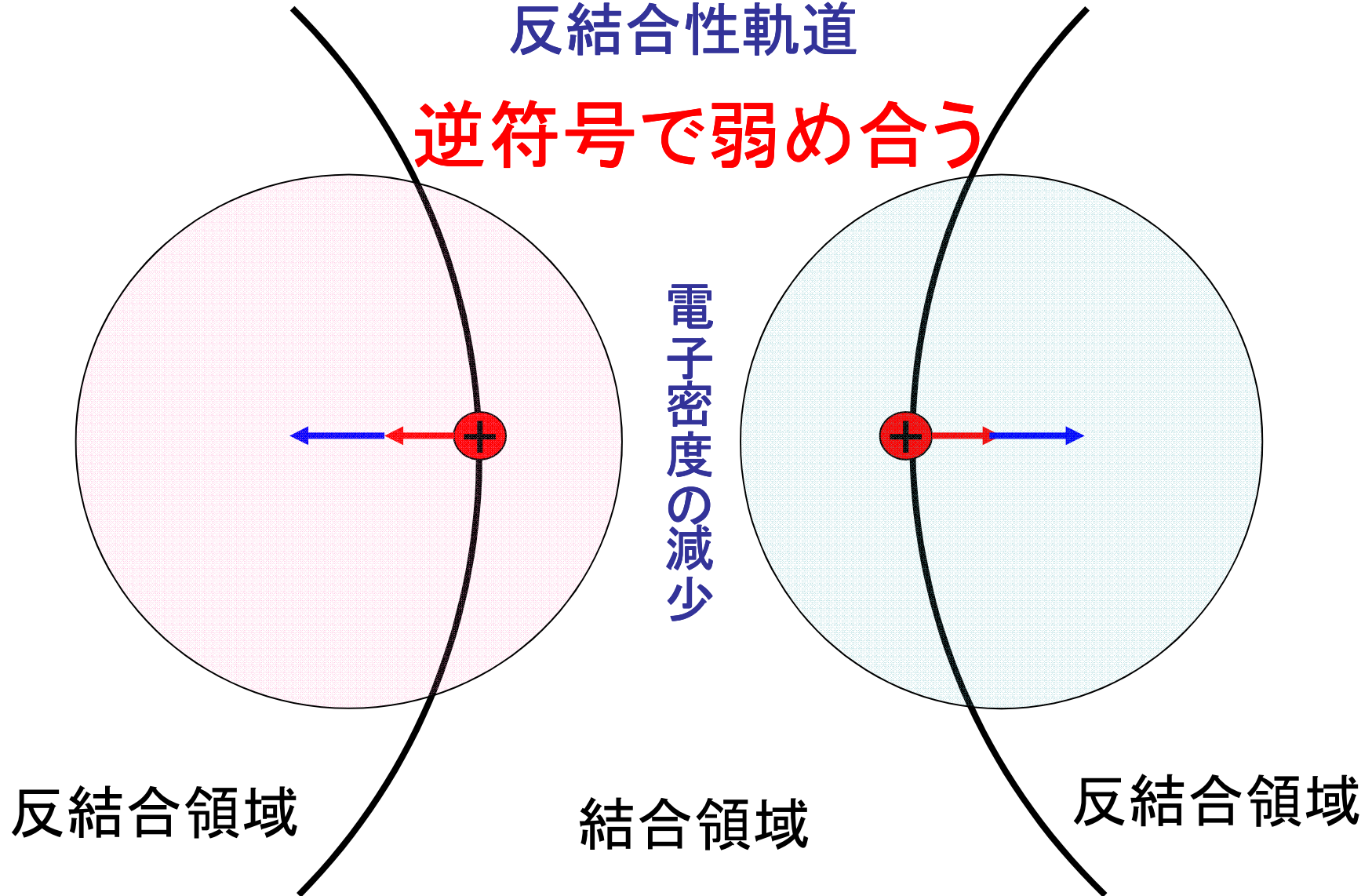
電子密度と結合力



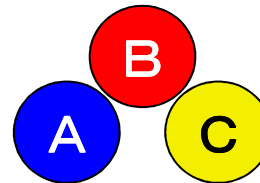
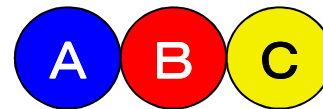
反結合性の電子波の発生

反結合性軌道

逆符号で弱め合う

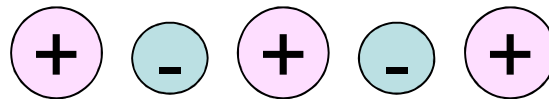


分子の形は
どのような仕組みで
決まるのか？

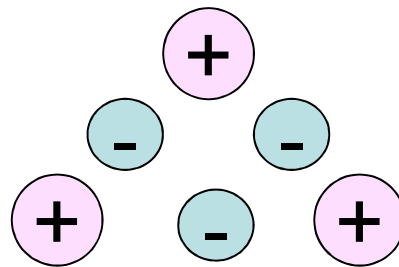


電子密度で形が決まる

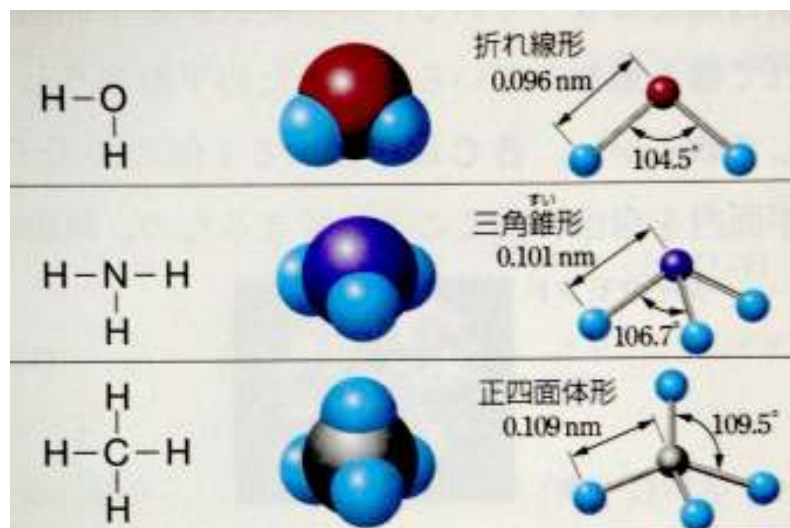
- 直線分子 $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$ $\text{H}-\text{Cl}$



- 三角型分子 H_2O H_2S SO_2



分子の形は 理論的に 予測できるか？



© Tazuke Productions

量子力学の方程式を解けば、分子(化学)のことは何でもわかる!

$$H\Psi = E\Psi$$

Schrödinger / Heisenberg

Dirac

Heitler / London

Pauling / Mulliken

Eyring

Bell / Evans / Polanyi

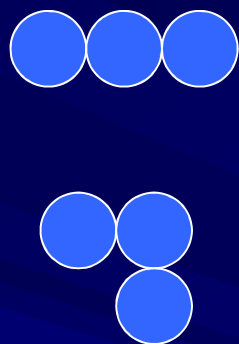
Woodward / Hoffmann /

Fukui

Pople / Kohn



コンピュータ化学

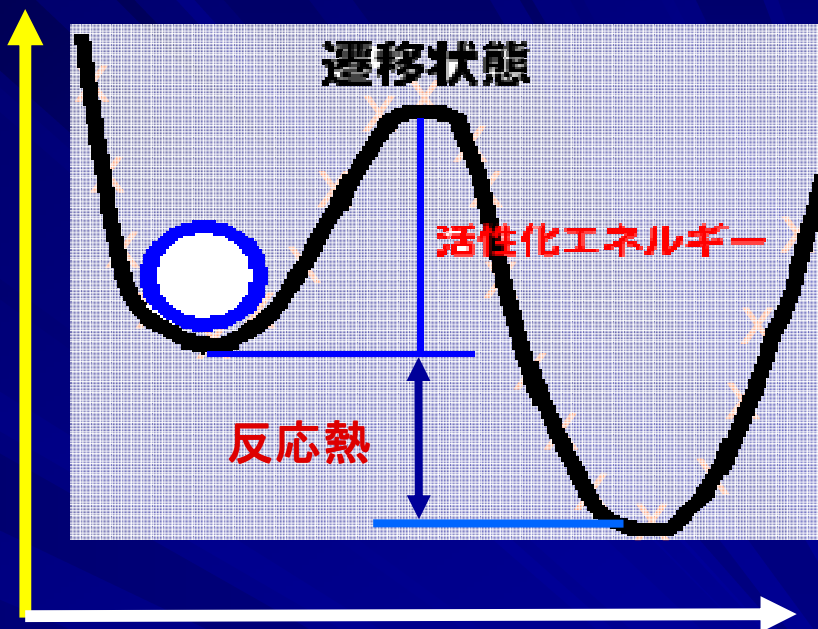


構造



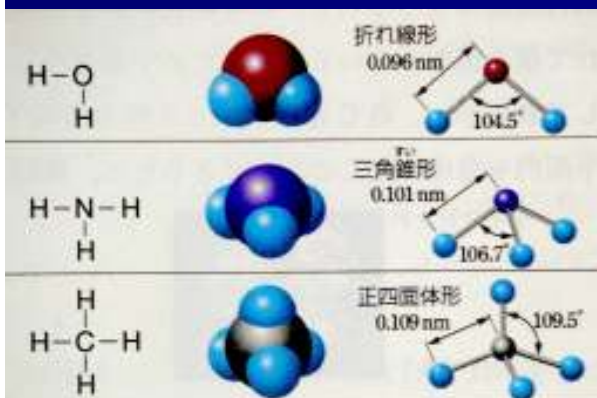
エネルギー

エネルギー



構造: 原子の並び方

$$H\Psi = E\Psi$$



- 分子(化合物)の形(結合長・結合角)
- 反応の活性化エネルギー(反応速度)
- 結合エネルギー(反応熱)
- 結合のバネの振動(分子振動)

1. 化学とポテンシャル曲面

2. 化学結合ができる仕組み

Next → 3. 分子内ポテンシャルと分子振動

4. 分子間ポテンシャル

5. 原子と分子のポテンシャル

6. 化学反応とポテンシャル