量子論と波動関数

量子化学1 第 1 回 ｜ 教科書 第 1 章

花火の色は、なぜ元素ごとに決まっているのか

科目ガイダンス（1）：この授業で学ぶこと

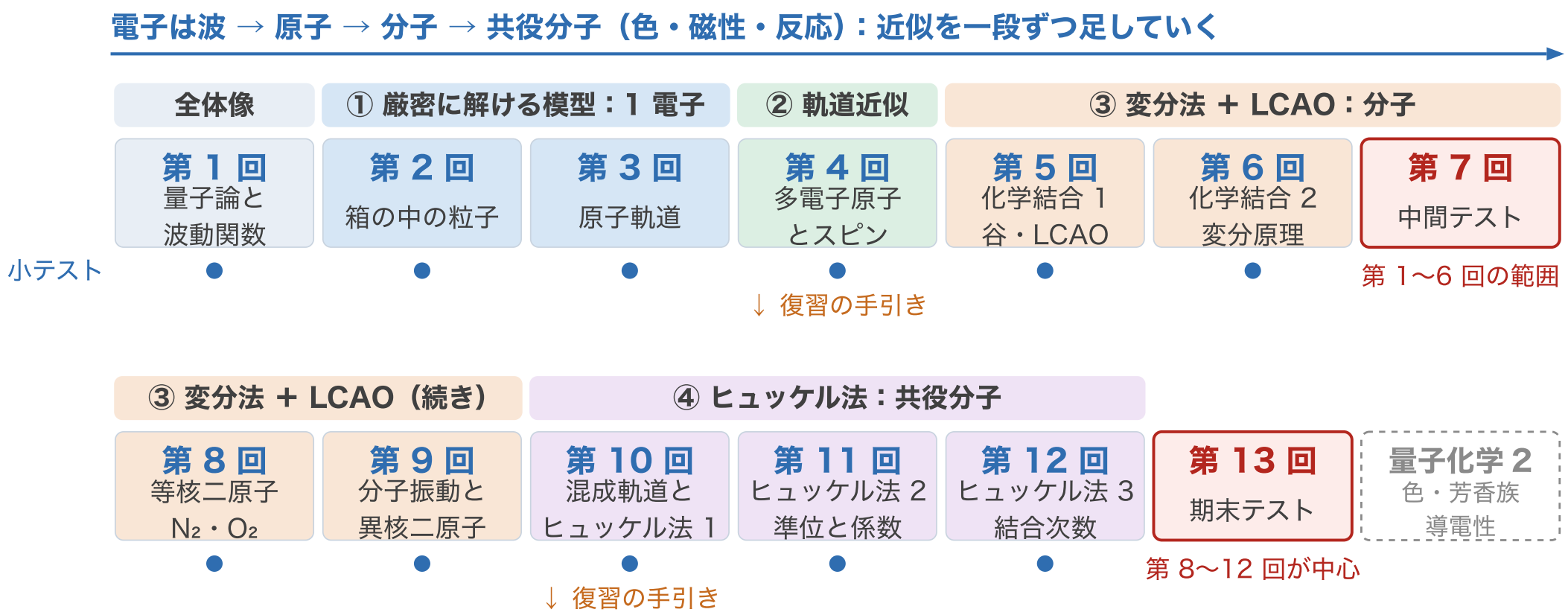
目的　化学で覚えた規則の「なぜ」を、電子を波として扱って説明できるようになる

高校で覚えたこと	なぜそうなるのか	扱う回
炎色反応の色は元素で決まる	なぜ決まった色の光だけが出るのか	第 1〜3 回
電子殻の定員は 2・8・18	なぜこの数なのか	第 3〜4 回
酸素分子の構造式は O=O	なぜ液体酸素は磁石につくのか	第 8 回
ベンゼンは付加より置換を起こしやすい	なぜ二重結合が 3 本でも安定なのか	量子化学2 第 02 回
ニンジンは橙色、トマトは赤色	なぜ分子によって色が違うのか	量子化学2 第 04 回

磁石に留まる液体酸素（第 8 回）・ニンジンの橙色（量子化学2 第 04 回）

写真: Bob Burk, "Liquid oxygen in a magnet 2", CC BY 3.0。congerdesign, "Fresh orange carrots", CC0（いずれも Wikimedia Commons）

科目ガイダンス（2）：13 回の進み方

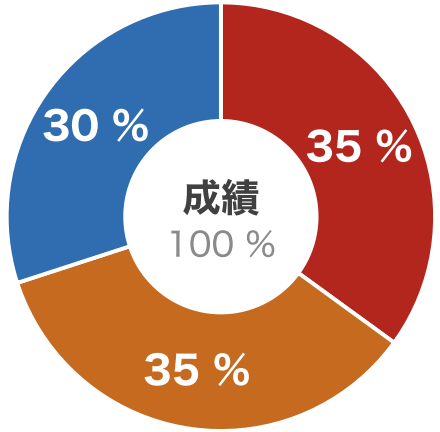


- どの回も、今どの段（①〜④、教科書 §1.4 の近似の地図）にいるかを冒頭で示す。毎回「謎 → 説明 → 演習」を 2〜3 回

科目ガイダンス（3）：到達目標と成績評価

到達目標	学ぶ回	中間	期末
❶ シュレディンガー方程式の記号の意味を言える	第 1・2 回	●	○
❷ 電子の広がりを、波動関数と確率密度で表せる	第 1〜3 回	●	○
❸ 原子軌道（s・p・d）の形と意味を説明できる	第 3 回	●	○
❹ 電子配置と周期律の理由を説明できる	第 4 回	●	○
❺ 結合の成り立ちを、軌道の重なりで説明できる	第 5・6・8〜10 回	●	●
❻ 共役分子の準位を、手計算で求められる	第 11・12 回	○	●

成績評価



- **中間テスト**　第 7 回・概念理解
- **期末テスト**　第 13 回・数理スキル
- **小テスト**　manaba・毎回

- テストはマークシート四択・60 分・部分点なし。関数電卓可（通信機能付きは不可）、教科書・ノート不可。定数・式は問題に記載
- **試験は、授業で扱った内容を中心に出題する**

科目ガイダンス（4）：毎回の進め方と小テスト

成績の 30 %（全 11 回を均等に）

授業
説明 → 演習 を 2〜3 回
演習は一人で解く
（紙・鉛筆・関数電卓）

→

小テスト（manaba）
授業後 17:30 〜 翌週 16:00
教科書可・相談可
何度でも受験、**最高点**を採用

→

復習用ドリル
締切の後に開く（成績外）
問ごとの正誤と解説
各問の教科書の節を読み直す

→

質問・コメント
manaba のアンケート
（任意・成績外）
次回の冒頭で答える

次の回へ（毎週くり返す）

復習の手引き（PDF）を第 4・10 回に manaba で配布 →「思い出す → 例題 → 自力問題」で、**中間（第 7 回）・期末（第 13 回）**に備える

- 小テストは受けるたびに 8 問が入れ替わる。締切は翌週の授業の 16:00
- **数学** 三角関数・微分・複素数・行列の初歩。必要な回の予習で、付録 A の項目を指定する

謎 1 花火の色は、なぜ元素ごとに決まっているのか

金属塩のメタノール溶液の炎。左から Li・Sr・Ca・Na・Ba・B（ホウ酸トリメチル）・Cu・Cs・K

写真: Hegelrast, "Coloured flames of methanol solutions of metal salts and compounds", Wikimedia Commons, CC BY-SA 4.0

原子の中で何が決まっているから、色が決まるのか

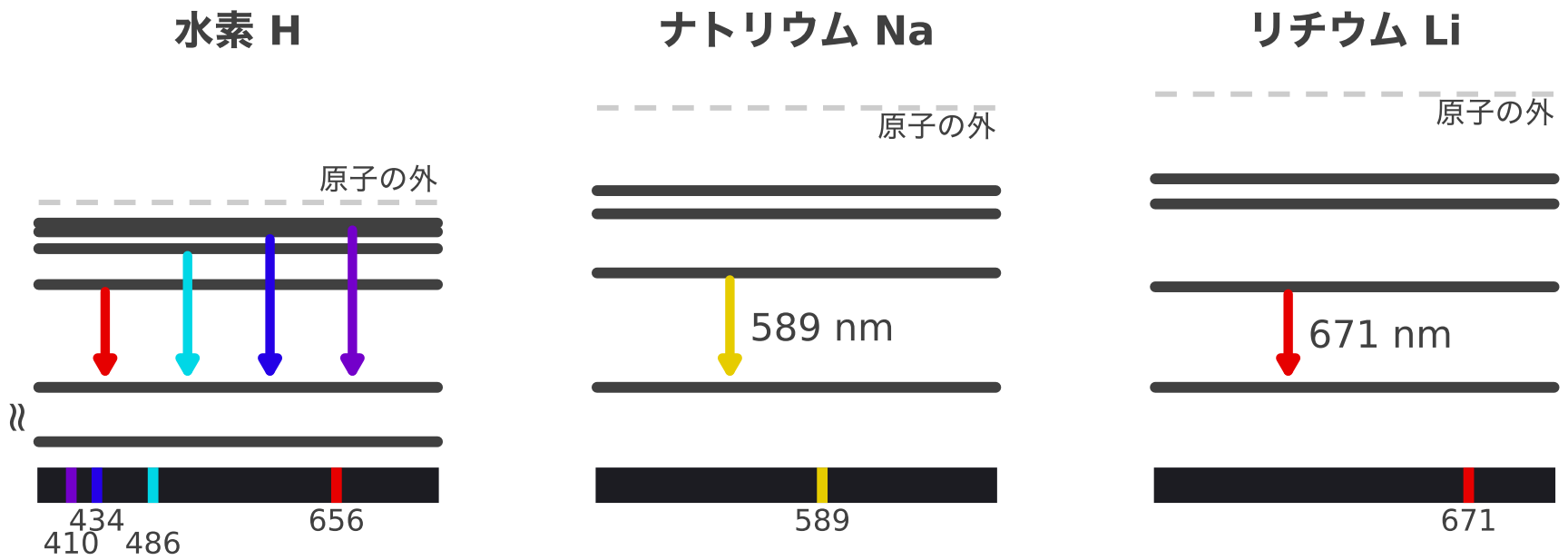
今日の流れ

教科書 §1.1〜1.3 前半

1. **謎 1** 花火の色は、なぜ元素ごとに決まっているのか
   線スペクトル、準位、光子 → 演習 A：ナトリウムの黄色の光
2. 電子は波である（謎 2 の前提）
   物質波、電子の波長
3. **謎 2** 電子が波なら、その波は何を表すのか
   波動関数と、見つかる確率 → 演習 B：電子を二重スリットに通す（波長と $|\psi|^2$）

花火の光を分けると、なぜ線になるのか

教科書 §1.1



電子のエネルギーは、とびとびの値（**準位**）だけ

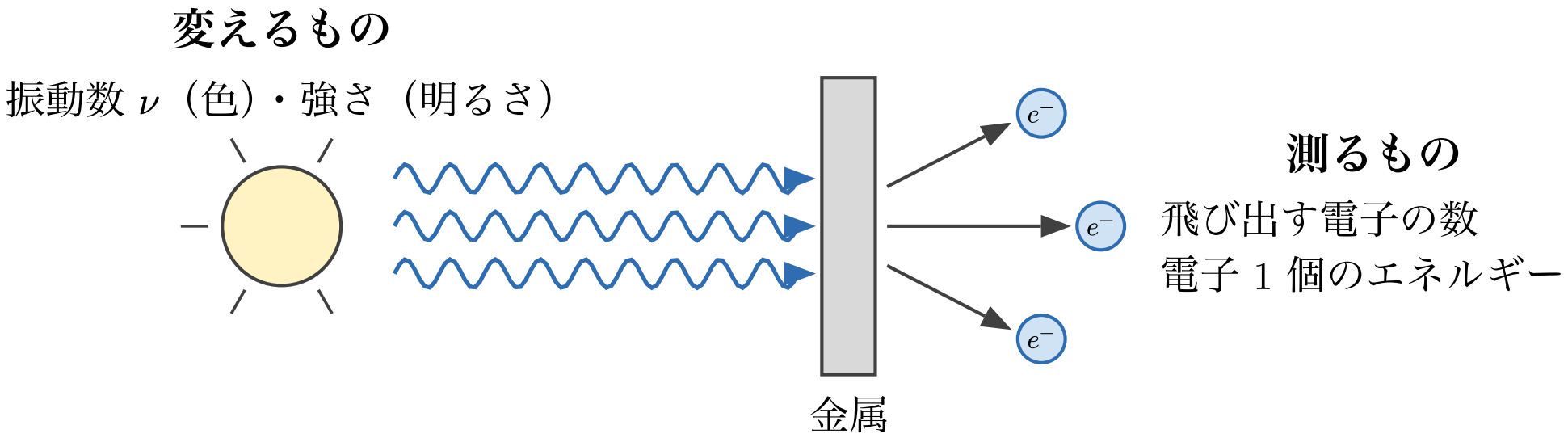
読み方 ①　光の色 → 電子 1 個が出し入れする $h\nu$（落ちるときは準位の差 $\Delta E = h\nu$）

h プランク定数　ν（ニュー）振動数

発展 1：花火の光を分けてみる →

光電効果：光が波なら、どうなるはずか

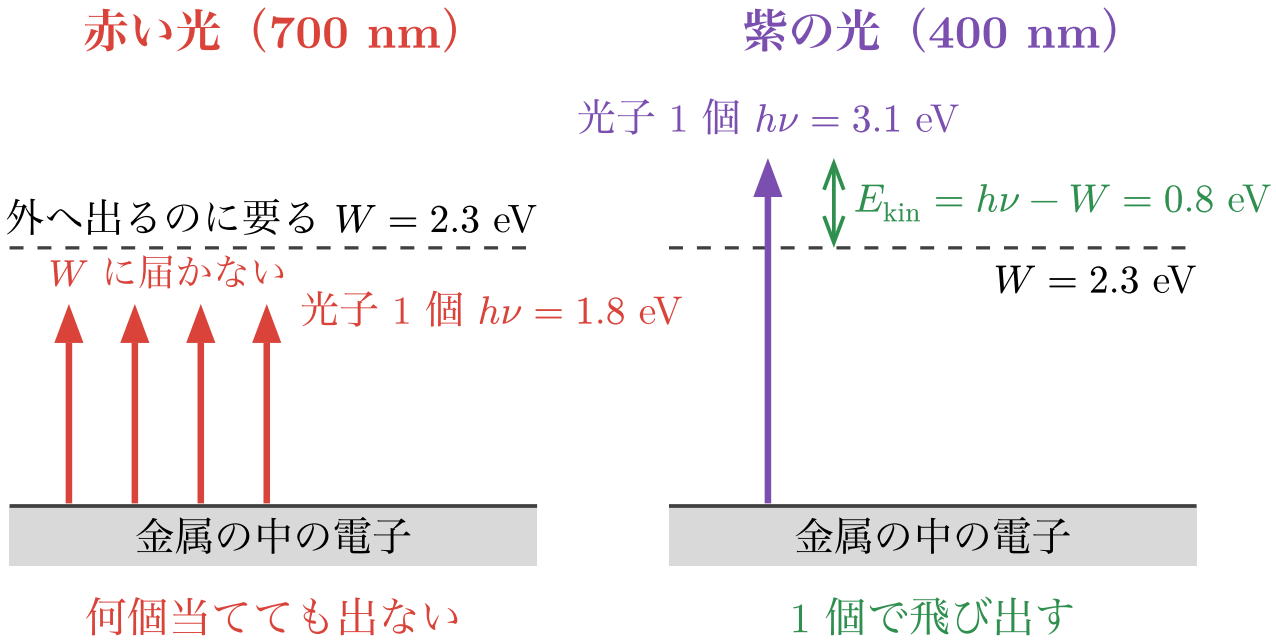
教科書 §1.1



光が波なら、エネルギーは明るさ（振幅）で決まり、少しずつ届く

光を強くしたら、色を変えたら、飛び出す電子はどうなるはずか

答え：光のエネルギーは $h\nu$ の「かたまり」（光子）で届く　教科書 §1.1



光子 1 個のエネルギー $h\nu$ が W を超えたときだけ、電子が出る。光の強さは光子の**数**

W 電子を金属から引き出すのに要る最小のエネルギー　eV（電子ボルト）1.60×10^{-19} J

発展 2：光電効果をグラフで確かめる：波の予想と実験 →

例題：光子のエネルギーを、化学で使う単位に直す

問題　緑の光（波長 500 nm）の光子 1 個のエネルギーを eV で、1 mol あたりを kJ/mol で求め、化学結合のエネルギーと比べてください

解き方

① 使う式　$E = h\nu = hc/\lambda$　$(c = \lambda\nu)$

eV と nm で：$E\,[\mathrm{eV}] \approx 1240/\lambda\,[\mathrm{nm}]$

c 光の速さ　λ 波長　1240 は hc を eV と nm で表した数

② 代入　$1240/500$（λ は nm の数のまま入れる）

$\approx 2.5\ \mathrm{eV}$（光子 1 個）

③ 1 mol あたり　$1\ \mathrm{eV} \approx 96.5\ \mathrm{kJ/mol}$

$2.5 \times 96.5 \approx 240\ \mathrm{kJ/mol}$

④ 比べる　Cl–Cl 結合は約 240 kJ/mol

答え　2.5 eV、240 kJ/mol。Cl–Cl 結合 1 本を切れるほどの大きさ

発展 3：光子 1 個のエネルギーを、化学結合と比べる →

演習 A：ナトリウムの黄色の光

目安 6 分

ナトリウムの炎の黄色の光（589 nm）について、1 から順に答えてください

問 1 光子 1 個のエネルギーを eV と kJ/mol で求めてください。計算の前に：例題の 500 nm は 2.5 eV。589 nm は大きいか小さいか

問 2 この光を $W = 2.3$ eV の金属に当てると、電子は出ますか。出ないなら、(a) 100 倍強くする、(b) 450 nm の青い光（光子 1 個 2.76 eV）に替える、のどちらで出ますか 。理由を「光子」の語で

使う読み方　① 光の色 → 電子 1 個が出し入れする $h\nu$

演習 A の答え（1）

問 1　589 nm（Na の黄色）の光子のエネルギー

① 使う式　$E\,[\mathrm{eV}] \approx 1240/\lambda\,[\mathrm{nm}]$（例題と同じ）

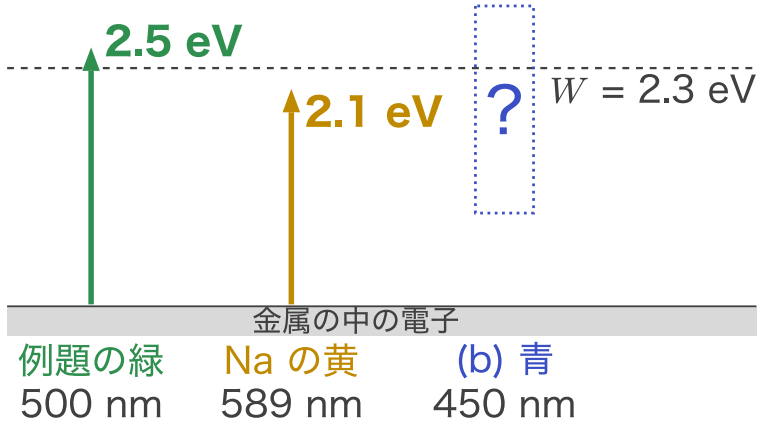
② 見当　500 nm より長い → 2.5 eV より小さい

③ 代入　$1240/589 \approx 2.1$ eV

1 mol あたり：$2.1 \times 96.5 \approx 200$ kJ/mol

答え　2.1 eV、200 kJ/mol

④ 意味　見当どおり。$W = 2.3$ eV にも届かない



演習 A の答え（2）

問 2　W = 2.3 eV の金属で、電子は出るか。(a) 100 倍強く、(b) 450 nm の、どちらで出るか

① 比べる　光子 1 個 2.1 eV < W → 出ない

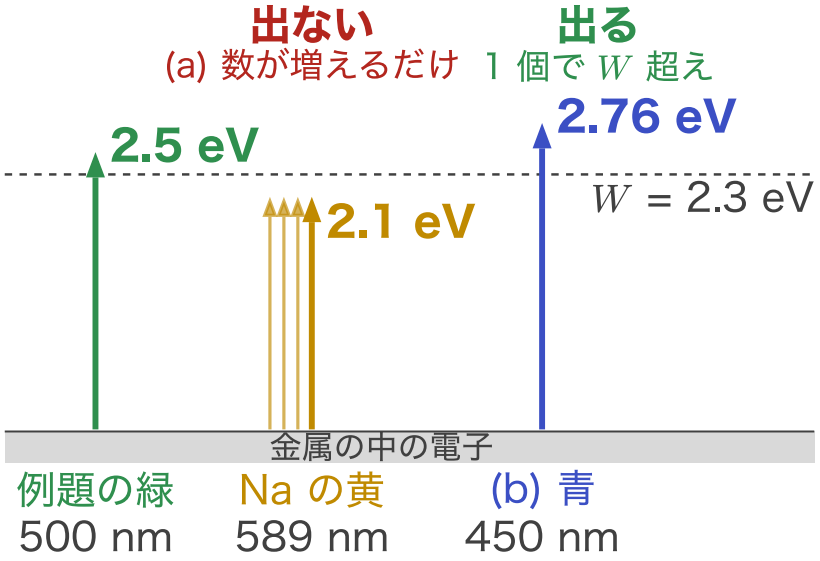
② (a) 強く　増えるのは光子の数。1 個は 2.1 eV

電子は光子を 1 個ずつ受け取る

③ (b) 青　2.76 eV（与えた値）> W

答え　出ない。出るのは (b)。1 個が W を超える

④ 意味　強さは光子の数、色は 1 個のエネルギー



要点：光はエネルギー $h\nu$ の粒（光子）。光の強さは光子の数

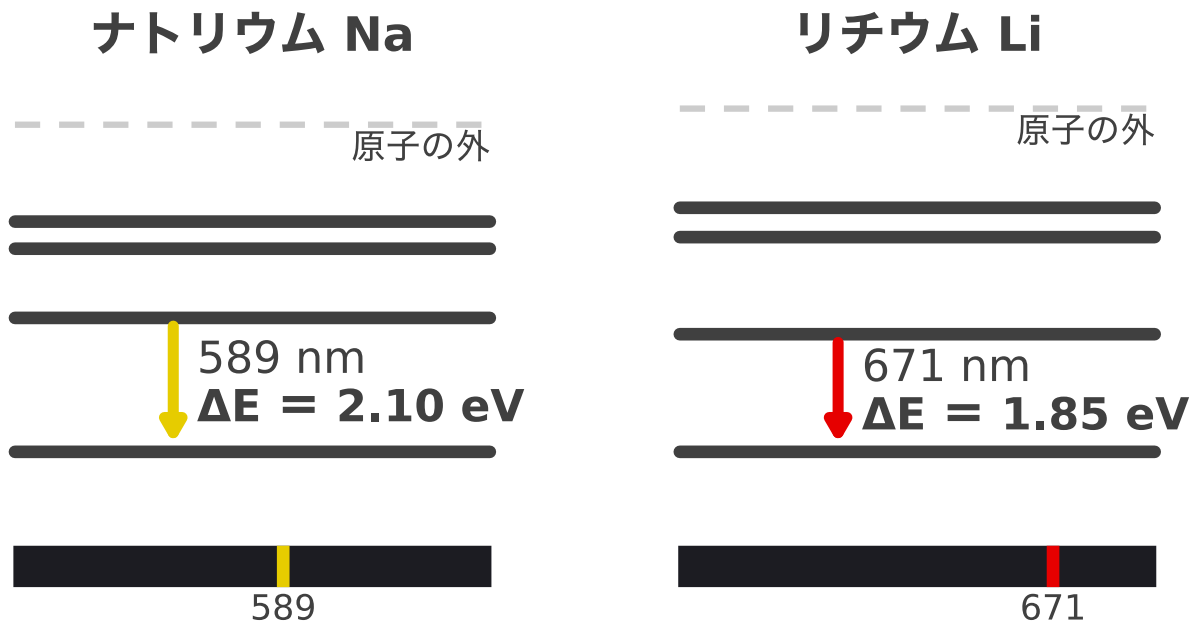
謎 1 の答え　元素ごとに決まった準位の差が、光の色を決める

謎 1：花火の色は、なぜ元素ごとに決まっているのか

演習 A 問 1 の 2.1 eV から　Na の黄色の光を出すときの準位の差

考え方　準位の差 ΔE ＝ 光子 1 個のエネルギー（問 1 の 2.1 eV）

答え　2.1 eV。Na の準位の差は 2.1 eV に決まっていて、出る光は 589 nm の黄色



準位の差が元素ごとに違う → 光子 1 個のエネルギー、つまり色が違う

電子の波長は、何で決まるのか

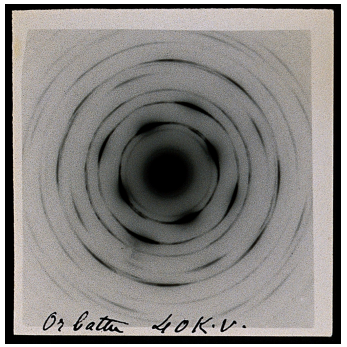
教科書 §1.2

$$\lambda = \frac{h}{p}, \qquad p = mv$$

λ **ド・ブロイ波長**　p 運動量（質量 × 速さ）　m 質量　v 速さ

$\lambda = h/p$

p が大きいほど波長は短い



証拠：金箔に電子線を当てた回折の縞

写真: J.-J. Trillat, "Diffraction of electrons on microcrystallitic crystals or powders; beaten gold", Wellcome Collection, CC BY 4.0（Wikimedia Commons）

読み方 ②　$\lambda = h/p$ が原子ほど → 電子は波（原子の中では波として扱う）

発展 5：λ = h/p は、どこから来たのか →

例題：電子のド・ブロイ波長

問題　電圧 $V = 100\ \mathrm{V}$ で加速した電子のド・ブロイ波長を求めてください
（$m = 9.11 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$、$e = 1.60 \times 10^{-19}\ \mathrm{C}$、$h = 6.63 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$）

① エネルギー　$E = e \times V$ = 100 eV = $1.60 \times 10^{-17}\ \mathrm{J}$

② 運動量　$p^2/2m$（運動エネルギー）$= e \times V$

両辺に $2m$ を掛ける：$p^2 = 2m \times e \times V$

$$p^2 = 2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 1.60 \times 10^{-19} \times 100 \approx 2.9 \times 10^{-47}$$

平方根 → $p \approx 5.4 \times 10^{-24}\ \mathrm{kg{\cdot}m/s}$

③ 波長　$\lambda = h/p = 6.63 \times 10^{-34} / 5.4 \times 10^{-24}$

$\approx 1.2 \times 10^{-10}\ \mathrm{m}$

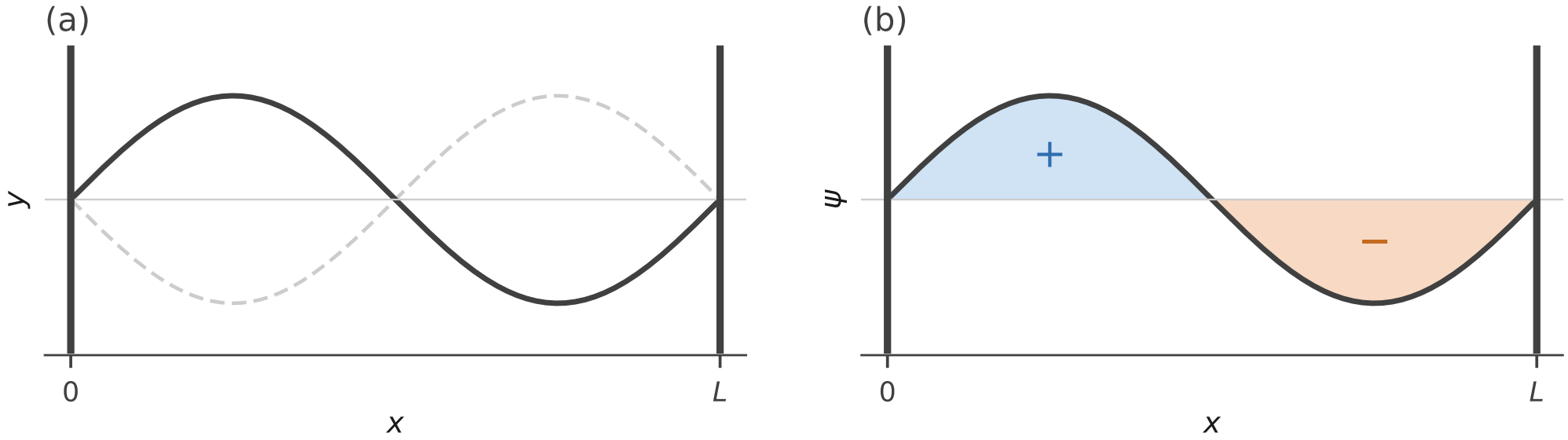
答え　0.12 nm。原子の大きさ（約 0.1 nm）と同じ → 原子の中の電子は波（読み方 ②）

- 時速 150 km の野球ボールなら $\lambda \approx 10^{-34}\ \mathrm{m}$。小さすぎて波は現れない

電子の波を、どう表すのか：波動関数 ψ

教科書 §1.3

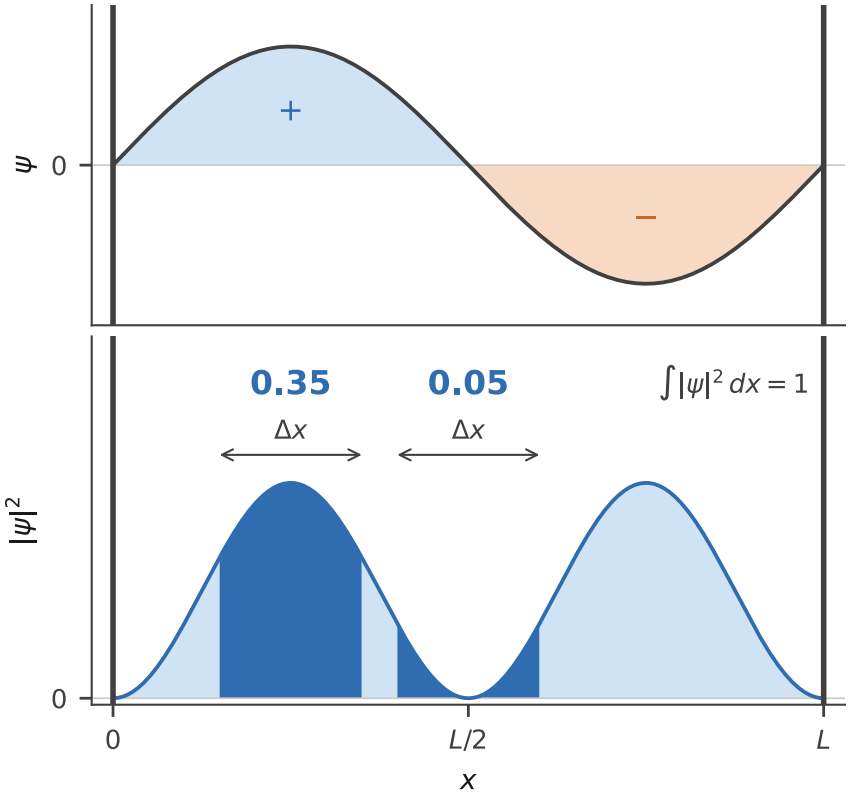
謎 2 電子が波なら、その波は何を表すのか



(a) 弦の揺れ $y(x)$　(b) 電子の波 $\psi(x)$（**波動関数**）。どちらも両端を固定した定在波

ψ は場所によって正（青）にも負（橙）にもなる。重なって強め合い・打ち消し合う量

$|\psi|^2$ は何を表すか：電子密度と確率密度



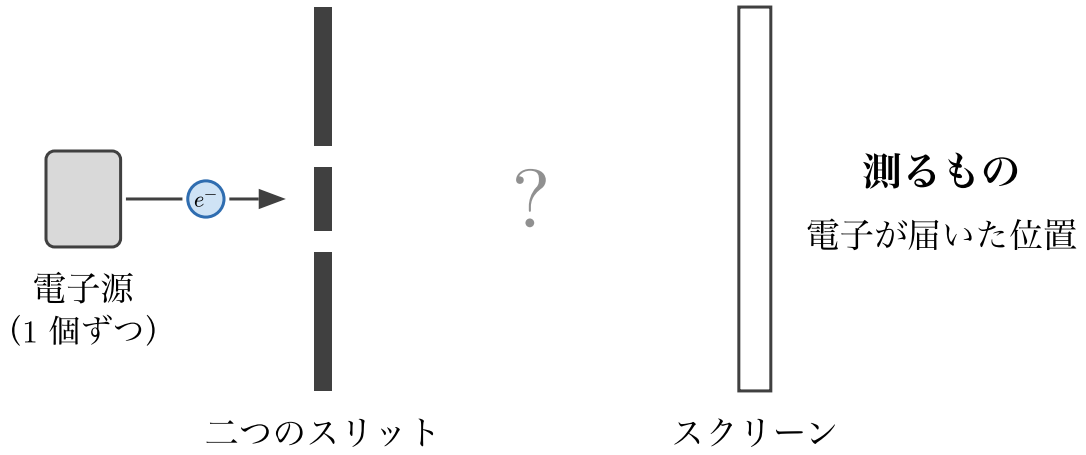
同じ幅 Δx の帯でも、面積は山で 0.35、節で 0.05

$|\psi|^2$（**電子密度** ＝ **確率密度**）の面積が、そこで見つかる確率。全体で 1（**規格化**）

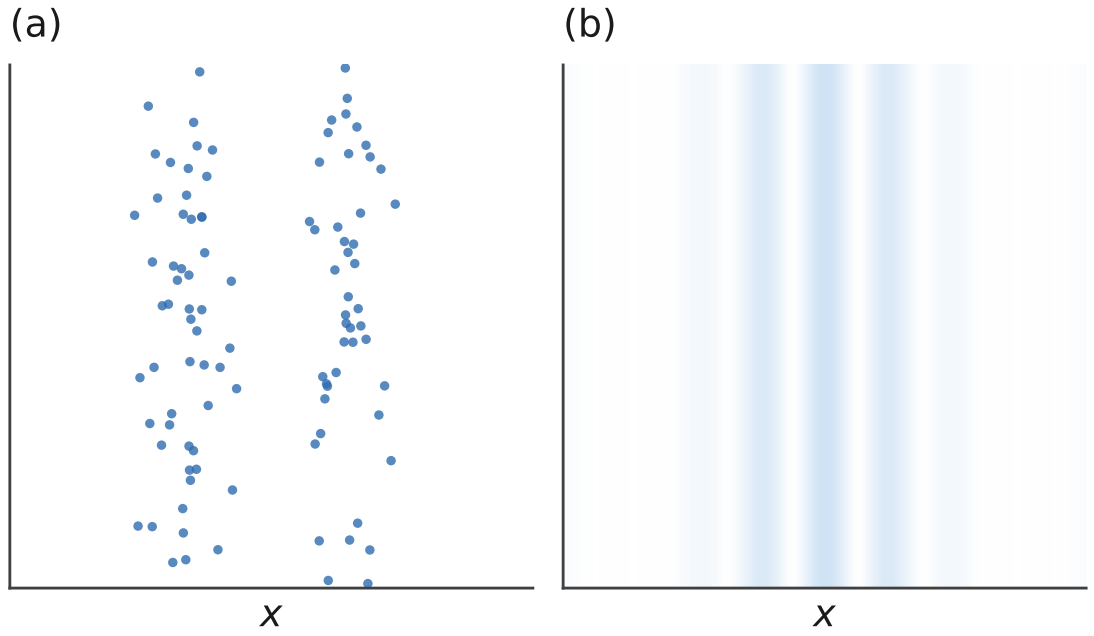
読み方 ③　$|\psi|^2$ の濃淡 → 電子の見つかりやすさ（ψ そのものは確率ではない）

二重スリット：粒なら、波なら、どう写るはずか

教科書 §1.3



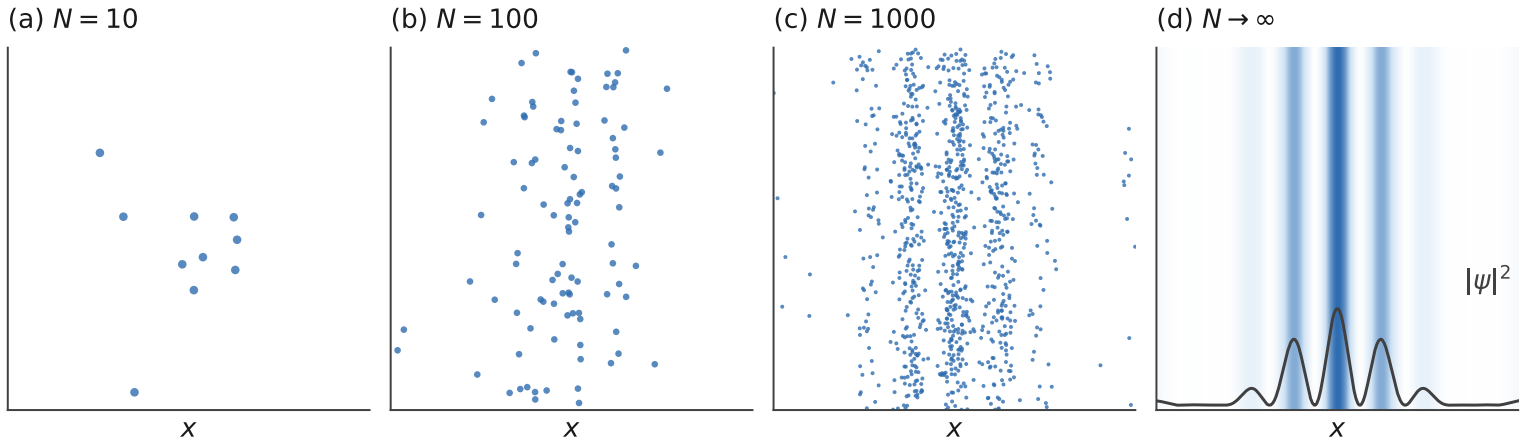
電子を 1 個ずつ打ち出し、届いた位置を記録する



100 個通したときの予想。(a) 粒なら 2 本の帯　(b) 波なら薄く広がる縞

実際には、どちらが写るか

結果：点として届き、縞に並ぶ



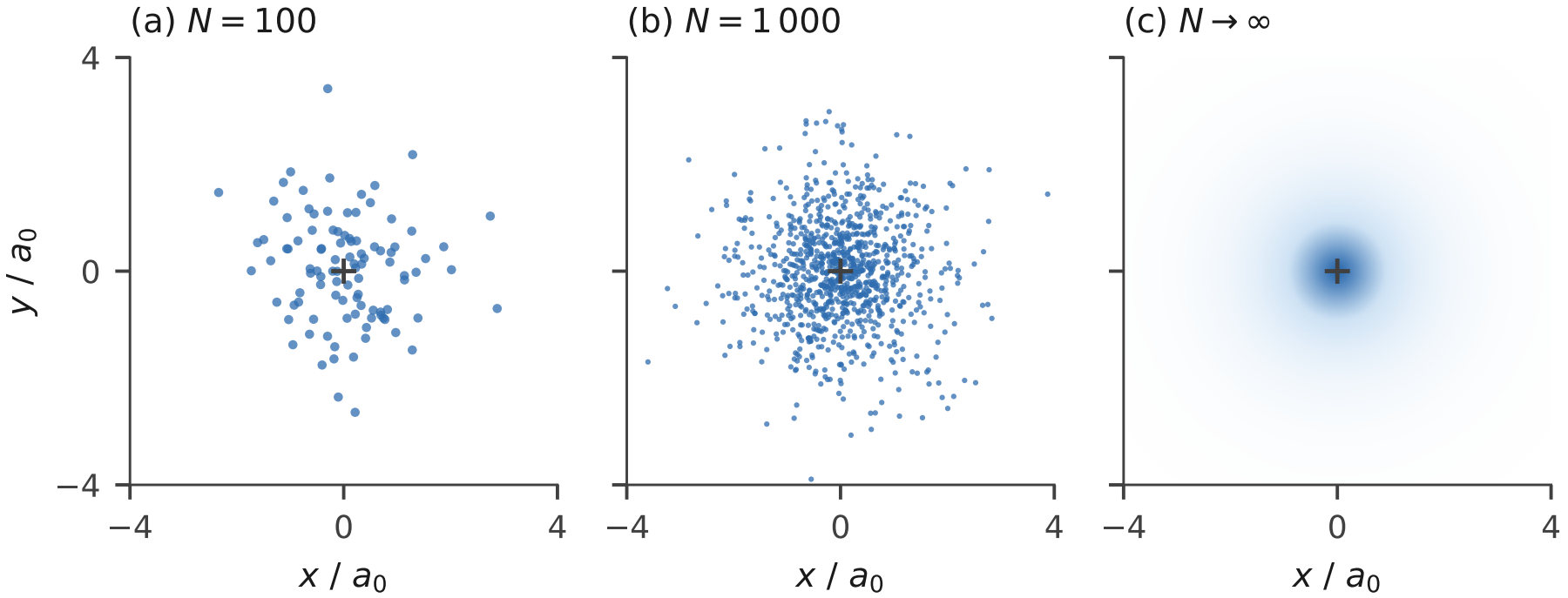
電子を 1 個ずつ二重スリットに通したときのスクリーン（模式）。点 1 つが電子 1 個。(d) は限りなく増やした極限と $|\psi|^2$

点として届き、**縞**に並ぶ。縞の明暗 ＝ $|\psi|^2$：見つかりやすさが波で決まる（**ボルンの規則**）

発展 4：なぜ $|\psi|^2$ が確率なのか →　　発展 6：電子は両方のスリットを通るのか →

謎 2 の答え　波の形が ψ、見つかる確率が $|\psi|^2$

謎 2：電子が波なら、その波は何を表すのか



水素原子の電子の位置を測った記録（模式）。(a) 100 回　(b) 1000 回　(c) 限りなく増やした極限

電子は雲にちぎれていない。1 回測ると 1 か所に**点**

何度も測った点の濃淡が電子雲 ＝ $|\psi|^2$

演習 B：電子を二重スリットに通す

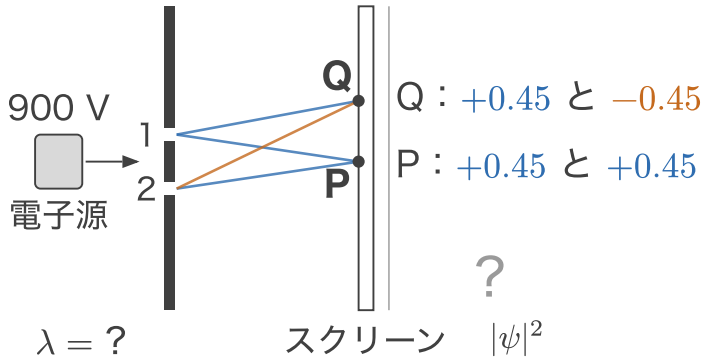
目安 6 分

900 V で加速した電子を、1 個ずつ二重スリットに通します（m・e・h は例題と同じ）。1 から順に答えてください

問 1 この電子のド・ブロイ波長を求めてください。電卓の前に：電圧は例題（100 V、0.12 nm）の 9 倍。波長は何倍になるはずですか

① __ eV　② p = __ kg·m/s　③ λ = __ nm

問 2 P に届く ψ は $+0.45$ と $+0.45$、Q は $+0.45$ と -0.45。P の $|\psi|^2$ はどちらの計算ですか 。P・Q の $|\psi|^2$ と、電子が届かない点は



使う読み方　② $\lambda = h/p$ が原子ほど → 電子は波

③ $|\psi|^2$ の濃淡 → 電子の見つかりやすさ

演習 B の答え（1）

問 1　900 V の電子のド・ブロイ波長（例題の何倍か）

① 見当　V が 9 倍で $p = \sqrt{2meV}$ は $\sqrt{9} = 3$ 倍 → $\lambda = h/p$ は 1/3

② 運動量　900 eV。$p^2 = 2meV$（例題と同じ式）

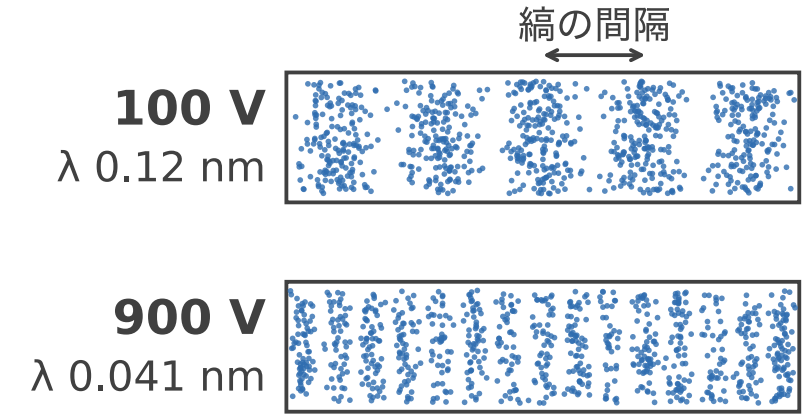
$$= 2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 1.60 \times 10^{-19} \times 900 \approx 2.6 \times 10^{-46}$$

平方根：$p \approx 1.62 \times 10^{-23}$ kg·m/s

③ 波長　$\lambda = h/p \approx 4.1 \times 10^{-11}$ m（見当どおり）

答え　900 eV、1.62×10^{-23}、0.041 nm（1/3 倍）

④ 意味　波長が 1/3 → 縞の間隔も 1/3（読み方 ②）



演習 B の答え（2）

問 2　点 P（$+0.45$ と $+0.45$）と点 Q（$+0.45$ と -0.45）の $|\psi|^2$

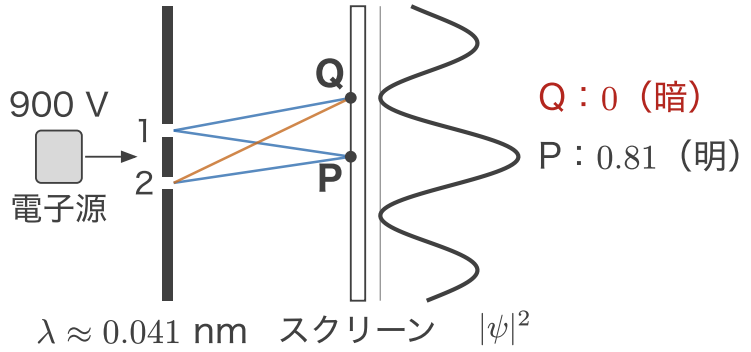
① 使う規則　二つのスリットの ψ を足してから二乗する
（二乗してから足すと Q も 0.41 になり、暗い縞が出ない）

② P　$(0.45+0.45)^2 = 0.90^2 = 0.81$

③ Q　$(0.45-0.45)^2 = 0^2 = 0$

答え　P は 0.81、Q は 0。届かないのは Q（暗い縞）

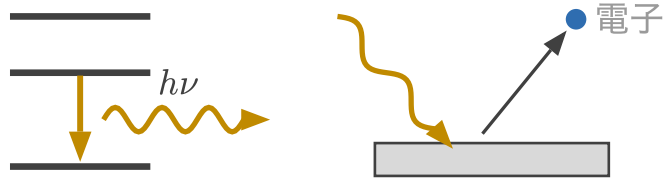
④ 意味　Q では二つの ψ が消し合い、電子は来ない（読み方 ③）



要点：電子の見つかりやすさは $|\psi|^2$。波が重なるときは ψ を足してから二乗する

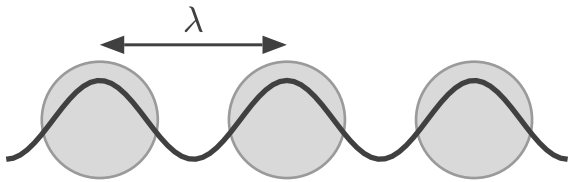
思い出す：今日の読み方 3 か条

読み方 ①



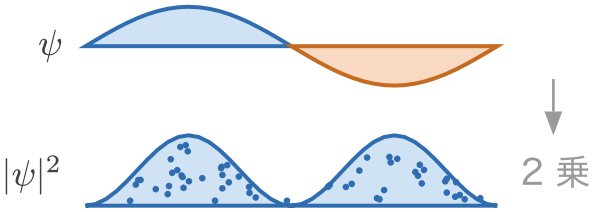
光の色 → 電子 1 個が出し入れする

読み方 ②



$\lambda = h/p$ が原子ほど → 電子は ＿＿

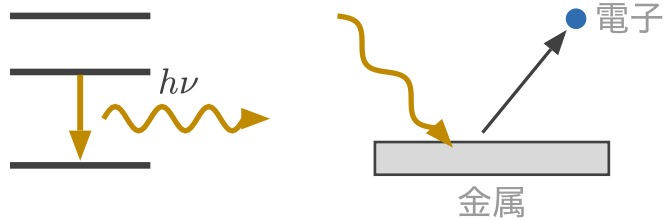
読み方 ③



$|\psi|^2$ の濃淡 → 電子の ＿＿＿＿＿＿

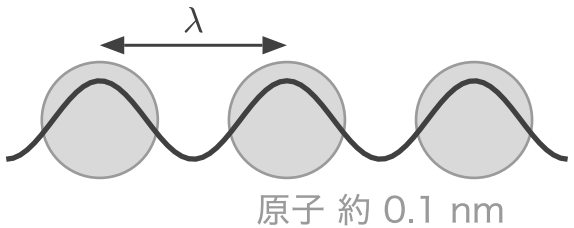
絵を手がかりに、空欄に入る言葉を何も見ずにノートに書く（1 分）

読み方 ①



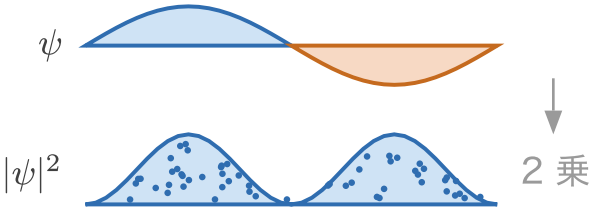
光の色 → 電子 1 個が出し入れする $h\nu$

読み方 ②



$\lambda = h/p$ が原子ほど → 電子は波

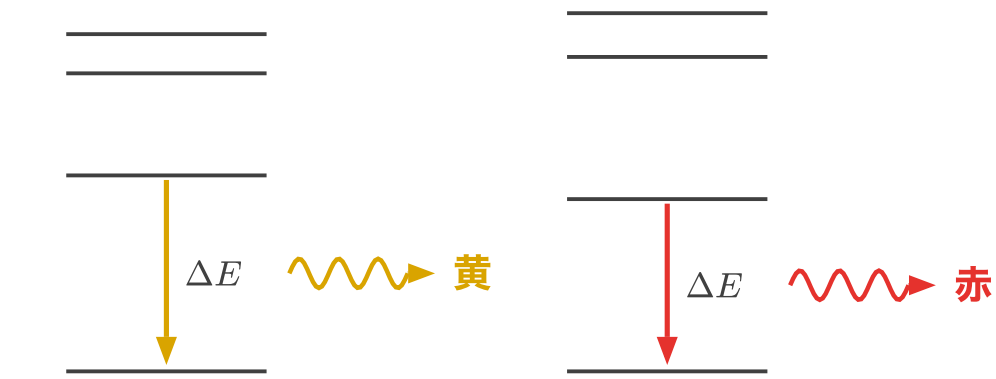
読み方 ③



$|\psi|^2$ の濃淡 → 電子の見つかりやすさ

まとめ：二つの謎への答え

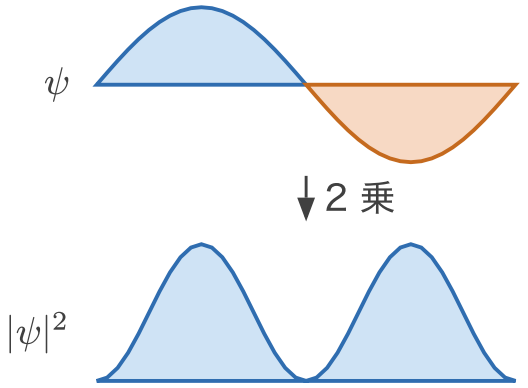
謎 1　花火の色は、なぜ元素ごとに決まっているのか



Na の準位（模式）　　Li の準位（模式）

色は、決まった準位の差 $\Delta E = h\nu$

謎 2　電子が波なら、その波は何を表すのか



波の形。正（青）にも
負（橙）にもなる

見つかりやすさ
符号は消える

$|\psi|^2$ が、電子の見つかりやすさ

光は粒として、電子は波としてふるまう

今日の復習

教科書 §1.1〜1.5

どこで	すること
動く図（線スペクトルと準位）	水素・ナトリウム・リチウムを切り替え、線の色から準位の差を読み方 ① で言う
動く図（二重スリット）	「1000 個」を押し、両方開ける・ふさぐで、点の濃淡を読み方 ③ で言う
§1.1〜1.2	光電効果のグラフ、黒体放射、電子顕微鏡
§1.4・§1.5	段階的な近似（13 回の地図）、R&D と計算化学
発展の箱	光子のエネルギーの目盛り、光で考える ψ の二乗、一個の電子は両方のスリットを通るのか。試験の範囲外

次回予告：第 2 回 閉じ込めと量子化：箱の中の粒子

教科書 第 2 章

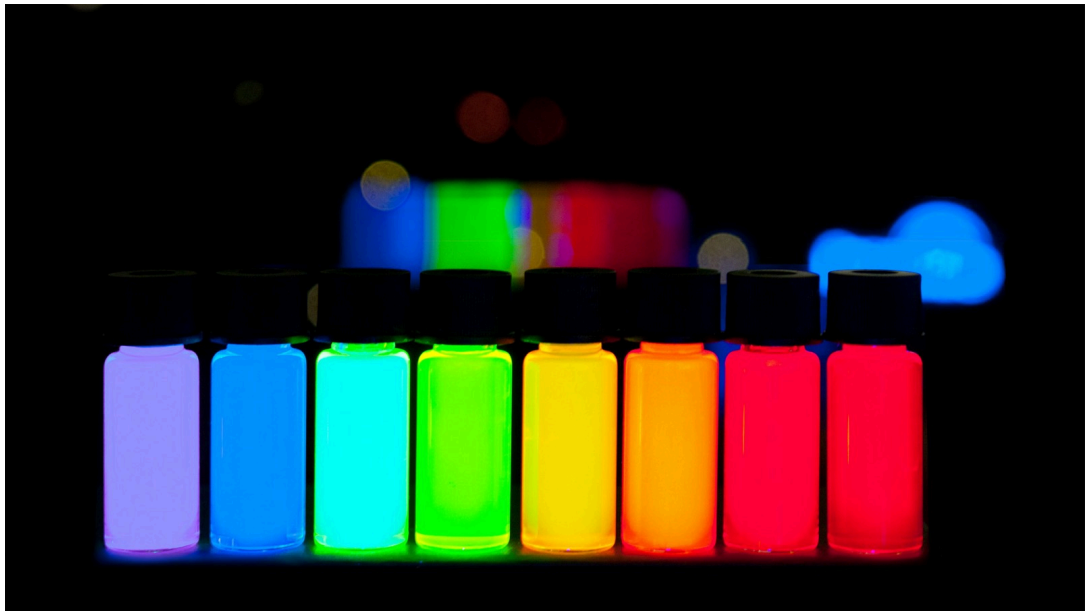


写真: Antipoff, "Quantum Dots with emission maxima in a 10-nm step are being produced at PlasmaChem in a kg scale", Wikimedia Commons, CC BY-SA 3.0

次回の謎

量子ドットは、なぜ小さいほど青いのか

- 今日の残りの **謎** なぜ準位はとびとびか

今日の復習 演習 A・B・小テスト第 1 回　**次回の予習** $\sin kx$ の微分（付録 A.1）、§1.3 の定在波の段落と後半、§2.1

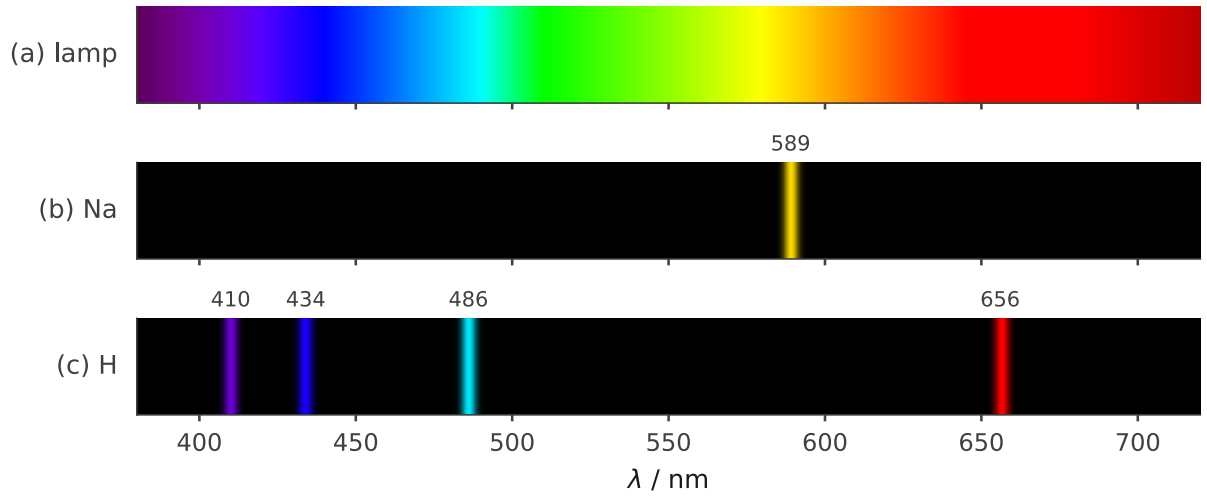
発展：時間があれば・自習用

授業では扱わないことがある枚。試験の範囲外

1. 花火の光を分けてみる
2. 光電効果をグラフで確かめる：波の予想と実験
3. 光子 1 個のエネルギーを、化学結合と比べる
4. なぜ $|\psi|^2$ が確率なのか：光で考える
5. $\lambda = h/p$ は、どこから来たのか
6. 1 個の電子は、両方のスリットを通るのか

発展 花火の光を分けてみる

教科書 §1.1



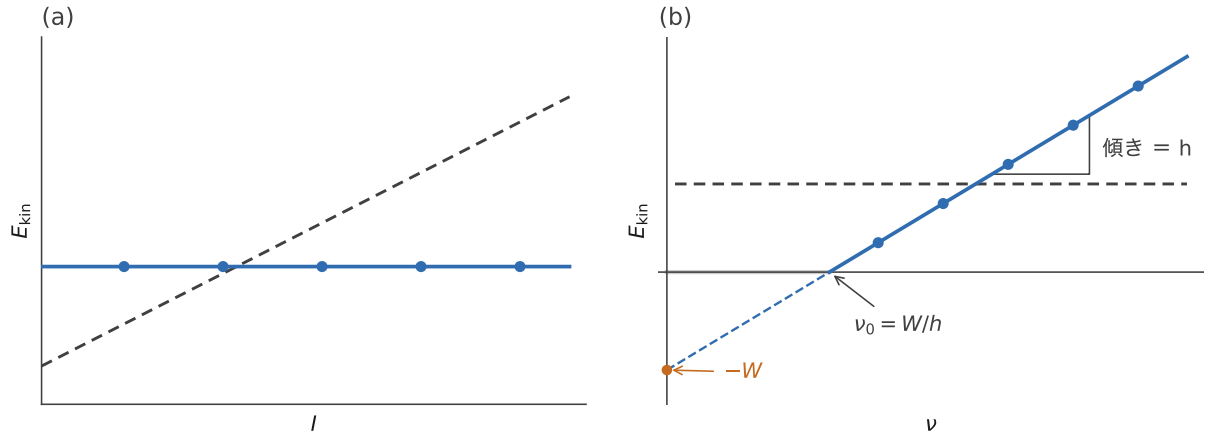
光をプリズムで波長ごとに分けたときの見え方。(a) 白熱電球、(b) ナトリウムの炎、(c) 水素の放電管。数字は波長（nm）

- 白熱電球は切れ目のない虹。ナトリウムの炎は黄色の線 1 本、水素は 4 本の線だけ
- 元素ごとに色が決まっているとは、出てくる光の**波長**が決まっているということ
- 水素の 4 本は、上から $n = 2$ へ落ちる線。$n = 1$ へ落ちる線は紫外で、目には見えない

← 本編 p.8 に戻る

発展 光電効果をグラフで確かめる：波の予想と実験

教科書 §1.1



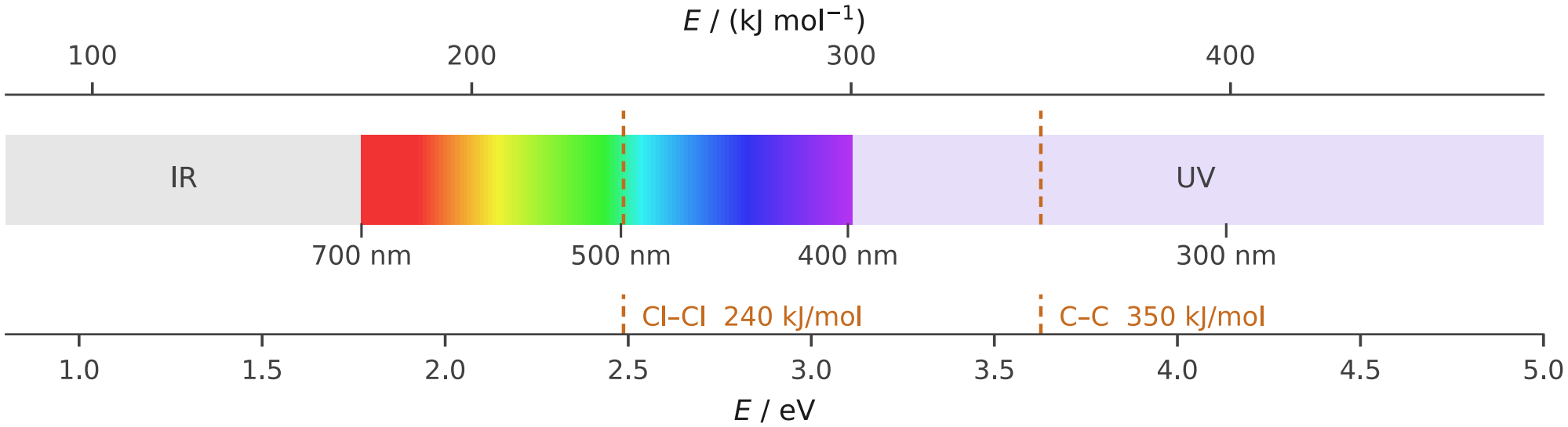
破線：波の予想　実線：実験。縦軸は電子 1 個のエネルギー、横軸は (a) 光の強さ I、(b) 振動数 ν

- (b) の実線は直線 $E_{\mathrm{kin}} = h\nu - W$：**傾きが h**。プランク定数は、この傾きとして実験で測れる
- 横軸との交点 $\nu_0 = W/h$ より下では 0。W は金属ごとに違う（Na は約 2.3 eV）
- (a) 強さを変えても横ばい：強さは電子 1 個のエネルギーではなく、数を変える
- **光は波でもあり、粒でもある**：干渉は波、光電効果は粒の性質

← 本編 p.10 に戻る

発展 光子 1 個のエネルギーを、化学結合と比べる

教科書 §1.1 の発展



光子 1 個のエネルギー（下：eV、上：kJ/mol）。帯は光の波長域（赤外・可視・紫外）、橙の破線は化学結合 1 本を切るエネルギー

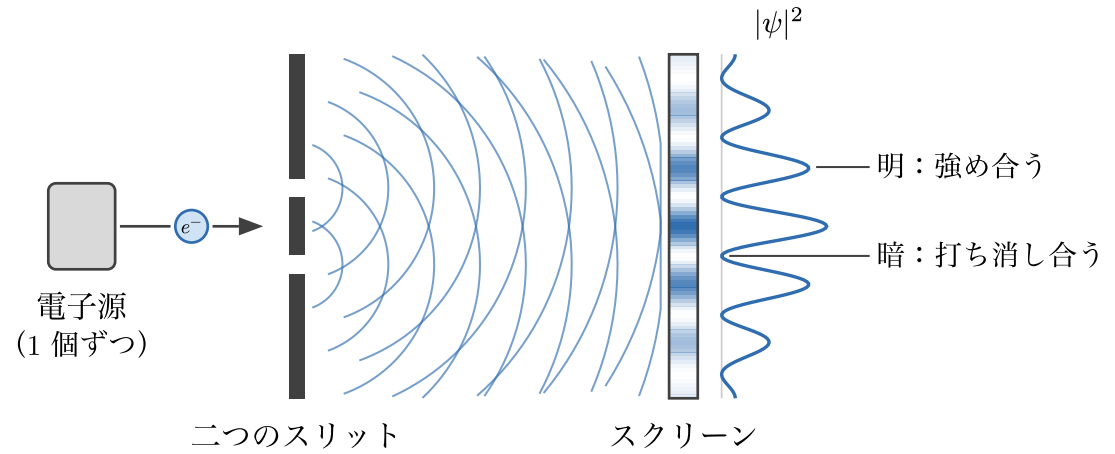
- 可視光の光子 1 個は、化学結合 1 本と同じ桁（500 nm ≈ Cl–Cl）→ 塩素に光を当てると反応が始まる。紫外線は C–C も切れる
- 原子の準位の差 ΔE も、この目盛りの上の光子 1 個 $h\nu$ として出入りする

← 本編 p.11 に戻る

発展 なぜ $|\psi|^2$ が確率なのか：光で考える

教科書 §1.3 の発展

	波として見る	粒として見る
光	明るさ ∝ 振幅の 2 乗	明るさ ∝ 届く光子の数（光電効果）
電子	振幅 ＝ ψ	見つかる数 ∝ $\lvert\psi\rvert^2$



二つのスリットを通った波 ψ（青）が重なる。右の曲線が縞の明るさ ＝ $\lvert\psi\rvert^2$

- 確率は負にならないので、確率どうしを足しても、どこかが 0（暗い縞）にはならない
- ψ は正にも負にもなる → ψ で足すと打ち消し合える → 足してから二乗すると暗い縞が出る

← 本編 p.21 に戻る

発展 $\lambda = h/p$ は、どこから来たのか

教科書 §1.2

光子について知られていた二つと、$c = \lambda\nu$ を組み合わせる

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

$E = h\nu$ 光子のエネルギー（光電効果）　$p = E/c$ 光が運ぶ運動量（光を当てた面が受ける圧力として測れる）

- ここまでは光子だけの話。ド・ブロイは、この式を**質量をもつ粒子にもそのまま当てはめた**（仮説）
- 当てはめてよいかは、実験で決まる → 電子線の回折の縞（本編の写真）が、$\lambda = h/p$ の値どおりに出た

← 本編 p.16 に戻る

発展 1 個の電子は、両方のスリットを通るのか

教科書 §1.3

- **どちらを通ったか調べる**（スリットのそばで電子を見張る）と、届く点は 2 本の帯になり、**縞は消える**
- 調べないときだけ縞が出る：二つのスリットを通る ψ が重なって、強め合い・打ち消し合う
- 「どちらか一方を通った」とも「二つに分かれて通った」とも言えない。言えるのは、届く場所の確率 $|\psi|^2$ まで
- 測ると、電子はいつも 1 か所に、1 個まるごと見つかる（ちぎれた電子は見つからない）

測ることの意味（なぜ 1 か所に決まるのか）には、今も議論がある。ただ、予言する確率は、どの実験ともよく合う

← 本編 p.21 に戻る