

教育用原子分子モデルについての考察

そ の 1

(CBA化学における化学結合原理のモデルによる扱い)

関 田 阜 一 郎

まえがき

二十世紀以前までの物質科学は *Was ist Materie?* というその主題の解決についてかなり明るい見通しを抱いて進んで来た。しかし二十世紀初頭に出た物質構成要素としての電子、原子核概念の明確化（即ちその物理的個性の説明：そのふるまいの力学的記述）に至って、我々の科学はこれらミクロな粒子への単純なマクロ的解釈例えばその運動の古典力学での記述を放棄して、改められた物質への考えを厳密に繰り込みつつ展開された量子力学的記述に代えたという意味で前述の命題にそれ迄の様な観念論的即答を期待する態度を変更せざるを得なくなった。

しかし物質波の概念、位置と運動量についての不確定性等を基礎におくこの量子力学的物質像の意義はさしおき、我々はこの新しい力学のみによっても、物質界の物理学的現象について非常に多くの説明及び知識を得てきたのである。例えば他の実験的成果とも併せ我々が現在集積している分子構造や化学結合に関する知識も莫大である。そして益々我々は斯くの如く変貌し、分化し、発展集積した現代の物質科学の知見を如何に効果的に学習するかという、科学教育上の問題に必然的に直面せざるを得ない。生物系科学を含め自然科学全般についてのその進展と学習というこの問題自体は過去常に取り上げられて来た事柄であろうが、特に最近数年間のうちにアメリカでは高校大学へのコースを中心として物理の P. S. S. C. 計画 (Physical Science Study Committee)、化学のCBA計画 (Chemical Bond

Approach), CHEMS 計画 (Chemical Educational Material Study), 生物の BSCS 計画 (Biological Science Curriculum Study) 等が相次いで現れ, それらがつぎつぎと日本の科学教育界に紹介され取り上げられつつあるのが現状である。

さて全般的にも, 自然科学の進展集積されゆく知見を被学習者のレベルに応じて, 如何により効果的に教え与えるかという目的のため多くの approach や teaching method が次々と案出され, 実現され適用を試みられるのであるが, これが適当であるとして, 実現, 実施される為にも, また例えば高校に於ける化学コースという全般的カリキュラム (即ちそれが教材論の一部とか, チンダル現象, 素電荷の概念を教えるとかのある限定されたコース項目についての approach などでない場合) 等の場合にはレベルは如何でも教育に無責任な試行は好ましくないという立場からも我々は, その妥当性についての検討をより多く加えなければならないはずである。その結果さらに改善あるいは新しく作り出される為の批判は効果とか実施についてのテクニカルな見地等からもなされることが重要だろうが, 自然科学の場合はより正しい科学的概念や知見との対応も問題にすべきであろう。

この意味から具体的に教育効果上しばしば用いられている原子分子モデル等を取りあげそのそれぞれの妥当性を再吟味あるいはさらに研究することも有意義であると思う。

本稿ではその具体例として, 化学結合原理のため, CBA 化学で考案されている Charge Cloud Model, Orbital Model をとりあげ, 化学結合の基礎的事項のいくつかについてその妥当性を論じようとするものである。

大体の構成としては, 第一部が主として, CBA テキスト, 第4, 5, 7章における化学結合原理の展開と, その C. C. Model, Orbital Model の組立て方を展望検討し, 第二部及び第三部で, 第一部で展望したものの中のいくつかの重要事項及びその Model について, その量子論上の事実や, 又現在まで集積されている化学的事実との対応を行い, かつその比

較研究で個々の妥当性を検討する。そして原子分子論の現状に関しての一般的展望を終に付して、最後に総括を行うことにする。尚紙面の余裕を考えて、CBA についての詳細と* 他の既成教育コースとの比較、化学結合論全般についての取り上げ、量子化学自体の研究モデルとの関連等のテーマは殆んど割愛し、本稿を己意に狭い範囲に限定したこと及び将来への見通しとしては、原子分子論を中心としてその教育上のモデルを、量子力学的に物理部門で用いられる解釈が化学的応用に際して、しばしば非常にモデル化されるという一般的な問題等と関連させて、別の機会に論じたいと考えていることをここに記しておく。

CBA 化学教科書目次

Vol. I

1. 化学変化の科学
2. 化学反応
3. 電子、陽子と化学物質
4. 電子、陽子の原子構成
5. 離散過程
6. 物性と化学変化
7. 原子の軌道模型
8. エネルギーと化学変化
9. 金 属

Vol. II

10. イオン結合
11. 周期律表
12. 配位結合
13. 化学反応性と濃度
14. 酸と塩基
15. 水
16. OH グループ：アルコール
17. 共有ハロゲン化物とオキシハライド
18. OH グループ：酸
19. 窒素化合物

* CBA 化学・PSSC 物理など現在までいくつかの科学誌及び新聞紙上で紹介或は論議されている。主なものとしては、自然、科学朝日、科学の実験 4 月号 62 年（共立出版）、理科教室 9 月号 62 年（国土社）、科学読売 8 月号 62 年（読売新聞編集部）拙稿“PSSC より CBA の場合を見れば”，又日本化学会編集・季刊誌・化学教育第 11 巻 1 号（CBA 特集号）一発行は 38 年 3 月の予定がある。科学読売の拙稿では、その沿革及び全内容の概観を記したので参照されたい。国内での教育上の取り扱いについての私の感想は化学教育誌に送稿してあるので前記第 11 巻 1 号を参照されたい。

I. CBA化学における Charge Cloud Model, Orbital Model の組立と化学結合原理展開法の検討

I. 1. 準備的事項

CBA テキストの化学結合原理のモデルによる組み立てを述べる前に、参考上必要な最少限のことを記しておく。

CBA テキストの決定版は来春以降の見通しであるが、大きな変革はないと思われる。

ここではその第二版を使用した。その目次は別欄の如くである。

A. CBA コース決定の理由

1. 現代における化学的知識の急増。
2. 現在の大学教程よりみて高校の従来のテキストが三十年来の形式にある。
3. 旧来の Bohr モデルは化学の領域に活用し難い。

B. CBAの中心テーマと理念

1. CBA は中心テーマとして、化学結合概念とエネルギー概念を基礎として、組合せ展開する。
2. CBA の 'Philosophy' 指導理念は、科学的事実、メンタルモデル、科学的過程に関する三概念を一体化することにある。

C. CBA テキスト第四章迄の導入部分

1. 第一、二章は物質とは何か？ 化学とは何か？ より始まりこのコースの序論部をなす。
2. CBA コースは始めに電気から電子の働きについて探求する方向にすすみ、ミクロ的な原子の段階から出発して、多くのメンタルモデルを組み立てつつ化学結合概念を利用して、後半のマクロ的事実への応用を試みる。
3. 米国で CBA コースの対象となった高校生は、第十一学年生で物理について未だ殆んど学んでいない。
4. 第三章についての学習順序

a. $+$ $-$ 2種の電気, 電氣的引力及び反撥力について学ぶ。

b. クーロムの法則電

$$F = k \cdot \frac{q^+ \times q^-}{r^2}$$

c. 電位エネルギー

$$U = -k \cdot \frac{q^+ \times q^-}{r}$$

負(正)のポテンシャルエネルギーは, q^+ , q^- 間の r (距離)が増す(減ずる)とき, 系がなす仕事に対応するようにとる。

d. 電流は電子の流れということ。陰極線, 熱電子効果等の概念。

e. J. J. Thomson の説について。

電氣的中性の説明 (正電荷, 負電荷の代数和が0として)を行う。

Rutherford の実験と物質中の電荷の分布。

f. 原子核は正電荷の“球”で, 電子が周囲に存在する。

I. 2. CBAにおける荷電雲モデル (Charge Cloud Model 以下 C. Cモデルとかく) の組立てと化学結合原理の展開について。

A. C.C. モデルのための基礎仮説

CBA では電子モデルを構成するために次のような電子, 陽子についての仮説を始めに導入する。

1. 原子中の電子についての仮説

a. 電子は負電荷の荷電雲として表わされる。

b. 電子荷電雲はクーロム力で互いに反撥する。

c. 電子荷電雲はその容積を増大する傾向を有する。

d. 電子は陽子にクーロム引力で引かれる。

e. 十分な引力下において, 電子は2つ以上その位置を同じくすることは出来ない。(パウリの禁制原理)

2. 原子中のプロトンについての仮説

a. プロトンは点電荷とは考えられない。

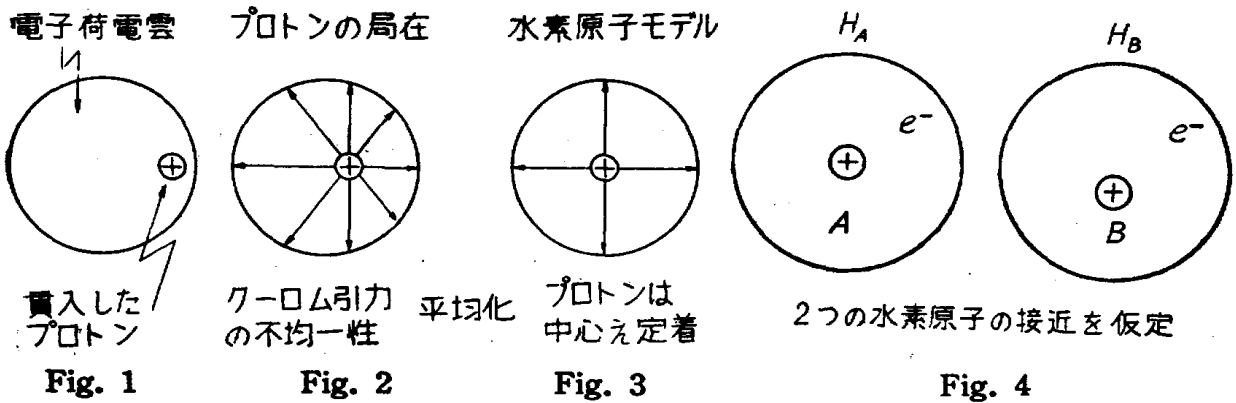
b. プロトンはクーロム法則で互いに反撥される。

c. プロトンは電子を引きつける。

B. 水素原子のC.C.モデルの組立方

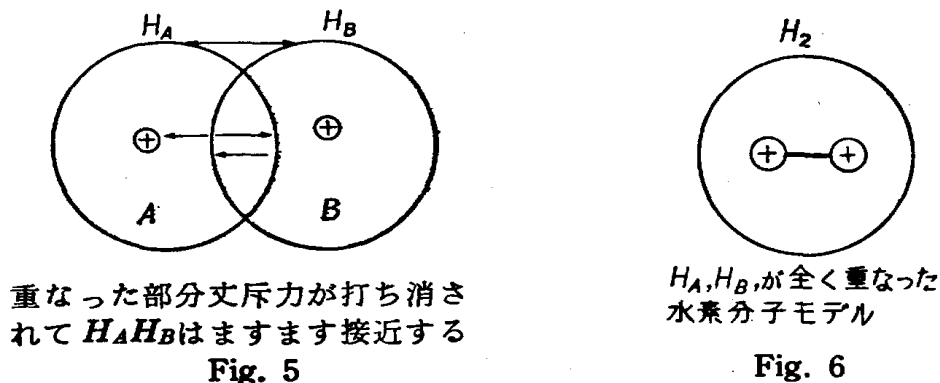
1. 水素原子一個と陽子一個よりなる。
2. 仮説1, 2よりプロトンが荷電雲中に入る。(Fig. 1)
3. 局在プロトンは電子プロトン間の引力で中心へ移動する。(Fig. 2)
4. 最終的には (Fig. 3) のような水素原子モデルができる。
5. 2つの水素原子の接近を仮定する。(Fig. 4)

水素原子の組立



6. プロトンAとプロトンB, 電子Aと電子Bの間には, それぞれ斥力が存在する (1, 2の仮定より) プロトンAと電子A, 電子AとプロトンB, プロトンBと電子B, 電子BとプロトンAとの間には, それぞれ引力が存在する。この系でそれぞれの斥力の総和と引力の総和との和はゼロになる。

7. 特例として H_A , H_B の荷電雲が重なった場合を考える。(Fig. 5), H_A , H_B , 間の荷電雲とプロトン間には斥力が存在するが重なった



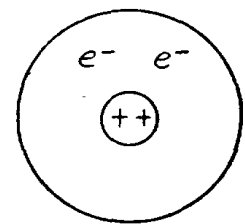
部分では、荷電雲間の斥力が逆になり、その分丈、前述の斥力が打消され、 HA 、 HB はその重なりを増大して、遂に2つの荷電雲が全く重なり、水素分子モデルが出来る。(Fig. 6)

8. 前と関連してこのような二つの荷電雲の重なりは強い引力の結合を形成する。これを共有結合という。

C. ヘリウム分子、ネオン原子モデル。

1. ヘリウム原子はプロトン一個と電子二個を有する。ヘリウム原子の C.C. モデルは二個の電子ですでに占められているので水素分子の様に他のヘリウム原子が重ならない。故にヘリウム原子は一原子分子である。(Fig. 7)

ヘリウムのモデル



一原子モデル

Fig. 7

2. ネオン原子はプロトン十個と電子十個を有する。電子二個よりなる荷電雲はネオン原子核 (+10) に、ヘリウム原子核 (+2) の場合よりも強いクーロム力でひきつけられる。他の残りの荷電雲4個はその周囲に配列される。そしてそれら4個の電子雲は中心球 (荷電

ネオン原子モデル

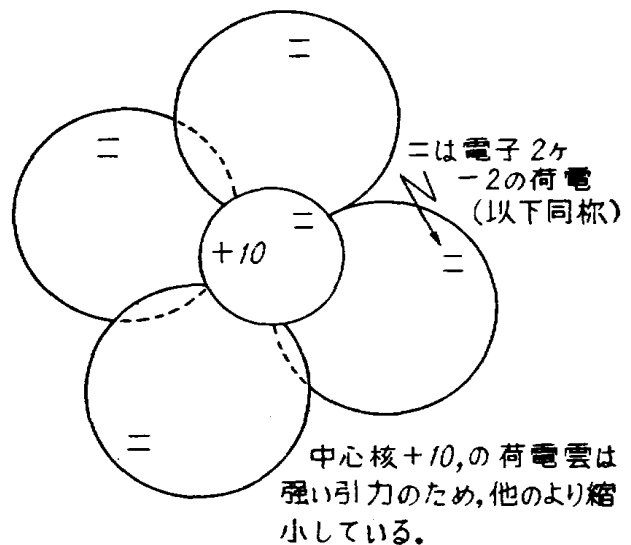


Fig. 8

雲 +10 - 2) にクーロム力で引かれ、しかも互いに最もわずかの接触で中心球の周囲に配列する。すなわち四球を一つの中心小球に互いに一点で接触するよう配列する問題になる。故にネオン原子は tetrahedron である。(Fig. 8)。

D. フッ化水素とメタン分子モデル

1. フッ素のプロトン9個、電子9個と水素のプロトン1個、電子1個を有する。ネオンの原子核 (+10) より1つのプロトン (+1) を

とりさり図の如く組み立てる。(Fig. 8), (Fig. 9), (Fig. 10)。

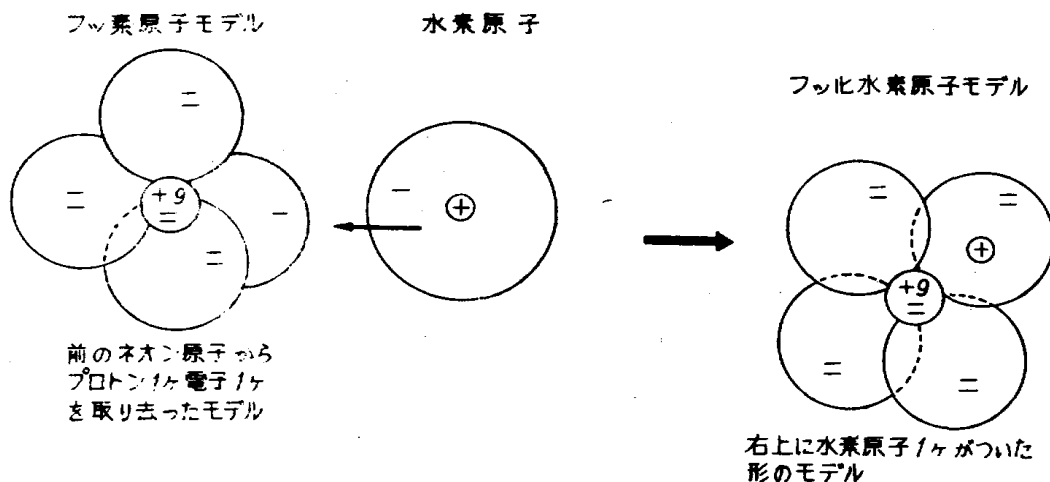


Fig. 9

Fig. 10

2. メタン分子のモデルも同様である。(Fig. 11). (Fig. 12)。

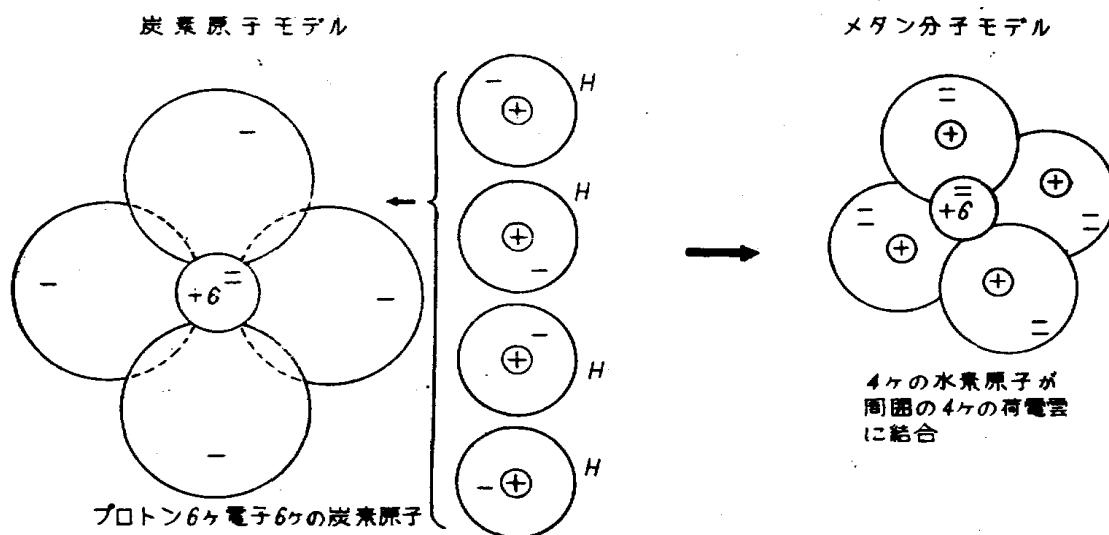


Fig. 11

Fig. 12

E. イオン結合、フッ化ナトリウム分子モデル。

1. ナトリウム原子は、プロトン十一個と電子十一個をもつ。

故に前出のネオン原子モデルと対応してネオン原子核(+10)に一つのプロトン(+1)を与えて、そのモデル(Fig. 13)に更に電子一個を与える。そして、この第十一番目の荷電雲球を外側につけてこれを大きくした形のものがナトリウム原子モデルである。(Fig. 14)

2. フッ化ナトリウム分子の場合。フッ素原子の電子一個丈の荷電雲

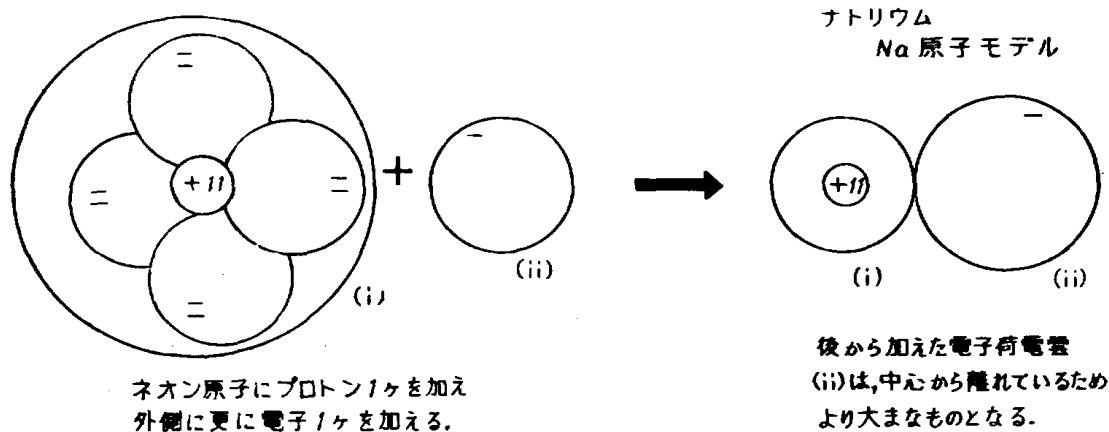


Fig. 13

Fig. 14

に、ナトリウム原子の前述の外側の電子一個を加える。その結果フッ素はマイナス一価のフッ素イオン，ナトリウムはプラス一価のナトリウムイオンとなる。(Fig. 15) (Fig. 16)

このような Na^+F^- の結合 (Fig. 16) をフッ化ナトリウム分子に於けるイオン結合と考える。

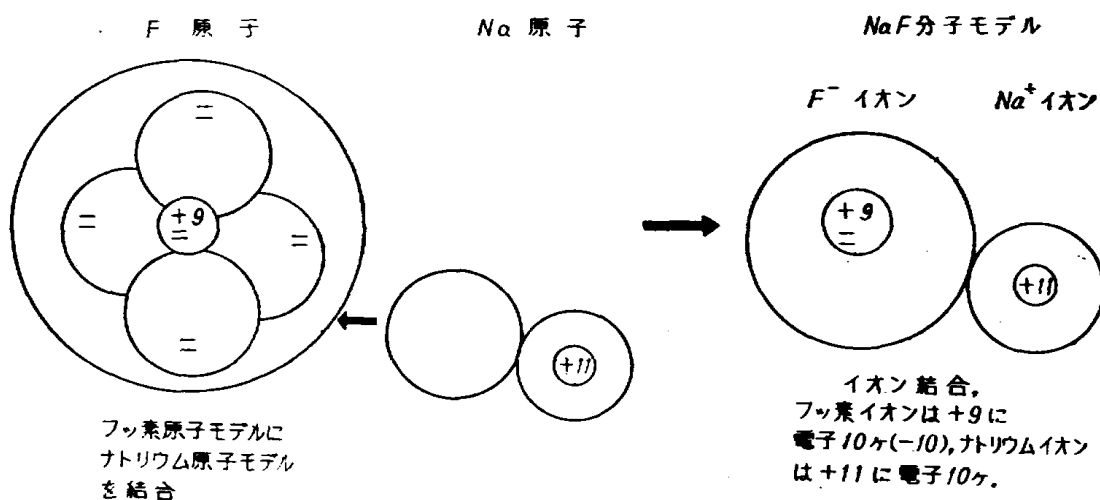


Fig. 15

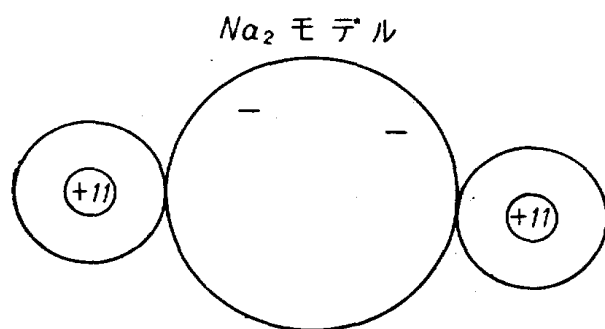
Fig. 16

F. 金属結合 Metallic Bond

前述のナトリウム原子モデル2個を，組合せ分子モデルとし，更にナトリウム金属結晶モデルを得る。(Fig. 17)

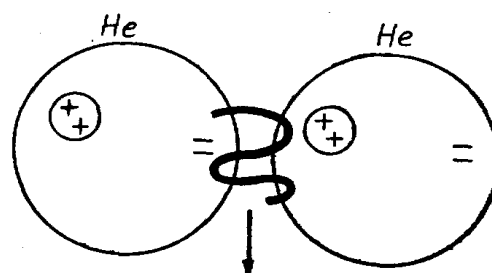
G. Van der Waals 力と沸点に関して

種々の分子は，その分子間引力で結合しているが，あるエネルギーが与えられると，結合が切れて更には蒸発する。



前図ナトリウム原子の外側の荷電雲
同志が互いに結合した形

Fig. 17



Poralizationによる
He, He間の Van der Waals 力

Fig. 18

分子間引力が小さなものは、小さなエネルギー（分子間の結びつきに仕事をするエネルギー）によって、結合が切れ低沸点が対応する。逆に大なる分子間力のものには大なるエネルギー、すなわち高沸点が対応する。ヘリウム分子の様な全く対称的なものでも、その Poralization により、分子間力（Van der Waals 力）を生じ、この種の分子間力は一般により多くのプロトンと電子をもつ、原子、分子の方が強くそのためより高沸点である。（Fig. 18）

I. 3. CBA における軌道モデル (Orbital Model) の組立てと化学結合原理の展開について

A. 軌道モデルへの導入 — (1)

1. 原子と最外殻電子を、とり去るに要するエネルギー（電子1ヶ当り）。即

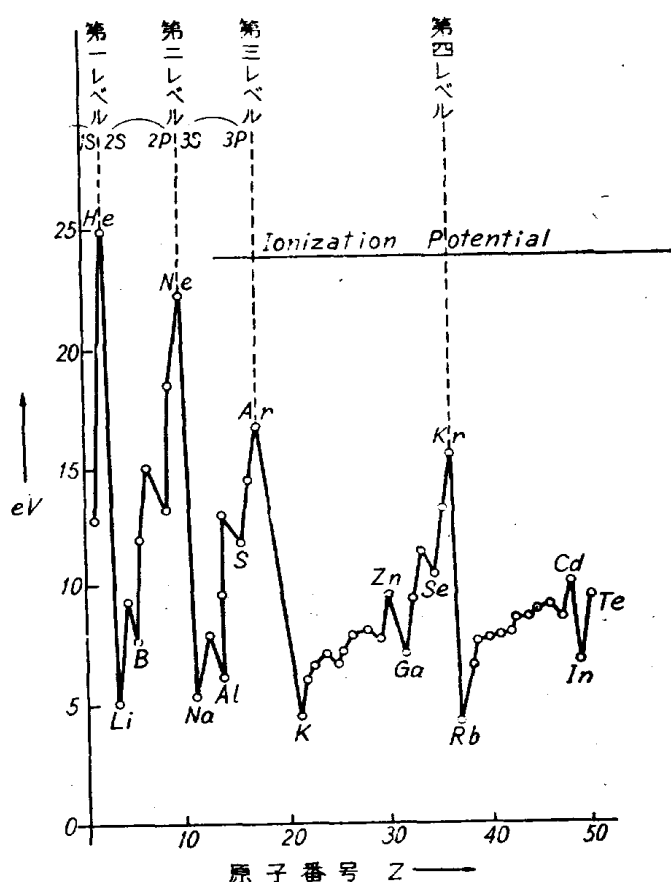


Fig. 19

ち Ionization Energy の、各種元素（原子）についての、周期的変化に注目、その Ionization Potential グラフの、週期的変化と、第一、二、等の主量子レベルを対応（則ち、 $Z=2$ He. と $Z=3$ の Li, $Z=10$ Ne と $Z=11$ Na, の間等々と）原子内電子のエネルギーレベルの概念を得る。(Fig 19)

2. 更に、水素よりカルシウム迄の各電子毎の Ionization Energy についてのダイアグラム (Fig. 20)

Orbital <i>n</i>	1		2								3							
Total Electrons	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Energy Level	1 S		2 S		2 P						3 S		3 P					
H	14°																	
↑1S He	25°	25°																
Li	65°	65°	5°															
Be	120°	120°	9°	9°														
Boron																		
C	300°	300°	17°	17°	11°	11°												
↑2P Ne	900°	900°	56°	56°	22°	22°	22°	22°	22°	22°								
Na	1000°	1000°	60°	60°	40°	40°	40°	40°	40°	40°	5°							
↑3P Ar	3000°	3000°	320°	320°	225°	225°	225°	225°	225°	225°	29°	29°	16°	16°	16°	16°	16°	16°

小 ← 大 Ionization E

Fig. 20

を用いて、Sub level の概念をも導入する。

3. 各 Energy Level と電子軌道概念を結びつけて、核外電子についての量子数 Quantum Number を説明する。

B. 軌道モデルへの導入—(2)

—CBA に於ける量子数の説明—

1. 電子1ヶが占める空間内領域を Orbital と云い、その場所は量子数で表はされる。…… (原文)

そして、電子の Gross energy Level を $1 \cdot 2 \cdots n$, の整数で、sub level を、*s*, *p*, *d*, *f*, の文字で表はすが、量子数には、更に、軌

道と spin. についての2つがある。

2. 量子数, n, l, m_l, m_s の説明

a. n : 電子と核との凡その距離を示す, 従って電子の energy の大部分を定める: 主量子数 $n=1, 2, 3, \dots$

l : 電子の形に関する。副量子数 $l=0 (s), 1 (p), 2 (d), 3 (f), \dots, n-1$

m_l : 空間中の軌道の配向に関係, 磁気量子数 $m_l=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

m_s : 電子の自転に関する, スピン量子数: $m_s=\pm 1/2, \dots$ (原文)

b. Pauli Exclusion Principle (パウリ排他原理) とは, 最初の3個 n, l, m_l が等しい1つの軌道は Spin の互いに逆の, 1対=2ケの電子迄しか持てないと云う要請である。……原文…

C. 電子の配置, 'Box' 法, について

1. 原子が電気的中性であるため電子数と, 核内プロトン数が同一。
2. パウリ排他原理より, 1つの軌道には, 2個迄の電子が入り得る。
3. 電子は, Energy Level のより低い, なを満たされてない軌道から, 先に入る。同レベルで2つの空きがある場合, 電子の1個も入っていない方から入る。

4. 各原子の電子配置表示

水素, 原子番1号 (以下Zと略) $1S^1 \sim 1S \text{ level}$ に電子1ケ

ヘリウム $Z=2$ $1S^2 \sim \dots \dots \dots 2$ ケ

リチウム $Z=3$ $1S^2$ $2S^1$

ホウ素 $Z=5$ $1S^2$ $2S^2$ $2P^1$

カリウム $Z=19$ $1S^2$ $2S^2$ $2P^6$ $3S^2$ $3P^6$ $4S^1$

: etc.

D. CBA 軌道モデルの形成

1. 原子軌道は負の電荷 (電子) の占める空間である。
2. S 軌道は $1S, 2S, 3S, \dots$ と同じ球状にとる。(Fig. 21) 参照。
3. P 軌道は, 6ケの電子を包含するが, パウリの排他律から, 同一軌

道に、2ヶ以上の電子が入らないので、同一球形をとれない (Fig.

2) 参照

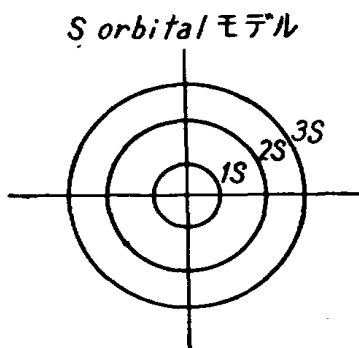


Fig. 21

Porbital モデル
dumble bellの型

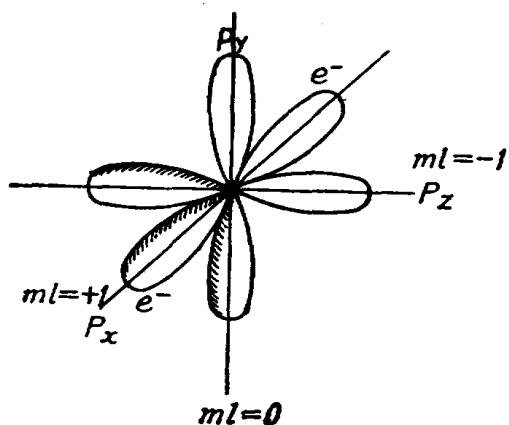
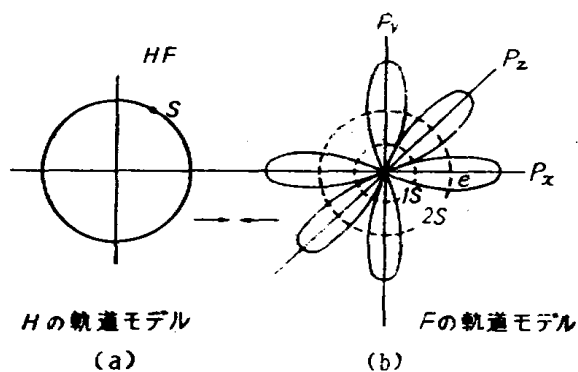


Fig. 22

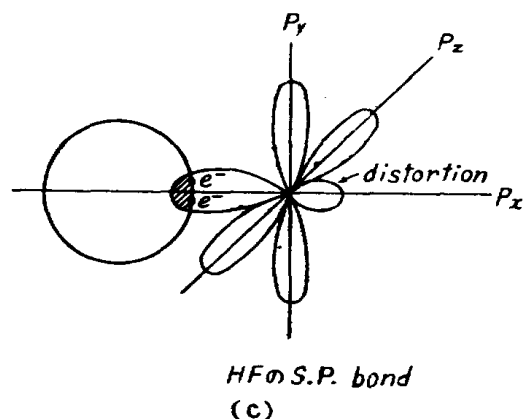


Fig. 23

4. 故に P 軌道では各1対の電子毎に x, y, z 軸の三次元的配列に従って、 P_x, P_y, P_z の軌道を作る。(Fig. 23) 参照すなわち、その軌道モデルは3つの dumble bell 型となる。

5. 以上S, P 軌道形と量子数との関係は

1 S 軌道..... $n=1, l=0$

2 S 軌道..... $n=2, l=0$

2 P 軌道..... $n=2, l=1$

3 P 軌道..... $n=3, l=1$

であり。また P 軌道の配向について、 P_x, P_y, P_z は $m_l=0$ $m_l=$

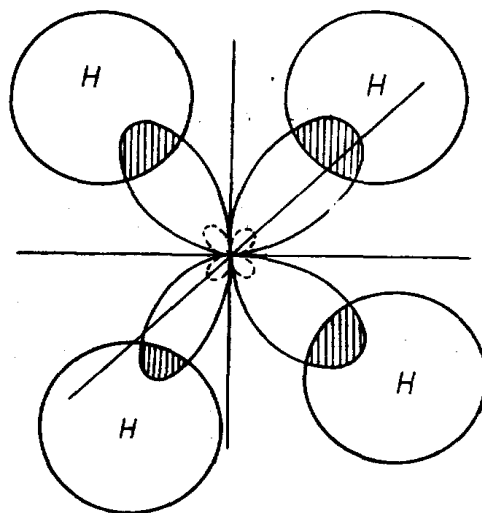
+1, $m_l = -$ によって定まる。

E. H-F 分子のモデル

1. 水素原子 $Z=1$, $1S$ フッ素原子 $Z=9$ $1S^2 2S^2 2P_x^2 2P_y^2 2P_z^1$, より各々の軌道モデルは (Fig. 23—a, b) のようになる。
2. 水素 $1S$ の1ケの電子とフッ素 $2P_x$ の1ケの電子とが結合してHFの SP 結合を形成する。(Fig. 23—c) 参照。

F. Hybridization—混成軌道の説明

1. 炭素 $Z=6$ は基準状態で, $1S^2, 2S^2, 2P_x^1 2P_y^1$ であり, その原子価は, 2価と考えられる。
2. しかし CH_4 メタンのように, 4価をもちうる。理由として, その励起状態 $1S^2, 2S^1, 2P_x^1, 2P_y^1, 2P_z^1$, を考える。
3. すなわち, $2S$ 軌道より電子1ケを P の空軌道 P_z に挿入して, SP^3 混成軌道を考える。(Fig. 24) 参照。
4. この4つの SP^3 混成軌道によって, CH_4 を形成する。(Fig. 24) 参照。
5. ホウ素 $Z=5$, $1S^2, 2S^2, 2P^1$



Tetrahedral

(SP)³ 混成軌道
 CH_4 の場合

Fig. 24

II. 第一部の基礎的事項と量子論的解釈を中心とした事実との比較検討

II. 1. 比較対応の手順とその限界について

A. 比較対応項目の選択については大要以下の理由……(1). 第一部で把んだように単一基準のモデルより複雑なモデルへの組立てと云う, CBA Text の教授法を云々する迄もなく方法論上の原則的手順としても, より複雑な対象に対しては, その骨格たる少数の基礎的事項を重点的に check

するのが一般に **effective** である。(2), 波動力学的考察の手順では, 必ずしも第一部で指摘した **CBA text** での **C.C. モデル Orbital** モデル利用の系列をそのまま踏襲すべき理由はない。例えば **C.C.モデル** と **Orbital** モデルの基礎的事項は一括して関連できる。(3), 物質科学でのモデル論としては教育用モデルのみを考えても **CBA** のみならず他の多くの場合について考究する方が却って望ましく, 例えその詳細な検討がこの稿ではぶかれた事項についても, 他の段階でまとめ得る。

……によって, **C.C. モデル**の基礎的仮説 **I・2 A**, 水素原子 **I・2 B**, 軌道モデルへの導入量子数の説明 **I・3 B**, 軌道モデルの形成 **I・3 D**, に重点をおいて対応を行い, 次に共有結合に関する説明法から水素分子 **I・2 B**, ヘリウム原子 **1・2 C**, フッ化素 **I・2 D I・3 E**, 等につき現在の研究成果(実験上の)を交えながら概観し, 他の共鳴, イオン, 金属結合等, 混成軌道 **I・3 F**, 等の項目については, 単にふれる程度にとどめる。又手順についても前述の配列に従うこととする。

B. より厳密性を望んでも, 量子力学的対応検討に際して, 特に高度の又, 詳細な展開をなす余地はないので, その基準を制限された極く一般的なものにとる。そして1つ1つの数学的プロセスを網羅することは出来ないで重点的項目をのぞいては一般的にその結果に注目して行く様にする。

II-2

A. **I・2A, I・2B, I・3B** 等の項目を中心として

1. 物質粒子への波動性の附加

L, de Brogli の式 (1924) $\lambda = h/p$, この概念は, **CBA** の電子等にあらわでない。

$$* E = h\nu = mc^2, \quad c = \lambda\nu \quad \text{より} \quad \frac{h\nu}{c} = mc = P \quad (\text{Photon の運動量}); \quad \frac{h\nu}{\lambda\nu} = \frac{h}{\lambda} =$$

$$mc = P, \quad \therefore \lambda = \frac{h}{mc} = \frac{h}{P} \quad (\text{Photon について})$$

$$\text{物質波でも } P = mv \quad \therefore \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{P} \quad c = \text{光速}, \quad \nu = \text{振動数}, \quad \lambda = \text{波長}, \\ h = \text{プランク定数}.$$

* 定性的に云って, 質量 m の大なる場合, $\frac{h}{mv} \rightarrow \text{minim.}$ より波動的性質が, かく

されて来るが、より小なる質量の、電子 ($m \doteq 9.1 \times 10^{-28} \text{g.}$) で、 $v \doteq 5.9 \times 10^7 \text{ cm/sec} \sim 1 \text{ volt}$ 程度のオーダーでは、あらわになる。

2. Heisenberg Uncertainty Principle (測定機器についての) に関して。

電子の位置 x , それに共軛な運動量 ($p = mv$) の同時決定については、光、又又は電子が最終測定媒体として、介在する以上、 $\Delta x \sim \lambda / \sin \alpha$, $\Delta P_x \sim h / \lambda \sin \alpha$, の積の範囲以上の正確さを期待出来ない。故に測定実験後の知識として。

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \left(\frac{\lambda}{\sin \alpha} \right) \left(\frac{h}{\lambda} \sin \alpha \right) \sim h$$

以上は、顕微鏡的測定を想定した場合但し、原子内での如くある定常状態に束縛された電子の場合 (束縛電子), $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim n\hbar$, 程度で、より不確定となる量子数の非常に大な極限では、軌道の面積が、確率束のひろがりより非常に大となって、古典的概念とつながる。

波動論的にも、成分波の合成にある波束について

$$\frac{\Delta x}{\lambda_0} \geq \frac{\Delta x}{\lambda_0 + \Delta \lambda} + 1 \geq \frac{\Delta x}{\lambda_0} \left(1 + \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0} \right)^{-1} + 1, \therefore \frac{\Delta x}{\lambda_0} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0} \right)^{-1} \right\} \doteq \frac{\Delta x}{\lambda_0} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{\Delta \lambda}{\lambda_0} \right) \right\} \doteq \frac{\Delta x}{\lambda_0^2} \cdot \Delta \lambda \doteq 1, \text{ 混成波の群速度, } v_{gr} = \frac{dE}{dP} = \frac{P}{m} = \frac{h}{\lambda m} \text{ の}$$

$$\text{関係を用いて, } v_g = \frac{h}{\lambda_0 m}, \quad \frac{\Delta v_g}{\Delta \lambda} = -\frac{h}{\lambda_0^2 m}, \quad \therefore \Delta v_g = -\frac{h}{\lambda_0^2 m} \Delta \lambda, \quad \Delta P = m \Delta v_g \text{ の関}$$

$$\text{係について, } \Delta P = m \times \frac{h}{\lambda_0^2 m} \Delta \lambda \quad \therefore \Delta P = \frac{h}{\lambda_0^2} \Delta \lambda, \quad \Delta x \geq \frac{\lambda_0^2}{\Delta \lambda} \text{ として,}$$

$\therefore \Delta P \cdot \Delta x \geq h$ 同様の結果を得る。

3. Schrödingerの波動方程式 (1926)

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Phi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Phi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi, \quad \nabla^2 \Phi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi \text{ を中心として。}$$

a. Harmonic vibration に関しての展開概要

今, $m \frac{d^2 y}{dt^2} = -ky \dots \dots \textcircled{1}$ より出発して, Hook's law $F = -ky$, より, F は, 変位 y に比例 k は平衡位置に戻す力の定数。

$$y = y_0 e^{\mu t} \dots \dots \textcircled{2} \text{ とおき, } m(y_0 \mu^2 e^{\mu t}) = -k(y_0 e^{\mu t}),$$

$$\dots \dots \dots \mu = \pm i \sqrt{\frac{k}{m}} = \pm i\omega \dots \dots \textcircled{3}$$

②③について, $y = Ce^{i\omega t} + De^{-i\omega t} \dots \dots \dots ④$

(但し, $i = \sqrt{-1}$), $e^{i\omega t} = 1 + i\omega t + \frac{(i\omega t)^2}{2!} + \frac{(i\omega t)^3}{3!} + \frac{(i\omega t)^4}{4!} + \dots \dots \dots$,

$e^{-i\omega t} = 1 - i\omega t + \frac{(i\omega t)^2}{2!} - \frac{(i\omega t)^3}{3!} + \frac{(i\omega t)^4}{4!} \dots \dots \dots$, と Taylor展開して, 結局

$e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \rightarrow 2 \cos \omega t$, $e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \rightarrow 2i \sin \omega t$, 以下,

$y = C \cdot \cos \omega t + D \cdot \cos \omega t + Ci \sin \omega t - Di \sin \omega t \dots \dots \dots$

$y = A \cos \omega t + Bi \sin \omega t$ (但し, $A = C + D$, $B = C - D$, C, D は互いに共軛), 又, 位相角 δ , $A, B, \sqrt{A^2 + B^2}$, を三辺とする直角三角形を考えて, $y = \sqrt{A^2 + B^2} \sin(\omega t + \delta) \dots \dots \dots$ から

振動数 $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m}}$ 変数 x, t について, 波動式 $y = y_0 \sin(\omega t + \alpha x)$

$\dots \dots \dots ⑤$ とし, 周期 $\tau = \alpha x / \omega$ と, 位相速度 $v = x / \tau$ より, $v = \frac{\omega}{\alpha}$, 又,

$\alpha = 2\pi \cdot \frac{1}{\lambda} = 2\pi \cdot \sigma$ (λ = 波長, $\sigma = \frac{1}{\lambda}$ ~ 波数) 等々, \therefore , ⑤について, $y =$

$y_0 \sin 2\pi(\nu t + \sigma x)$ 。

\sin の正負, $\sin \rightarrow \cos$ についても考慮し, 結局, $y = y_0 e^{-2\pi i \nu t} e^{-2\pi i \sigma x}$ 左進波,

$y = y_0 e^{2\pi i \sigma x} e^{-2\pi i \nu t} \dots \dots \dots ⑥$ 右進波, 等々の式を得る。

b. 波動の微分方程式について

⑥式を例にとれば, $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = -4\pi^2 \sigma^2 y$, $\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = -4\pi^2 \nu^2 y$

又 $v = \lambda \nu$, $\lambda = \frac{1}{\sigma}$, $\therefore \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$, $\dots \dots \dots$ 。

$\therefore xyz$ 3次元について, $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$, $y = f(x, t) \rightarrow \phi(x, y, z, t)$

Laplacian 表示して, $\nabla^2 \phi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \cdot \phi \dots \dots \dots ⑦$

又, ⑦の解を, ⑥に倣って $\phi = \phi_0 e^{-2\pi i \nu t}$ 更に $\frac{1}{v^2} = \frac{1}{\nu^2 \lambda^2}$, $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \rightarrow -\phi 4\pi^2 \nu^2$,

$\therefore \nabla^2 \phi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \phi = 0 \dots \dots \dots ⑧$ を得る。

ここで, $\phi = 2\pi [f(x, y, z) - \nu t]$, $\phi = |\phi| e^{i\varphi}$, $f(x, y, z) = \frac{1}{\lambda_0} s(x, y, z)$, $\lambda_0 \rightarrow 0$,

$|\phi| \rightarrow \text{const.}$ と考えて, $\nabla^2 e^{i\varphi} + \frac{4\pi^2}{\lambda_0^2} n^2 e^{i\varphi} = 0$, 但し $n = \lambda_0 / \lambda \dots$ 屈折率

$\nabla^2 e^{i\varphi} = i e^{i\varphi} \nabla^2 \varphi - e^{i\varphi} \left\{ \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right\}$

$\therefore \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i\varphi} = i e^{i\varphi} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + i^2 e^{i\varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} \dots \dots \dots x$ についてのみ。

$$\text{結局, } \frac{\lambda_0}{2\pi i} \nabla^2 s + \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial s}{\partial z}\right)^2 = n^2$$

$$\frac{\lambda_0}{2\pi i} \rightarrow \text{neglegible として, } \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial s}{\partial z}\right)^2 = n^2$$

$s \sim \text{eiconal}$, $s \rightarrow \text{const.} \therefore ds=0$ より, $A(\partial s/\partial x, \partial s/\partial y, \partial s/\partial z)$, $B(dx, dy, dz)$, の直交ベクトルを考えて, $(\text{Grad } s)^2 = n^2$ 一方, 光に粒子性を与えて, 古典力学

$$\text{でエネルギー保存則を用い, } U = E - \frac{1}{2}mv^2 = E - \frac{1}{2}mn^2c^2 \text{ 但し } n = \frac{v}{c}$$

$$v = nc \dots \dots (\text{Grad } s)^2 = \frac{2}{c^2 m} (E - U), \text{又, } \frac{dv_x}{dt} = \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial v_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial v_x}{\partial z} v_z \right) dt$$

$$\text{より} \dots \dots \frac{dv_x}{dt} = \frac{c^2}{2} \cdot \partial/\partial x \{ (\text{Grad } S)^2 \}, \therefore \frac{dv_x}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x}, \text{ Newton 力学で}$$

の記述・光学での eiconal の方程式は Newton 力学での基本式を含み, 古典力学で粒子についての Jacobi 式は eiconal 式と対応, $p = \frac{h}{\lambda}$, を介在して統一的波動方程式を潜在する。

c. 定常状態に対する波動方程式

古典的エネルギー保存則を

$T + U = E$, ポテンシャル場 $U(x)$ で, 質量 m の 1 粒子の x 軸上のみでの運動を考えれば,

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2, \quad \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + U(x) = E \dots \dots m\dot{x}^2 \rightarrow mv^2 \sim \frac{(mv)^2}{m} \rightarrow \frac{P(x)^2}{m} \text{ より}$$

$$\frac{P(x)^2}{2m} + U(x) = E \dots \dots \dots \textcircled{10}$$

$$P(x) \rightarrow \frac{\hbar}{i} d/dx = \frac{h}{2\pi i} d/dx \text{ とおき, } P(x)^2 \rightarrow -\frac{h^2}{4\pi^2} d^2/dx^2$$

$$\therefore \textcircled{10} \text{式は } -\frac{h^2}{8\pi^2 m} d^2/dx^2 + U(x) = E$$

$\phi(x)$ を Operand として,

$$-\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m} d^2/dx^2 - U\right)\phi(x) = E\phi(x) \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\phi = 0 \dots \dots \dots \textcircled{11}$$

ポテンシャル場 $U(x)$ を $U(x, y, z)$ に一般化すると,

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)$$

$$P_x \rightarrow \frac{h}{2\pi i} \partial/\partial x, P_y \rightarrow h/2\pi i \partial/\partial y, P_z \rightarrow h/2\pi i \partial/\partial z \dots \dots \dots \textcircled{12}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\phi = 0$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U) \psi = 0$$

d. 時間を入れた一般波動方程式

エネルギー保存則は古典力学で $H=E$ H : Hamiltonian 波動力学で $H \cdot \psi = E \cdot \psi$

前述のように $Px \rightarrow \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$ etc. の対応と同様時間について同様の操作を加え

る, 時間軸を ict として,

$$iE/c = h/2\pi i \partial/\partial t \sim h/2\pi i \cdot \frac{1}{ic} \partial/\partial t$$

$$\therefore E = -h/2\pi i \partial/\partial t$$

$$\therefore H\psi = -h/2\pi i \partial/\partial t \psi$$

e. 規格化と直交関係

波動方程式の解を

$\psi = Ae^{i\varphi}$, $\varphi \parallel 2\pi\{f(x, y, z) - vt\}$ とおくと $\psi\psi^* = |\psi|^2 = A^2$, A^2 : 正の実数 \rightarrow 確率

但し $e^{i\varphi} \cdot e^{-i\varphi} = 1$

ψ を確率振幅 (probability amplitude) とするために

$$\int \bar{N}\psi \cdot N\psi d\tau = N^2 \int \bar{\psi} \cdot \psi d\tau = 1$$

$$\int \bar{\psi} \cdot \psi d\tau = N^{-2} \quad N = 1/\int \bar{\psi} \cdot \psi d\tau$$

$N\psi \rightarrow \phi_n \sim \psi$ の normalization 規格化

$$\int \bar{\phi}_n \cdot \phi_n d\tau = 1$$

エネルギー一個有値 E_n に対して ϕ_n , E_m に対して ϕ_m をとれば,

$$\int \bar{\phi}_n \phi_m \cdot d\tau = 0 \sim \text{orthogonality}$$

水素原子の波動方程式と波動函数

a. 水素原子核 +1 (Proton), -1 (電子)

ポテンシャルエネルギー $U_H = e^2/r$

$$\therefore \nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{e^2}{r} \right) \psi(x, y, z) = 0$$

プロトンの質量 m_2 , 電子の質量 m_1 , その重心を中心として

$$\frac{1}{m_1} \nabla^2 \psi + \frac{1}{m_2} \nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} \left(E - \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

$x, y, z \rightarrow r, \theta, \varphi$, 極座標に変換して,

$$r \sin \theta \cdot \cos \varphi = x_2 - x_1, \quad r \sin \theta \cdot \sin \varphi = y_2 - y_1, \quad r \cos \theta = z_2 - z_1,$$

$$\text{又 } \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla^2 \Phi + \frac{1}{\mu} \left\{ \frac{1}{r^2} \partial / \partial r (r^2 \cdot \partial / \partial r) + 1/r^2 \sin \theta \partial / \partial \theta (\sin \theta \cdot \partial / \partial \theta) \right. \\ \left. + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \partial^2 / \partial \varphi^2 \right\} \Phi + (E_l + e^2/r) \Phi = 0$$

$\Phi = F(x, y, z) \cdot \psi(r, \theta, \varphi)$ と変数分離して, 結局

$$1) \quad \delta^2 F / \partial x^2 + \partial^2 F / \partial y^2 + \partial^2 F / \partial z^2 + 8\pi^2 (m_1 + m_2) / h^2 \cdot E \text{ trans } F = 0$$

$$2) \quad 1/r^2 \partial / \partial r [r^2 \cdot \partial \psi / \partial r] + 1/r^2 \cdot \sin^2 \theta \cdot \partial^2 \psi / \partial \varphi^2 \\ + 1/r^2 \sin \theta \cdot \partial / \partial \theta [\sin \theta \cdot \partial \psi / \partial \theta] + 8\pi^2 \mu / h^2 (E - U(r)) \psi = 0$$

$$\text{但し, } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \text{ if } m_2 \gg m_1, \mu \doteq m_1$$

$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Psi(\varphi)$ と, 分離して,

$$i) \quad d^2 \Psi(\varphi) / d\varphi^2 + m^2 \Psi(\varphi) = 0$$

$$ii) \quad \frac{1}{\sin \theta} d/d\theta (\sin \theta d\Theta(\theta)/d\theta) - m^2 \Theta(\theta) / \sin^2 \theta + \beta \Theta(\theta) = 0$$

$$iii) \quad 1/r^2 \cdot d/dr \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \beta / r^2 \cdot R(r) + 8\pi^2 \mu / h^2 (E - U(r)) R(r) = 0$$

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i m \varphi}, \dots \Psi \text{ の解, 但し, } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right\}^{1/2} \cdot P_l^m(\cos \theta) \dots \Theta \text{ の解,}$$

但し, $P_l^m(\cos \theta) : P_l^0(\cos \theta)$ の Legendre 陪関数

$$l = 0, 1, 2, \dots, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l.$$

$$R_{nl}(r) = \left[\left(\frac{2z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n \cdot \{(n+l)!\}^3} \right]^{1/2} \cdot e^{-\rho/2} \cdot \rho^l \cdot L_{l+n}^{2l+1}(\rho) \dots R \text{ の解,}$$

$$\rho = (2/na_0)r, \quad a_0 = h^2/4\pi^2 \mu e^2, \quad L_{l+n}^{2l+1} : \text{Laguerre 陪関数,}$$

$P_l(x) : \text{Legendre の多項式と陪関数.}$

$$P_l^0(x) = \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2} \cdot \left\{ x^l - \frac{l(l-1)}{2(2l-1)} x^{l-2} + \frac{l(l-1)(l-2)(l-3)}{2 \cdot 4 \cdot (2l-1)(2l-3)} x^{l-4} - \dots \right\},$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_l^0(x)}{dx^m}, \quad x = \cos \theta, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad m \geq 0.$$

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^m} = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \left(\frac{1}{d \cos \theta} \right)^{l+m} (\cos^2 \theta - 1)^l,$$

直交及び規格化について,

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_k^m(x) dx = 0 \dots \text{直交.} \quad \int_{-1}^1 \{P_l^m(x)\}^2 dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \\ = \frac{1}{N^2} \text{として, } N = \left\{ \frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right\}^{1/2} \dots \text{規格化定数,}$$

$$\begin{aligned} \therefore Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right\}^{1/2} \cdot P_l^m(\cos \theta) \cdot \Psi_m(\varphi) \\ &= \left\{ \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right\}^{1/2} e^{\pm im\varphi} \cdot P_l^m(\cos \theta) \end{aligned}$$

Laguerre 多項式の陪函数。

$$\begin{aligned} R(\rho) &= e^{-\rho/2} \sum_{j=1}^{l+k} a_j x^j = e^{-\rho/2} \cdot x^l \cdot L(\rho), \quad (L(\rho) \sim L_{n+l}^{2l+1}(\rho)) \\ &= \sum_{j=l}^{n-1} a_j x^{j-l} \quad n=l+k+1 \quad L(\rho) \text{ の係数関係は } \sim \left(\frac{a_j+1}{a_j} \right)_{nl} \\ &= \frac{n-(j+1)}{l(l+1)-(j+1)(j+2)} \text{ ここで, } L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} \cdot x^n \cdot e^{-x} \dots \text{Laguerre 多項式。} \\ \therefore L_{n+l}(x) &= e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+l} e^{-x}) \quad L_{n+l}(x) \text{ を } x \text{ につき } 2l+1 \text{ 回微分して,} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_{n+l}^{2l+1}(x), \text{ として, } x=\rho \quad L_{n+l}^{2l+1}(\rho) &= \{(n+l)!\}^2 \left\{ -\frac{1}{(n-l-1)!(2l+1)!} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\rho}{(n-l-2)!(2l+2)!} - \frac{\rho^2}{(n-l-3)!(2l+3)!} + \dots (-1)^{n-l} \frac{x^{n-l-1}}{(n+l)!(n-l-1)!} \right\} \end{aligned}$$

- c. 以上から規格直交化された $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Psi_m(\varphi) \dots$ をとり, 許される量子数,

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n-1), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \\ s &= \pm \frac{1}{2} \text{ or } \pm \frac{1}{4} \left(\frac{h}{2\pi} \right) \text{ について, 但し } \begin{matrix} l \sim 0 & 1 & 2 & 3 \\ s & p & d & f \end{matrix} \end{aligned}$$

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho} \quad (n=1, l=0, m=0)$$

$$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} (2-\rho) e^{-\rho/2}. \quad (n=2, l=0, m=0)$$

$$\psi_{2P_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos \theta \quad (n=2, l=1, m=0)$$

$$\begin{aligned} \psi_{2P_y} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta \sin \theta \\ \psi_{2P_x} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta \cos \theta \quad \left\{ \begin{matrix} n=2, l=1, \\ m=\pm 1 \end{matrix} \right\} \end{aligned}$$

$$\psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} (27-18\sigma+2\sigma^2) e^{-\sigma/3} \quad (n=3, l=0, m=0,$$

$$\sigma = \frac{n}{2} \rho), \dots \text{等の, 水素, 水素型原子の波動函数を得る。}$$

- d. 一電子原子の束縛状態エネルギーを

$$E = -\frac{z^2}{2n^2} \quad n=l+1, l+2, \dots \text{(原子単位), クーロン場のみの場合では, } n$$

丈の関数として, $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \sim (n^2 \text{ 重の縮退})$

一般単位で, $E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4 z^2}{h^2 n^2} \sim (\text{水素では } z=1 \text{ 原子番号})$

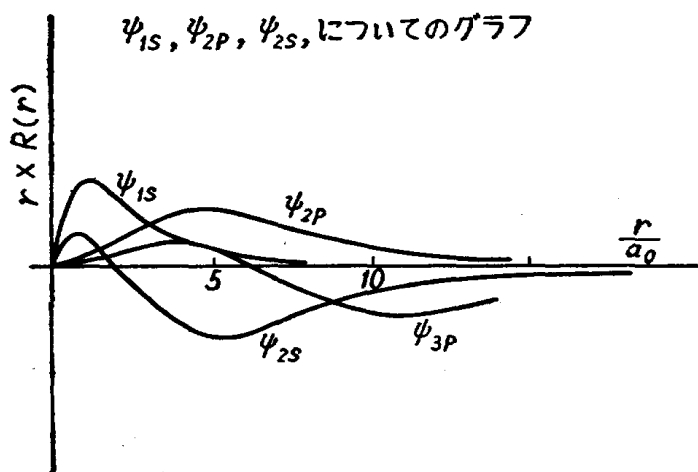


Fig. 25

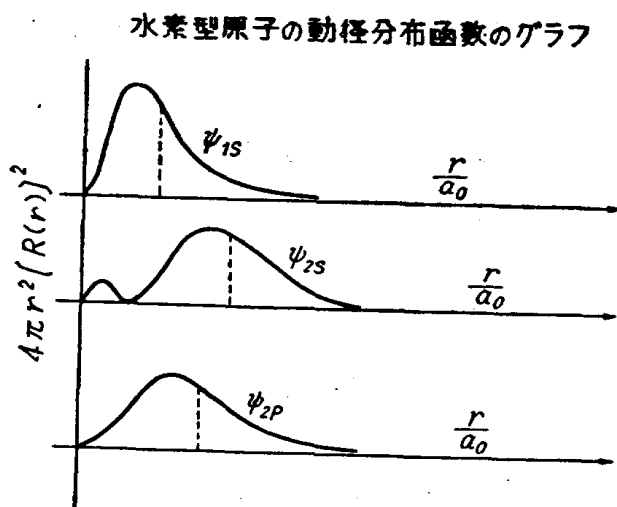


Fig. 26

水素についてのエネルギー準位

$$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d$$

$$< 4s = 4p = 4d = 4f < 5s$$

5. 水素, 水素型原子波動函数の図式化。

a. $rR(r) \sim$ 縦軸, r/a_0 を横軸にとる。

ψ_{1s}, ψ_{2s} (共に $R(r)$ のみの函数) $\psi_{2p} \dots$ (fig. 25)

b. $4\pi r^2 |R(r)|^2 dr \sim$ 縦軸 $r/a_0 \sim$ 横軸。

$4\pi r^2 \cdot dr \sim$ 半径 r と $r + dr$, 両球間の体積。

$P(r) dr = 4\pi r^2 |\psi|^2 dr \sim$ (水素・電子の動径分布函数) であり即ち, $r,$

$r + dr$, 間の分布確率…… (fig. 26) $P(r) dr = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr$ 。

c. $|\psi(r, \theta, \varphi)|^2$ を, 位置 (r, θ, φ) での電子の存在確率ととれば, $dv(r, \theta, \varphi)$ 小体積のもつ電荷量は,

$$\varepsilon = e \cdot |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 dv \dots dv = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi.$$

d. 基底状態での電子～核, 間の平均距離 \bar{r} は

$$\bar{r}_{nlm} = \iiint \psi_{nlm}^* r \psi_{nlm} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi,$$

又は, $r = a_0/2 [3n^2 - l(l+1)]$, 等より。

$$r=3/2a_0 \quad (n=1, l=0)$$

- e. $l=1$ P 状態について, $\Psi_m(\varphi)$ に三角函数を用い, $\phi(r, \theta, \varphi)$ を統括すると,

$$m=0, \phi_z = \sqrt{3/2} \sqrt{\pi} R(r) \cos \theta \sim f(r) \cdot z$$

$$m=\pm 1 \begin{cases} \phi_x = \sqrt{3/2} \sqrt{\pi} R(r) \sin \theta \cos \varphi \sim f(r) \cdot x \\ \phi_y = \sqrt{3/2} \sqrt{\pi} R(r) \sin \theta \sin \varphi \sim f(r) \cdot y \end{cases}$$

$\therefore \phi$ ($2P$ state) の正, 負, 領域は, $\phi=0$ なる Nodal Plane にて, 分割, 又, $f(r) \cdot x$ 等の (x, y, z) に依って, 方向性を得る,

又, 図式化した場合の, ϕ ($2P$ state) の球直径は, $\sqrt{3/2} \sqrt{\pi} R(r)$ 但し, ϕ (確率振幅) についてのもので, 荷電雲モデルに直結するものではない。

- B. 化学結合の原理と, 水素分子, I-2C I-2D, I-3E, 等に関して, 化学結合 (主として共有結合に関し) での, 二, 三, の方法

- a. 原子軌道函数法 (原子価法: V. B. method) A, B, ... 各原子の結合について, 比較的あらわに各, 価電子の所属 (各原子に対する) を, 意識する。(H—L—S—P 法)。

- i) 相互作用のない 2 系の Hamiltonian を H_a, H_b , Energy を E_1, E_2 , 各波動関数, ϕ_a, ϕ_b , 全 Hamiltonian $H=H_a+H_b$, $H_a\phi_a=E_a\phi_a$, $H_b\phi_b=E_b\phi_b$ 又, $H\phi=E\phi$, $\therefore \phi=\phi_a\phi_b$, $E=E_a+E_b$.

- ii) 水素分子で, 2 つの電子を, 1, 2, と可付番, 2 原子を, a, b , とすると, $\phi_1=\phi_{1s,a}(1) \cdot \phi_{1s,b}(2) \cdots \cdots$ 2 電子を互換して, $\phi_2=\phi_{1s,a}(2) \cdot \phi_{1s,b}(1)$ 。

$$\Phi=\phi_{1,2}=\phi_{1s,a}(1)\phi_{1s,b}(2)+\phi_{1s,a}(2)\phi_{1s,b}(1)$$

- iii) ϕ_1, ϕ_2 の結合 (変分法計算)

- a) $\Phi=c_1\phi_1+c_2\phi_2$ の近似解について,

$$E \int \Phi^2 d\tau = \int \Phi H \Phi d\tau, \quad E = \int \Phi H \Phi d\tau / \int \Phi^2 d\tau$$

期待する真のエネルギー $E_{(\text{grund})}$ に対して, $E_{(\text{grund})} < \varepsilon_n$,

$$\varepsilon_1 = \int \Phi_1 H \Phi_1 d\tau / \int \Phi_1^2 d\tau \cdots \cdots \varepsilon_n = \int \Phi_n H \Phi_n d\tau / \int \Phi_n^2 d\tau$$

ϵ_n 中の $E_{(\text{grund})}$ に対する最良値を ϵ_i とすれば, $\epsilon_i = \int \Phi_i H \Phi_i d\tau / \Phi_i^2 d\tau$ なる Φ_i は, 真の波動函数 $\Phi_{(\text{grund})}$ に対する最良値。

$\therefore c_1, c_2$ を $\Phi \rightarrow \Phi_i$ $\epsilon \rightarrow \epsilon_i$ (最小値) ならしめる様に撰ぶ。

$$\epsilon = \int \Phi H \Phi d\tau / \Phi^2 d\tau = \frac{c_1^2 H_{11} + 2c_1 c_2 H_{12} + c_2^2 H_{22}}{c_1^2 S_{11} + 2c_1 c_2 S_{12} + c_2^2 S_{22}}$$

$$H_{ij} = \int \phi_i H \phi_j d\tau, S_{ij} = \int \phi_i \phi_j d\tau, S_{ii} = S_{jj} = 1,$$

ここで, 前記 $\partial\epsilon/\partial c_1 = 0, \partial\epsilon/\partial c_2 = 0$, の条件を入れ, c_1, c_2 を得, 永年方程式に代入,

$$E_+ = \frac{H_{11} + H_{12}}{S_{11} + S_{12}}, E_- = \frac{H_{11} - H_{12}}{S_{11} - S_{12}}, \begin{cases} H_{11} = H_{22} \\ S_{11} = S_{22} = 1 \\ S_{12} = S^2 \end{cases}$$

$$\text{iv) } H_{12} = \iint \phi_a(1) \phi_b(2) \cdot H \cdot \phi_b(1) \phi_a(2) \cdot d\tau_1 d\tau_2$$

$$= \iint \phi_a(1) \phi_b(2) \left(-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{ra_1} - \frac{e^2}{ra_2} - \frac{e^2}{rb_1} - \frac{e^2}{rb_2} + \frac{e^2}{r_{1,2}} + \frac{e^2}{r_{a,b}} \right) \phi_a(2) \phi_b(1) d\tau_1 d\tau_2 = 2S^2 E_h + J$$

$$J = \iint \phi_a(1) \phi_b(2) \{H - 2E_h\} \phi_b(1) \phi_a(2) d\tau_1 d\tau_2$$

$$= \frac{e^2 S^2}{R} - 2S \int \frac{e^2}{rb_1} \phi_a(1) \phi_b(1) d\tau_1 + e^2 \iint \frac{\phi_a(1) \phi_b(2) \phi_b(1) \phi_a(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2$$

~Exchange integral.

$$H_{11} = 2E_h + Q$$

$$: Q = \iint \phi_a(1) \phi_b(2) \{H - 2E_h\} \phi_a(1) \phi_b(2) d\tau_1 d\tau_2 \sim \text{Coulomb integral.}$$

$$: S \sim \text{Overlap integral.}$$

v) 以上によって, そのエネルギーは。

$$E_{S,A} = 2E_h + \frac{Q \pm J}{1 \pm S^2}$$

$$E (\text{symmetric}) \sim E_S \doteq -3.14 \text{ eV (最小値)} \cdots r_{ab} \doteq 0.89 \text{ \AA}$$

$$E (\text{antisymmetric}) \sim E_A \sim \text{不安定} \rightarrow \text{解離状態}$$

b. 分子軌道函数法 (Molecular Orbital Method M.O.)

i) 2原子分子の電子の M.O. は2中心, その所属は, 問題にしない。

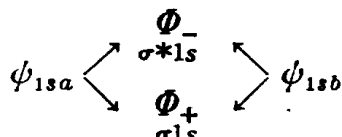
各電子軌道の組を self-consistently に定め, 低エネルギーから順に, Aufbau Principle, 及び Pauli exclusion principle が適用される。これらの各波動函数 $\psi \sim \text{M.O.}$ について, $\psi^2 d\tau$ が電子密度を表はす。現在の非経験的計算の多くは M.O. 法で行なはれている。

ii) L.C.A.O. 近似 (linear combination of atomic orbitals)

 $a-b$, 2 原子分子で

$$\Phi = N(C_a\phi_a + C_b\phi_b)$$

$$\Phi_+ = NC_a(\phi_a + \phi_b), \quad \Phi_- = NC_a(\phi_a - \phi_b)$$

 $\Phi_+ \sim$ bonding orbital $\Phi_- \sim$ antibonding orbital

$$\phi_{1sa} + \phi_{1sb} \rightarrow \sigma_g 1s \sim \text{L.C.A.O.} \rightarrow \text{M.O.}$$

$$\phi_{1sa} - \phi_{1sb} \rightarrow \sigma_u^* 1s$$

$$(\phi 2P_x a, \phi 2P_x b) \longrightarrow \sigma 2P_x \sigma^* 2P_x$$

$$(\phi 2P_y a, \phi 2P_y b) \longrightarrow \pi 2P_y \pi^* 2P_y$$

$$(\phi 2P_z a, \phi 2P_z b) \longrightarrow \pi 2P_z \pi^* 2P_z$$

* ここで、水素分子外の異核 2 原子分子につき、 $\varphi(1) = C_a\phi_a(1) + C_b\phi_b(1)$, $\varphi(2) = C_a\phi_a(2) + C_b\phi_b(2)$, $\varphi = \varphi(1)\varphi(2) \sim \varphi_{\text{ion}} + \lambda\varphi_{\text{cov.}}$

$$\text{If. } C_a \neq C_b, \quad \varphi(1) = C_a \left\{ \phi_a(1) + \frac{C_b}{C_a} \phi_b(1) \right\} = C_a \{ \phi_a(1) + \lambda \phi_b(1) \}$$

$$\lambda = \frac{C_b}{C_a}, \quad \lambda \text{ は軌道函数の極性を表す。}$$

iii) M.O. のエネルギー準位

$$\sigma 1s < \sigma^* 1s < \sigma 2s < \sigma^* 2s < \sigma 2P_x < \begin{matrix} \pi_z P_y \\ \pi_z P_z \end{matrix} < \begin{matrix} \pi^* 2P_y \\ \pi^* 2P_z \end{matrix} < \sigma^* 2P_x,$$

$$z\sigma < y\sigma < x\sigma < w\pi < v\pi < u\sigma \dots \dots \text{Mulliken's notation.}$$

c. その他

水素分子丈とっても、James-Coolidge, Wang, Rosen, Weinbaum, 犬井, ICAO, ASMO, CI 永宮CI, 小出石黒両先生の変分法等, ...多くの Method や改良法関係計算法がある。

2. 各論的事項に関して (M.O. 法で)

a. 水素分子 H_2 他。

$$H(1s)\downarrow + H(1s)\uparrow = H_2(\sigma 1s)^2 \quad (\uparrow \text{印} \sim \text{spin 表示。})$$

$$H(1s)\downarrow + H(1s)\downarrow = H_2(\sigma 1s)(\sigma^* 1s)$$

$\Phi_{H_2^2} = \Phi_g^2 + \Phi_u^2 = (\phi_a^2 + \phi_b^2 - 2\phi_a\phi_b s)/(2-2s)^{1/2} \dots \dots$ 荷電雲密度。

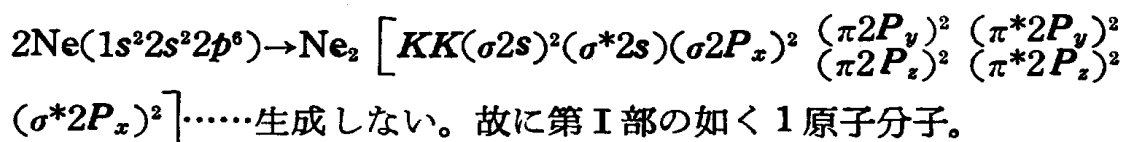
H_2^+ の結合より強い。 $\{H_2^+ \sim (\sigma 1s)^1\}$

b. ヘリリムの原子分子 He_2 他



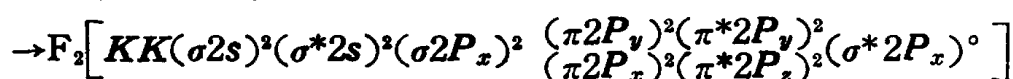
故に結合が打消されて生成しないとされているが、放電管中では、 $(\sigma 1s)^2(\sigma 2s)^2$ 結合と思はれるものが、存在するのに注意しなければならぬ。 $He_2^+(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s) = He(1s^2) + He^+(1s)$ では、差引きの結合力がある。

c. ネオン 2 原子分子



d. フッ素分子, フッ化水素

i) $2F(1s^2 2s^2 2p^5)$



又は, $F_2[KK(z\sigma)^2(y\sigma)^2(x\sigma)^2(w\pi)^4(v\pi)^4]$

故に, この表示で, 差引きの結合に与るものは, $(x\sigma)^2$ 軌道である。

ii HF



V.B. 法では, $H : \ddot{F} :$ の結合だが,

結合にあずかる M.O. は $(\sigma 2P_x)^2$ で他は全て, A.O. に終る。 $\Phi_+ = c_1\phi_H(1s) + c_2\phi_F(2P_x)$ で電子は可成り F に偏り, dipole をもち, 勿論, $c_1 < c_2$ と考えられる。前記に対し, 第 1 部フッ化水素では結合軌道は論理的には, 任意に撰択出来る。

III 特に取り上げべき問題点：分子論の現状をも参考とした検討と結語

III・1 特に記す可き批判—荷電雲モデルを中心として

第 1 部の I・2A の 1・a, 1・c, I・2B の 2, などでは, C・C 球=電子自

体、と云う表現が非常に強く、I・2, C, D, E, F, 等の各原子分子モデルの組立過程は、恰かも、積木細工をしていく様に、操作的明快さもつ丈に、益々この観念を側面から浮き彫りし、極めて実体的（電子が Macro 的に形や大いさをもつと云う）視覚化の効果を与えられていることも見落してはならないと思う。

A, 先づ、その大いさ、形状という点を中心に、モデル効果を更に論議したい。I・3B の1, I・3D の1, などで電子1ケの占める Space (…原文…) と記述されていることはさておき、I 部で展望した様に、I・2A 迄の準備的段階 (CBAテキストでは第4章以前) で、電流より、電気の粒子観～電子の粒子として映像が導入され、前述の I・2A の 1, a, 1c などで、殆ど決定的に、ある容積（当然生徒は古典的, macroscopic な、大いさを考える）を持った球状負電荷の電子ボールの形姿が与えられる。更に、前述の如くこれを用いた原子、分子、の組立過程がこれを徹底させ、第1部の各図の如き、テキスト中随処にある C.C. モデル図などで、殆んど完全に、生徒の脳裏にきざみ込まれるに違いない。

B. さて、第II部で、検討した波動力学や量子論的基準は大へん低次のものであったが、なお以下の考察を記せよう。i) 例えば、所謂荷電球体が、原子内の束縛電子についての各 Eigenfunction の図式的解釈から得られたモデルとするならば、それは、第II部でも記した様な限定を極度に拡大した場合であろう。マクロ的な大いさや形をもった粒子や球は、その存在位置や動き工合など日常の order で当然決定出来る。しかし、原子内電子を波動方程式で記述する場合、吾々の知識は存在について、本質的に確率統計的意味以上でない。電子についての記述波動方程式の解の中の Eigenfunction $\psi_n(x, y, z)$ について、確率密度 $\rho(x, y, z)$ に対して、 $\rho = \psi_n^2(x, y, z)$ と対応させて、 $|\psi_n|^2 dv$ などの形でその存在を表示しても、又単なる確率振幅としての ψ_n や、 ψ_n^2 について、所謂、境界面表示型図形を得ても、実用上の効果は否めないだろうが、上述の背景をも忘れてはならないだろう。荷電雲で、1ケの電子を ψ_n^2 で規定される密度分布を有する

広がりをもった雲状モデルとするのは化学で大いに活用されるが、上述のことの外に、そう扱った場合の1つの見方であるという出発点を心得た上での効果でなければならない。

C. マクロ的世界での波動粒子の二重性という矛盾概念ではないが、電子の波動像には、全くふれられていない。第1部での組立て方からは当然で、扱い上も困難だろうが、ここに一応付記しておきたい。

D. 以下の水素原子、分子、他の批判について共通する所もあるが、以上の要約を行なうと。

1. C.C. モデルや、種々の軌道モデル等で、その **case by case** での化学的意義や、教育効果を全面的に否定するのではないが、唯、電子が、実際に何かゴルフボールの様なものとか、逆に、ぶよぶよ変形自在のゴム風船状のものとか、とにかくマクロ的解釈での形状物性をそなえたある固り、という観念に固定化されるのは望ましくない。

2. 前述の電子などの扱いかいでは(第I部)、ミクロな段階での知識の統計的確率的本質をも何等かの形で付加する事が望ましい。

III・2. 特に記すべき批判—水素分子の共有結合

A. 第1部 I・B, 5, 6, 7, 水素分子の組立では、水素原子 A.B とその各電子を規定した場合の、静電気力で、分子生成を考える。II, B, 7), A, iii) iv) v) の、電子の同等性に基く、結合の重要項、所謂交換エネルギー項 H_{12} (J を含む) の、概念は、あらわでない。

2原子の結合には、各原子 ψ_a, ψ_b のエネルギーが略々等しく、 ψ_a, ψ_b が直交で S_{AB} が零でなく、I, B の図の様な原子の重なりが充分で、S が成る可く大となる事が、必要だろうが I.B では、 H_A, H_B の荷電雲が、1部 overlap すると、その部分のクーロム斥力で、全体の斥力が、打ち消され結合が進展する様に説明される。

この辺の論理的扱いは、生徒が、どう受けとるかが問題である。

B. ヘリウム2原子分子の存在については、II. 8) b, にふれたが、フ

ッ化水素等他は、IIでの検討にとどめる。軌道モデルの表示と、その他の問題は、荷電雲モデルについてのものと共通する。

3. 分子論の現状—批判の参考として

以上、CBAでの原子分子、或いは化学結合原理のための、モデル利用を、具体例として、種々記して来たが、結語の前に、現代分子論の代表的研究者よりいただいた書簡ノートの一節を要約する形で、現代分子論の動向にふれておきたい。筆者の研究上のアドバイザーの1人の方のノートで、個人的なものとは思いますがこれは、本年4月の日本物理学会年会での、同研究者の方の特別講演の下書きの一節でもあり^{*}、適宜と思うので……、又、この交流ノート自体は、本稿提出直前のもので、とりいそいだが、何らかの摘要ミスがあれば、私＝筆者の責任である。……第II部、対比検討で、小数電子系についての各種処理法にふれたが、多電子系についても、その配置間の相互作用を利用するC.I.法(Configuration interaction methods 或いは Hylleraass 流に、 Ψ を完全系で展開する方法等いろいろある。

しかし例えば、“ Ψ ”を、fixed complex set $\{\phi_k\}$ で展開 $\sim \Psi = \sum \phi_k C_k$ 、 k 項迄で、切り捨て、電子計算機で計算という様な Processで、残りの項が、どう影響してくるかが問題であり、又、途中、変分原理の応用に関して、 $\sum (H_{ki} - E \delta_{ki}) C_i = 0$, $\det\{H_{ki} - E \delta_{ki}\} = 0$ の形式で、 E についての k 次の方程式、 k ケの固有値の近似値を得るが(k 項目迄とって)、積理での H_{ki} の計算が、面倒である。一方総括的に云えば、小さな分子については、定量的処理は、積分計算が、楽になったおかげで、良好に進んでいるが、多原子分子では、可成りの計算上の困難が含まれ、I.B.M(電子計算機)が急激に進歩したとしても、水素をのぞき、せいぜい、5ケの核を含む分子位迄で、それ以上には、大変困難と思われるので、理論の他に、矢張り実験的援助を期待しなければならぬ。分子量子論の将来を云え

* 本年4月日本物理学会第17回年会。特別講演、分子理論の現状、小出昭一郎 助教授(東京大学、分子論固体物性等)。の一部分、これは物理学会年報としてもプリントされていないので、本書簡ノートが唯一のものである。

ば、その **nearest goal** は、**single** な分子について、その定常状態、物理的性質を、出来るだけ、厳正に規定する方向にあると思われるので、そのさい、えられた **w.f.** について、完全な **interpretation** を試みることが大事であろうがただ、化学結合など所謂化学の領域を考えるには、実験が、吾々に示す規則性がすべて自然界に存在することを説明するため、この様な計算的扱いを関連分子について反復施行することが不可欠と考えられる。

4. 結 語

紙面の都合から、一括して簡単に記す。

A. 最後に分子論の現状を付加したのは、分子、或いは、結合軌道などの量子論的実際の操作でも、殆んどすべてが、近似的 **approach** であり、補正を考えて、ある電子についての **effectical** な誤差をとり除く改良をすると、その **effect** と打ち消し合っていた他の誤差が、却って、あらわに出て、前より逆に悪くなるとか、所謂専門的研究者でも、適宜の数学的モデル～**Trial function** の撰択～、を用い、或いは **case by case** に、有効な **model** を使用して行くのが実状と思われるからで、更に、原子、**bond**, **electronegativity**, **etc.** ..., 所謂化学では、**operational** に規定された概念、量子化学では、 ψ の存在に基いたある数学的概念を、実際吾々自身も同一な言葉が無意識的にも異った意味で使用し易い—以上これらの実状を考えても高校程度の初期学習で、視覚的效果は大なるせよ、若し前述の如き限界をこえた固定概念化が行なわれたらば望ましくないからである。

B. 第Ⅱ章での比較対応は、他の各論的項目への検討でもあるが他の共鳴、混成軌道、**Ionic**, **Metalic Bond** 等、詳細でなかった所は、序論で述べた方法で、次の機会に扱いたい。なお、本稿は、具体例を単に **CBA** にとった批判と云う意味をもつ事を再記する。故に、又、**CBA** コース全体についての **Aspects** は省いたが、以上の対象に対する少々、否定的な部分に全般的利点を同時に敢えて付加しておきたい。

C. 極めて概括的に云って、**CBA** コースは、既存の高校化学教科書より

も、確かに程度の高い事項を扱っている。(例えば、量子数についての一応の説明、混成軌道、金属内電子エネルギーレベル… etc.) 又、教育上の新しい Approach として、極めて興味ある革新的なものである。その妥当性は別として、化学教育でのよい刺激となすべきである、……大要以上の如くであるが、国内での反響、等、全般的なこと、コース概略などは、既刊の科学誌などを参照していただきたい。(序文・下註参照)。なお、本稿の動機は、筆者が本年8月末、日本化学会の CBA セミナー要員として出席したときの印象に発し、その後短期間の中に急ぎまとめたため、種々の事情で、満足すべきものにならなかった事、対比の基準にとった波動力学上の処理をより高度の洗練されたものにするため、又、他の PSSC 等のコースとの関連のため、本学、原島教授の種々の御教示をいただくことを予定して居たが、本稿の期間中、同教授海外出張のため全くこれを果し得なかった事などを、関係者、ならびに同教授に釈明させていただきます。本稿第Ⅱ部の化学的事項の配列では、東大における旧師白井教授の多くの御教示をいただき、又、前記、分子論の現状については、学問上の旧師としての年来の交流の中にも、筆者の地味な研究上の立場に、学兄に近い親しみを以って、多くの理解とはげましを下さっている東京大学物理教室、固体物性理論(物性研)小出昭一郎助教授(現在、スイス、ジュネーブ大学、国立理論及び実験物理研究所紹聘教授)に今回も渡欧直前多大の御便宜をいただいた。第一流研究者としての多忙の中からも分子論、結合論での Advise などをいただいている白井教授、小出助教授に、特に本欄をお借りして、心からお礼申し上げます。又、参考文献に関して Sirkin & Diatokina “Structure of Molecules” を借用させていただいた本学物理教室三宅助教授に厚くお礼申しあげます。(本学助手)

<主要文献>

1. Valence, 1952.
By C. A. Coulson
Oxford at the Clarendon Press.
2. Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry, 1935
By Linus Pauling and E. Bright Wilson.
McGraw-Hill Book Company Inc.
3. Die Physikalischen Prinzipien Der Quantentheorie 1930
von W. Heisenberg,
Verlag von S. Hirzel in Leipzig.
4. Structure of Molecules and the Chemical Bond.
By Y. K. Syrkin and M. E. Dyatkina.

A Study on Models of Atoms and Molecules for Science Teaching

—The Usage of Models in Chemical Bond Principle in CBA Approach—

(English Résumé)

Kôichirô Sekita

During the short period of forty years after the birth of Quantum Physics tremendous development in all fields of natural science has been seen. Recently there is a tendency for this growth and specialization of various scientific fields to be developed more and more rapidly. Nowadays, in the United States as well as in Japan, in order to cope with this rapid development, many new approaches in science education and high school courses have been introduced and developed. These new developments are all aimed at giving a more modern and true interpretation of modern science. However, in order to produce appropriate programs, not only mere educational values but also various aspects of the contents must be taken into consideration.

The concern of this article is in elaborating points stated above. As examples, the Charge Cloud Model, Orbital Model in the so-called C. B. A. Chemistry (Chemical Bond Approach Chemistry) and various chemical bond theories are discussed. The fundamentals of the development of chemical bond is significant in these models.

The microscopic mechanism of the nature of chemical bonds concerning electrons and protons are beyond the macroscopic mechanical view of ordinary high school level. Although emphasis on audiovisual aids, such as making use of models of atoms and molecules are found to be extremely useful and give good educational results, yet some feel that it is not a suitable method for teaching high school

students who have only attained a macroscopic view of matter and are not well oriented in fields of Chemistry and Physics. The rigidity of the models may give misconceptions of the dynamic electrons. There are many different points of view in respect to this. To give a correct and fair interpretation of the advantages and disadvantages of the use of models is in itself a very significant task.

In view of the fact that this article was prepared within a limited amount of time, I am looking forward of further study on this theme and to deal with it more thoroughly.

An outline of the contents follows:

Preface

Part I. Mechanism of Charge Cloud Model and Orbital Model in CBA Chemistry and Development of Chemical Bond Theory

Part II. Discussion of Some Models and Basic Concepts for Chemical Bond Principle in CBA-approach from the View-point of Quantum Mechanics

Part III. Significant Points to be Discussed: Comments and Conclusions (Partly in reference to the Molecular Theory)