

# 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

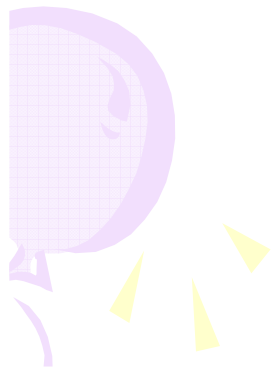
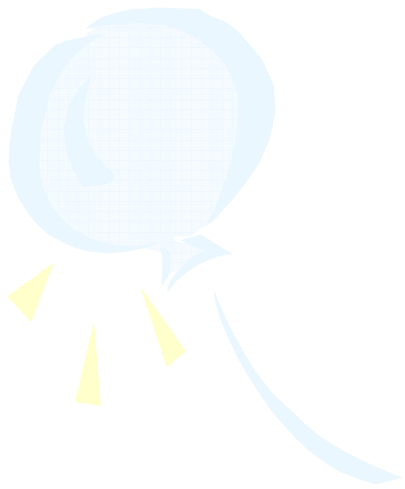
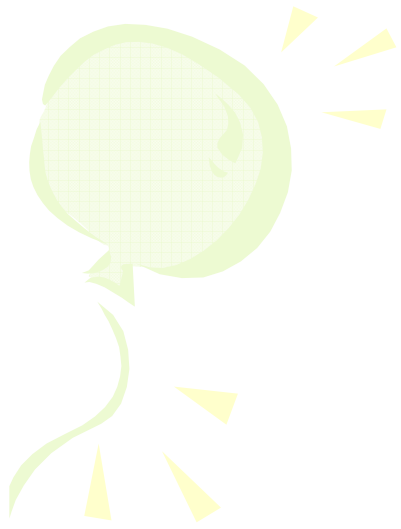
3. 分子内ポテンシャルと分子振動

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？

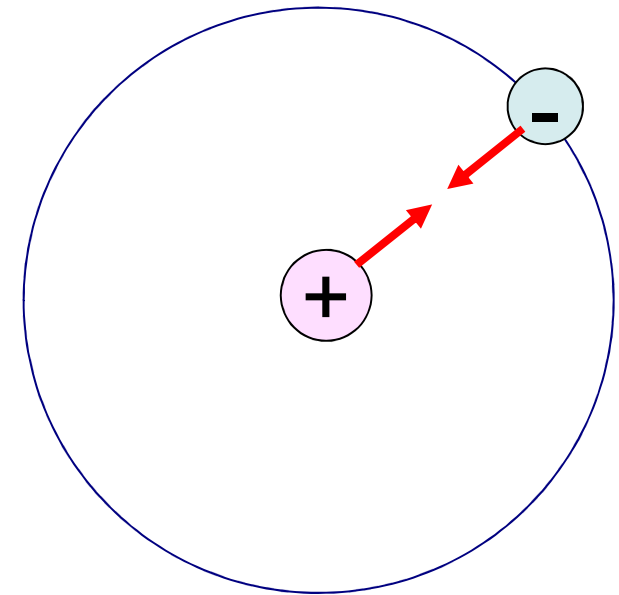


# 原子の内部構造

- 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**。

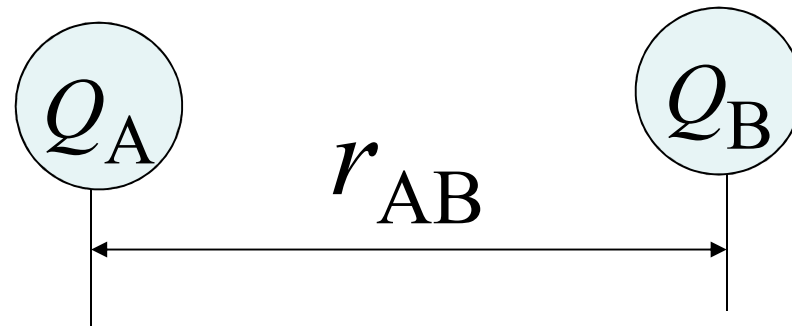
- 原子核は**重**く、電子は**軽**い。
- 原子核のまわりを電子が**回る**。

- 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

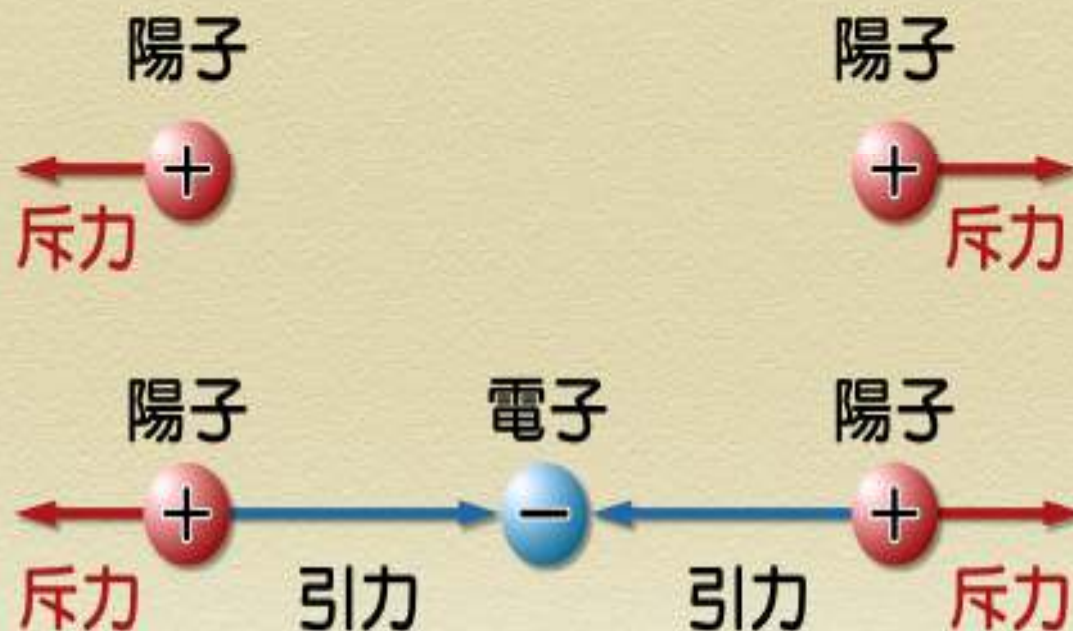
どちらも 距離  $r$  の2乗に反比例する力  $F$  が働く

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

( $4.17 \times 10^{42}$ )

## 荷電粒子間のクーロン力

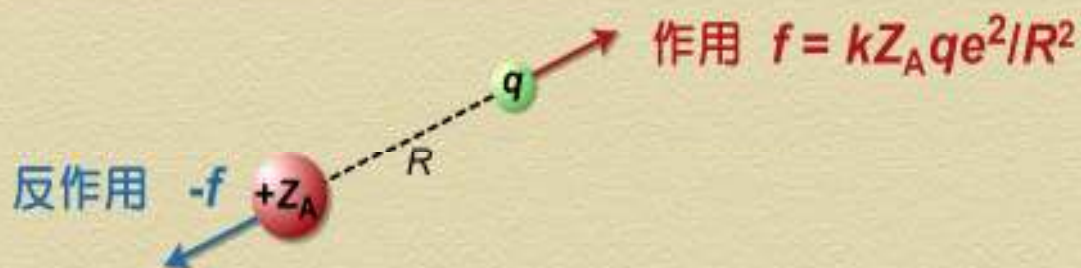
$$F = Q_A Q_B / (4\pi\epsilon_0 r_{AB}^2)$$



## 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

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

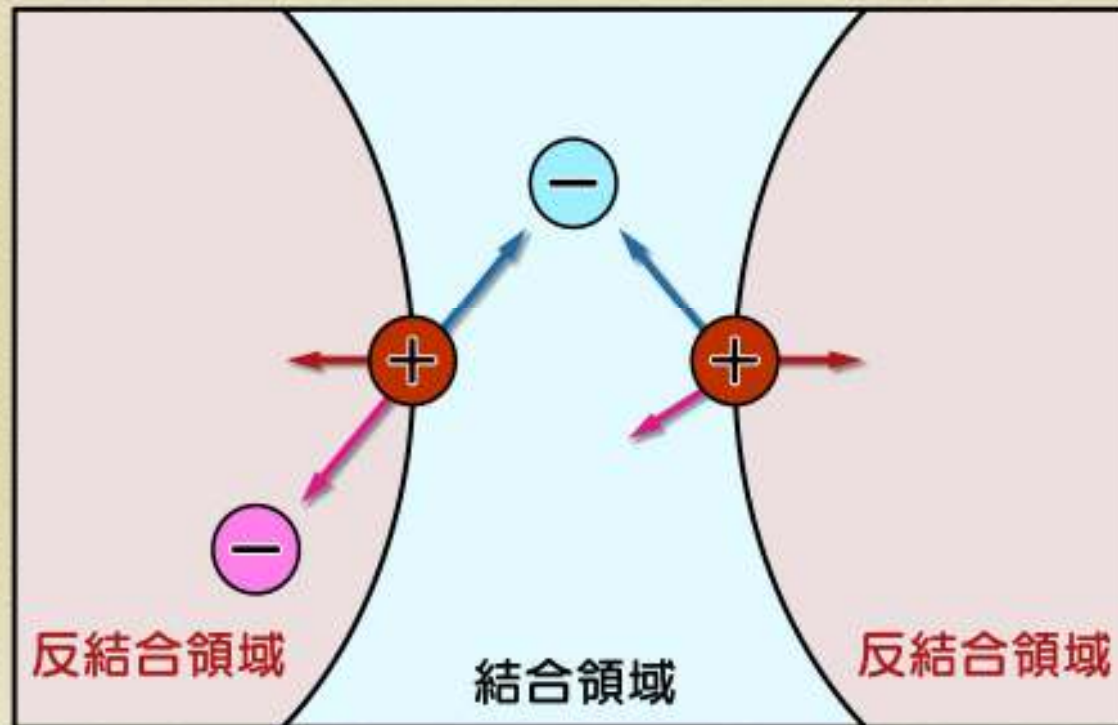


$F_A =$ (他の原子核からの反作用の合力) + (電子密度  $\rho(r)$ からの反作用の合力)

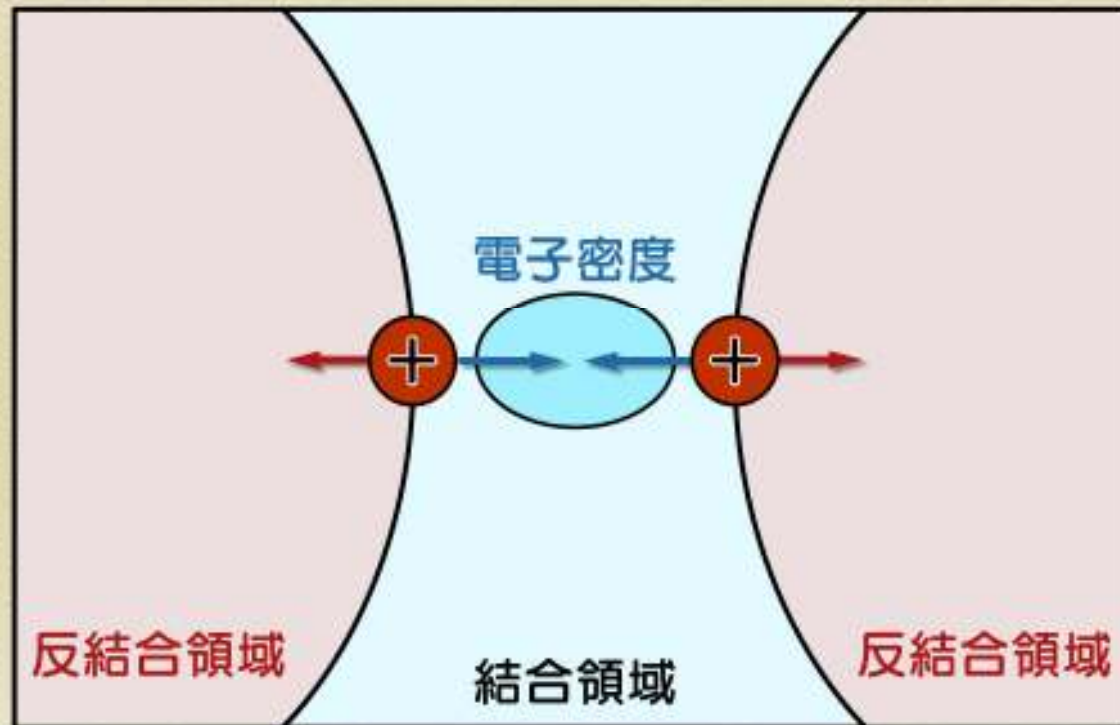
$$\int \rho(r) dr = N \quad (\text{全電子数})$$



## 結合力と反結合力



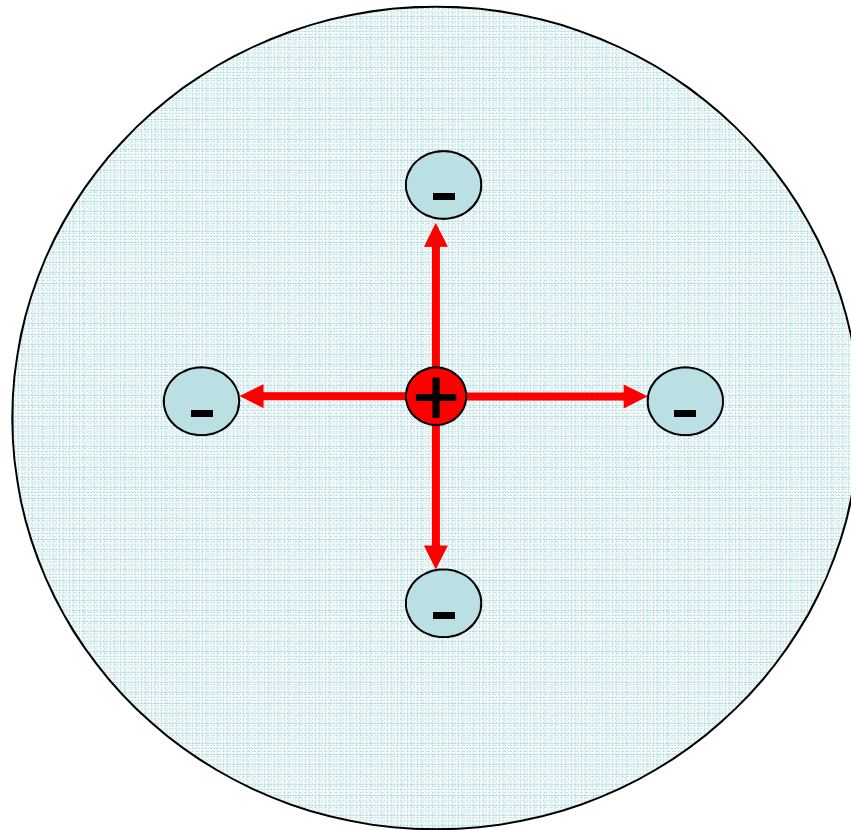
## 電子密度と結合力



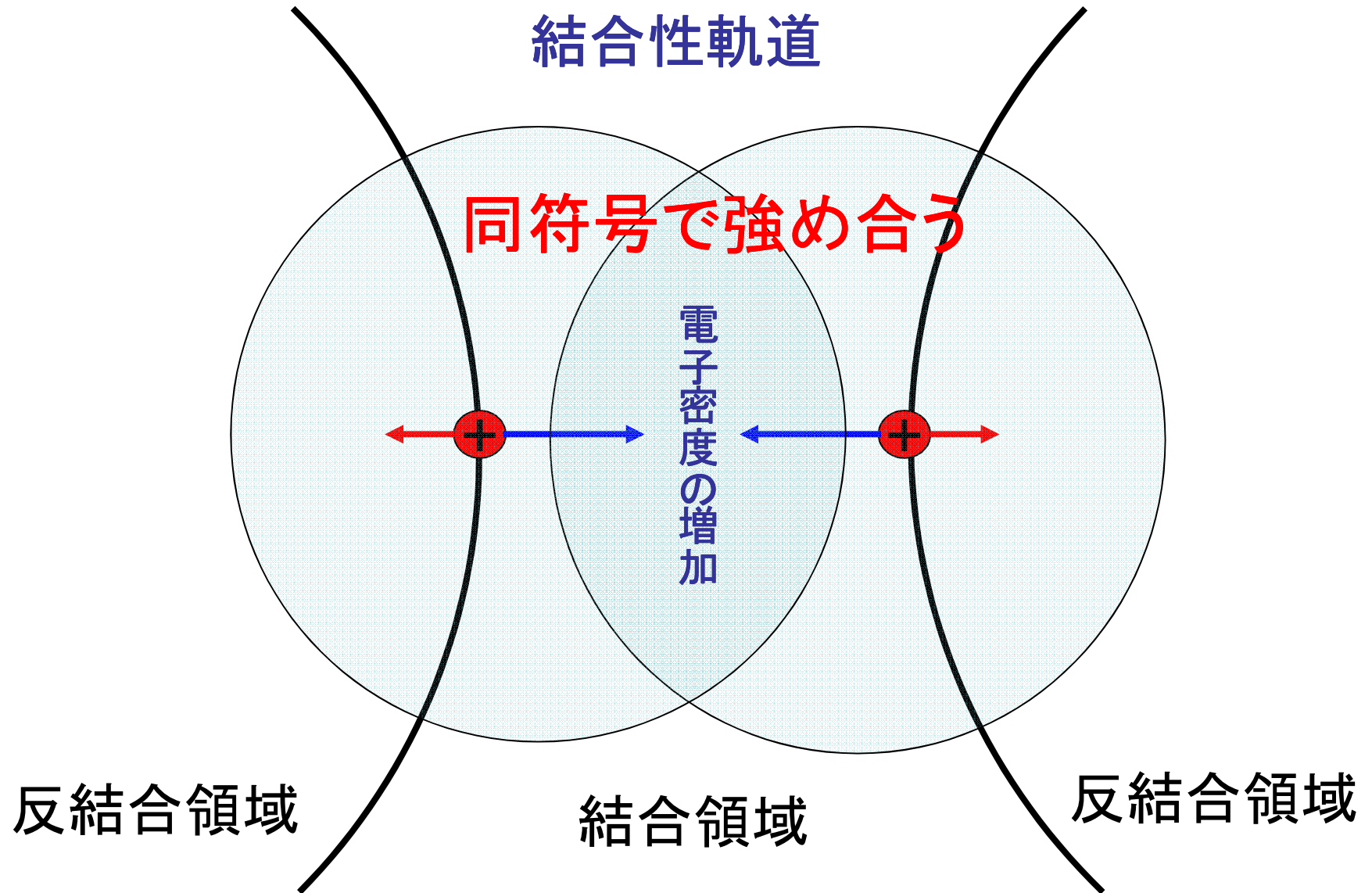
# 電子の波動性（量子力学）

- 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。

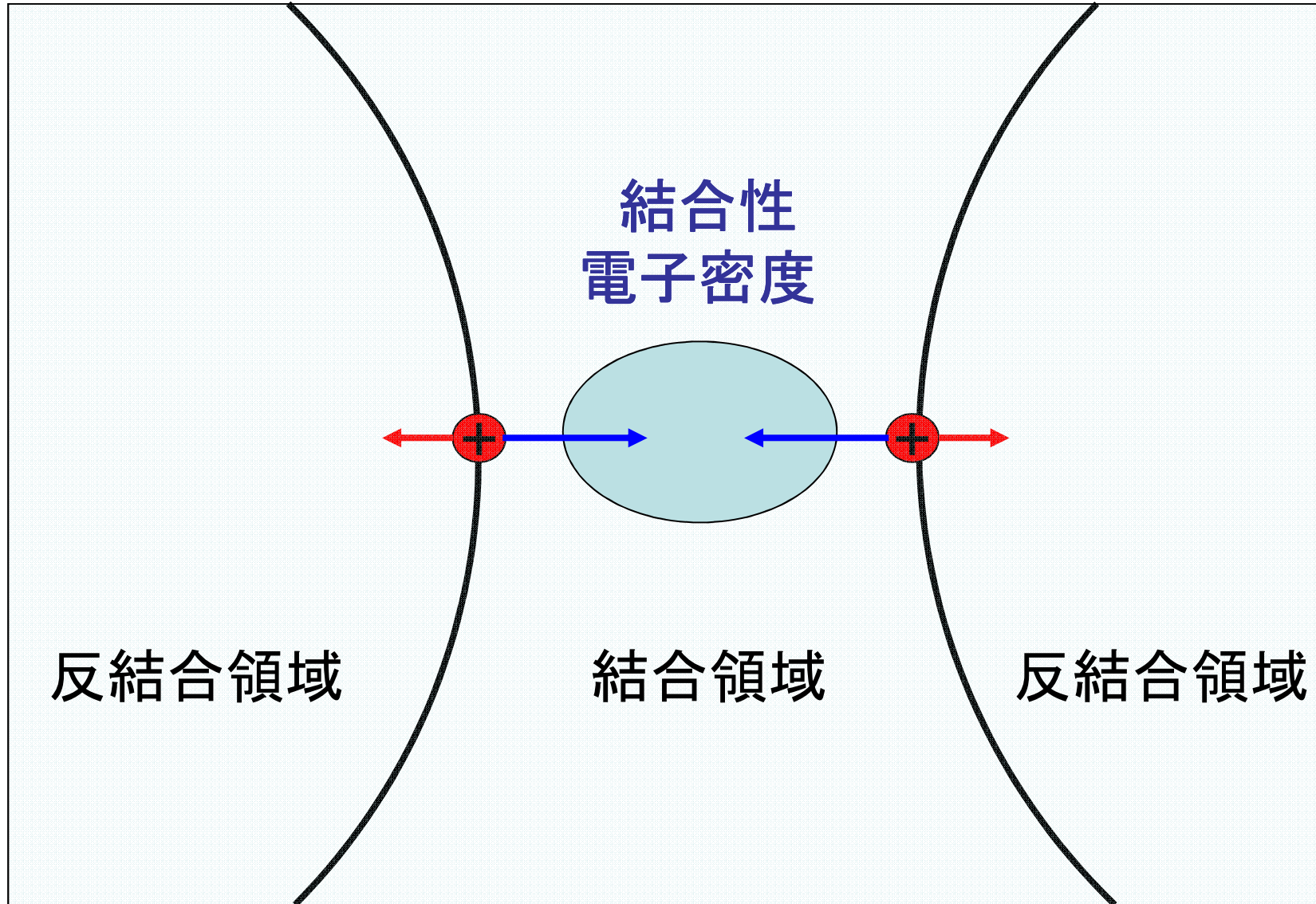
原子中の電子波は、  
中心対称をもつため、  
原子核を引っ張る力が、  
完全にキャンセルする。



# 結合性の電子波の発生



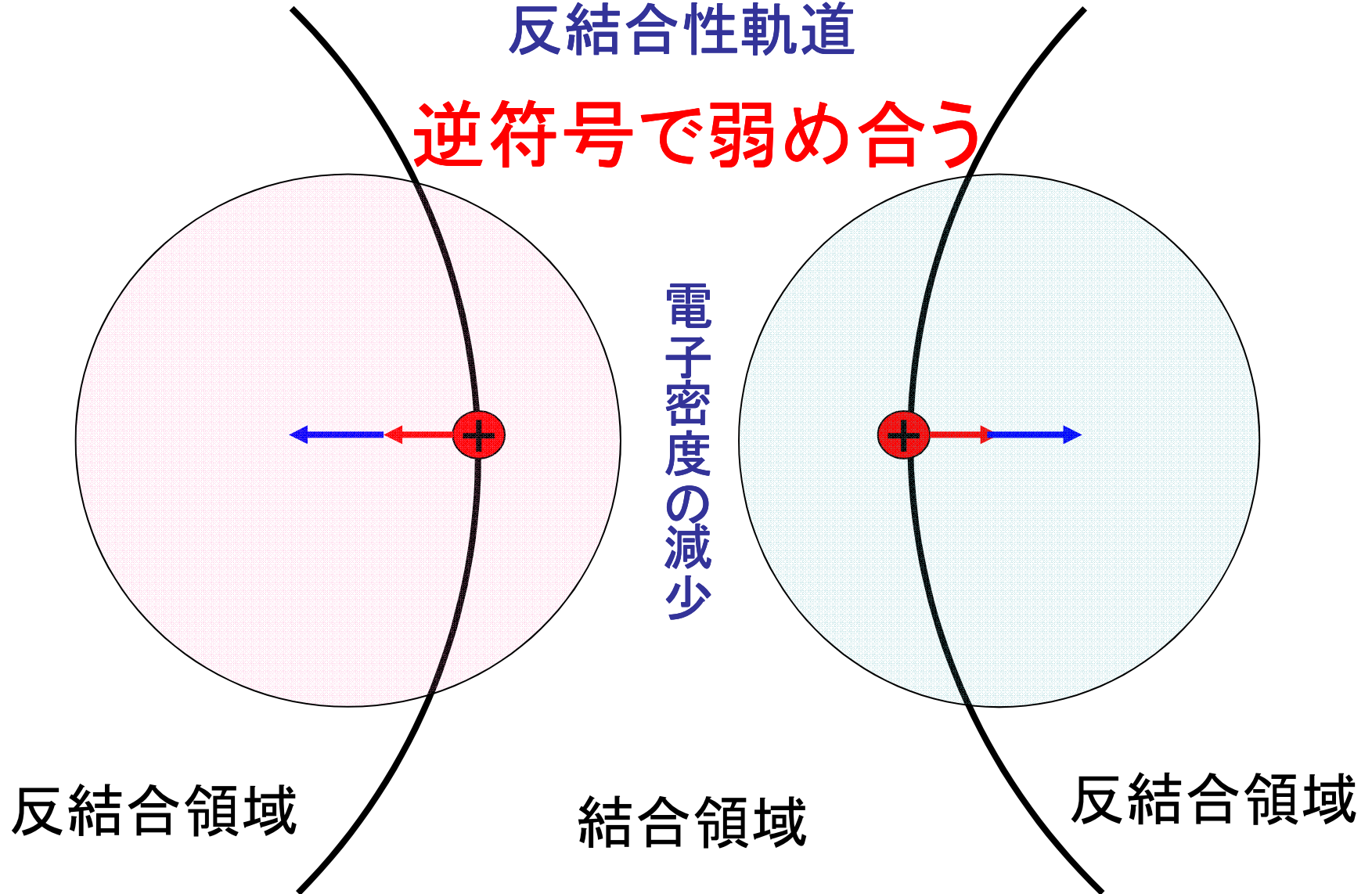
# 電子密度と結合力



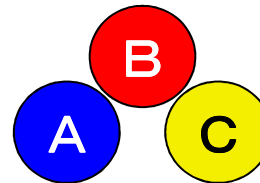
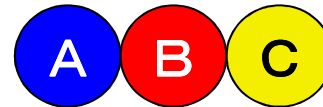
# 反結合性の電子波の発生

反結合性軌道

逆符号で弱め合う



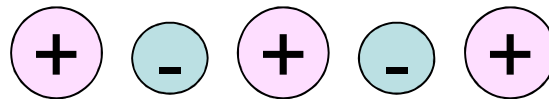
分子の形は  
どのような仕組みで  
決まるのか？



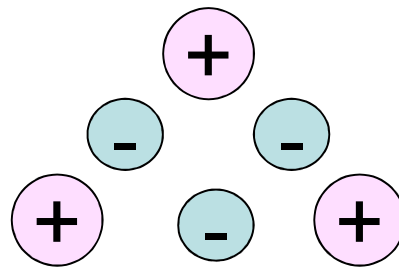


# 電子密度で形が決まる

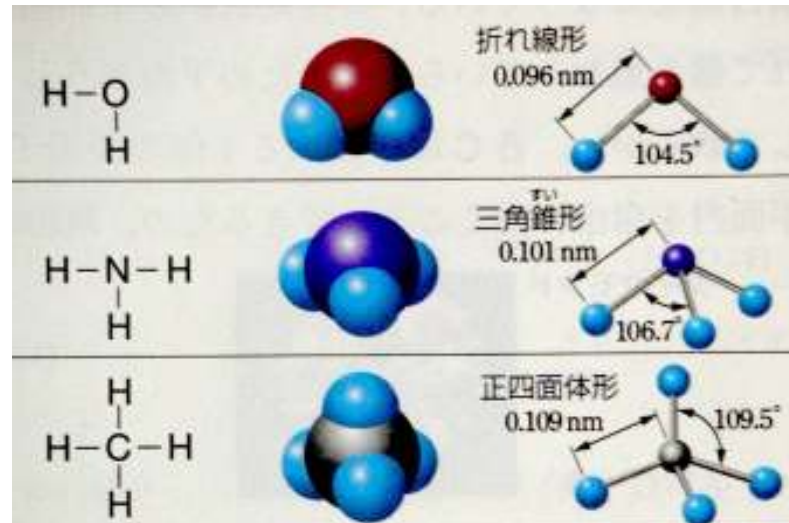
- 直線分子  $\text{O}=\text{C}=\text{O}$     $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$     $\text{H}-\text{Cl}$



- 三角型分子  $\text{H}_2\text{O}$     $\text{H}_2\text{S}$     $\text{SO}_2$



# 分子の形は 理論的に 予測できるか？



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

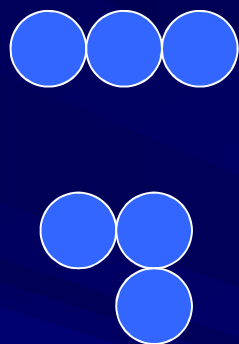
Bell / Evans / Polanyi

Woodward / Hoffmann /

Fukui

Pople / Kohn

# コンピュータ化学

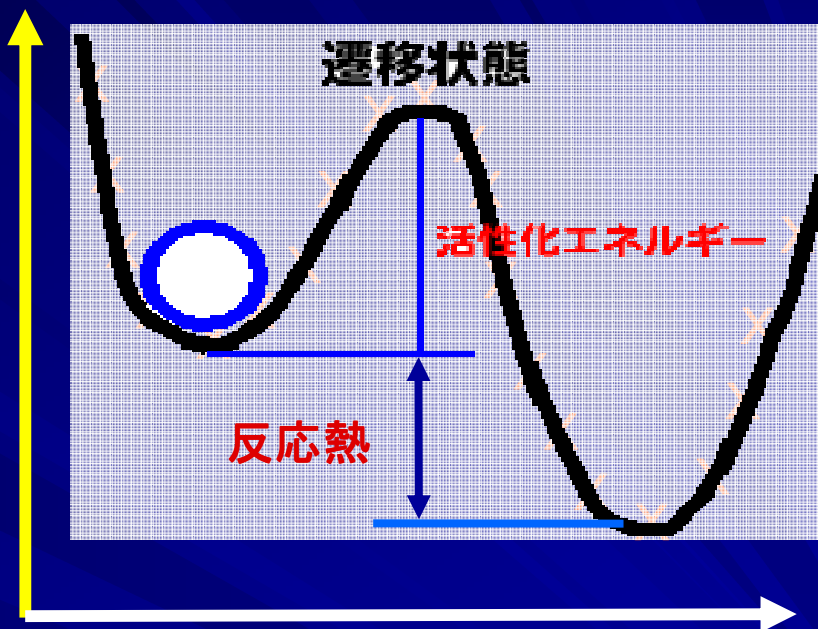


構造



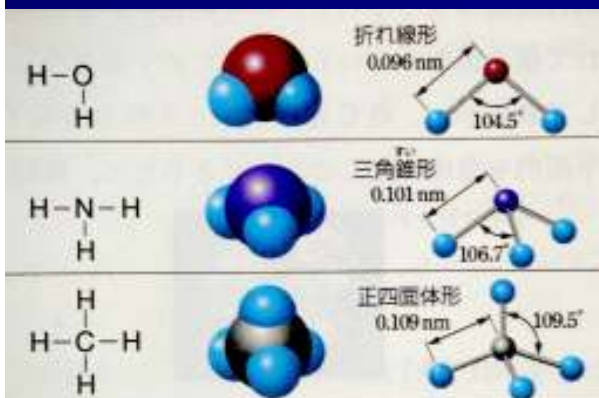
エネルギー

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