第１部　有機化学への準備
化合物は原子と原子が電子を介して結合したものです．原子の中の電子は原子軌道とよばれる“器”の中に入っています．有機化合物は炭素原子を中心とした化合物です．有機化学を理解するためには多少の古典物理学[1]と量子力学[2]さらに原子に関する知識が必要です．第 1 部では最低必要なそれらの知識を述べます.

第１章　物理量と単位
自然現象のひとつである有機化学を正確に捉えるためには，長さ，質量，力，エネルギーなどの物理量の意味とそれらの単位の定義を知る必要があります.

物理学では長さ，質量，時間，および電流を基本物理量とし，それらの単位として，m（メートル），kg（キログラム），s（秒），A（アンペア）を用いる **MKSA 単位系**，およびこれらに温度 K（ケルビン），物質量 mol（モル），光度 Cd（カンデラ）を用いる **SI 単位系**（国際単位系）で物理量を表すことになっています．これらを用いると力，エネルギーなどほかの物理量も表現できるのでこれらを基本単位といいます.

基本単位をもちいると，力は $m \cdot kg \cdot s^{-2}$，エネルギーは $m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$ となります．これらを組み立て単位とよびます．組立単位を基本単位で表現すると煩雑になるので，それぞれ N (ニュートン)と J（ジュール）を用います.

表 1-1 MKSA 単位系を用いた組立単位の例

量	単位	記号	基本単位表現	他の表現
周波数	ヘルツ(herz)	Hz	s^{-1}	
力	ニュートン(newton)	N	$m \cdot kg \cdot s^{-2}$	
圧力	パスカル(pascal)	Pa	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$	$N \cdot m^{-2}$
エネルギー・仕事・熱量	ジュール(joule)	J	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$	$N \cdot m$
仕事率	ワット(watt)	W	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$	$J \cdot s^{-1}$
電気量・電荷	クーロン(coulomb)	C	$A \cdot s$	
電圧・電位	ボルト(volt)	V	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$	$W \cdot A^{-1}$

分子科学の分野では現在も **cgs (CGS)単位系**［長さ，質量，時間を cm（センチメートル），g（グラム），s（秒）］で表現する習慣が残っています．また後章にでてきますが，**原子単位系（atomic unit）**という特殊な単位系をも用いられます．理由は，その方が，数式が単純になるためです．本書では，MKSA 単位表示を標準とします.

１．１．速度と加速度
速度(velocity)： 直線運動している質点の位置は，その直線を直交座標の一つに取ればその座標のみで表すことができます．その座標を x 軸としよう．時刻 t での位置を x とすれば，x は t の関数になります.

$$x = f(t) \qquad 1\text{-}1$$

時刻 t_1 からごく短い時間Δt が経過したときの位置の変化を，Δx とします．Δt を無限小としたときの値を時刻 t における速度 v と定義します．単位はメートル毎秒（$m \cdot s^{-1}$）です.

1　古典物理学（classical mechanics: ニュートン物理学ともいう）：ニュートンの運動方程式（後述）が成立するような物理学で，日常の大きさの世界（**巨視的（macroscopic）**という）に記述に適用されます.

2　量子力学（quantum mechanics：原子，分子の大きさの物理現象は古典力学で記述できません．代わりに 20 世紀になってから新しい物理理論が出現しました．物質の波動性（後述）に基ずく理論です.

$$v = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f(t_1 + \Delta t) - f(t_1)}{\Delta t} \equiv \frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x + \Delta x - x}{\Delta t} \equiv \frac{dx}{dt} \qquad \text{1-2}$$

$\frac{df(t)}{dt}$ は，関数 $f(t)$ の t に関する**微分係数（differential coefficient）**とよび，微分係数を求めることを**微分する（differentiate）**といいます．なお，1-2 式の等号（≡）は表現方法が異なるが，おなじ意味であることを示します．通常の運動（３次元）では，速度はベクトル **v** で表され，x，y，および z 軸の速度の成分から成り 1-3 式のように表現します．

$$v \equiv \left(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt} \right) \qquad \text{1-3}$$

加速度（accelation）：位置の時間変化の割合を速度というのに対して，速度の時間変化の割合を加速度といい，加速度をαとすれば，

$$\alpha = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{dv}{dt} = \frac{d\frac{dx}{dt}}{dt} \equiv \frac{d}{dt}\left(\frac{dx}{dt}\right) \equiv \frac{d^2 x}{dt^2} \qquad \text{1-4}$$

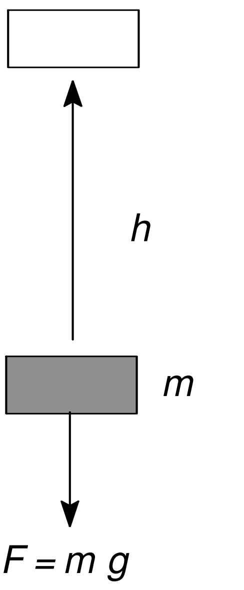
となります．加速度は，位置を時刻 t で２度微分することです．この操作を２階微分するといいます．$a>0$ の場合は，速度は時間とともに増加し，$a<0$ の場合は減少することを示します． ３次元の加速度はベクトル$\boldsymbol{\alpha}$で表します．単位は速度毎秒（$\mathrm{m \cdot s^{-2}}$）です．

$$\alpha \equiv \left(\frac{d^2 x}{dt^2}, \frac{d^2 y}{dt^2}, \frac{d^2 z}{dt^2} \right) \qquad \text{1-5}$$

１．２．力と質量

［力］の定義の前に，感覚的な意味の［力］についてつぎのことを考えよう．同じ力を働かせても物体によって，つまり重い物と軽い物では物体が受ける加速度が異なるように思われます．重い物は，なかなか速度は増さず，軽い物は容易に速くなる．重い物は質量が大きい，逆に軽い物は質量が小さいことに対応します．

このような私たちの日常の経験からも，［力］（$\boldsymbol{F}$）と質量（m）と加速度（α（≡$\frac{d^2 x}{dt^2}$））の間に下式の関係があると推測されます．



$$F = km\alpha \qquad \text{1-6}$$

この式はニュートンの運動の方程式とよばれる式です．m は物体固有の量で**質量（mass）**といいます．k は比例定数で，$k = 1$ となるように単位が定義されています．質量 1 kg の物体に 1 $\mathrm{m \cdot s^{-2}}$ の加速度を得るように力を働かせる場合の力を 1 ニュートン（N（≡ $\mathrm{m \cdot kg \cdot s^{-2}}$））とし，これを力の単位とします．このように，<u>力（force）と質量は 1-6 式で相互関係の形で定義されます</u>．

１．３．仕事とエネルギー

次に**エネルギー（energy）**について述べます．エネルギーとは**仕事（work）**をする能力のことをいいます[3]．単位は仕事と同じでジュール（J）です．エネルギーは，熱エネルギー，電気エネルギーなどいろいろな形で存在します．

仕事をするためには力が必要です．力，仕事，エネルギーの関係を説明します．

地上に質量 m の物体があるとします．物体は地球の重力に引かれた下の方向に F（$= mg$: g は重力の加速度定数 9.8 $\mathrm{m \cdot s^{-2}}$）の力が働いています．この力に逆らって高さ h だけ持ち上げるときの仕事量（W）は，

$$W = Fh \qquad \text{1-7}$$

です．このとき，物体は Fh（$= mgh$）だけエネルギーが増えたことになります．元の位置にもどるとき，mgh だけ仕事をすることができるからです．まとめると，

仕事＝力×動いた距離＝物体に与えたエネルギー

3　エネルギーはギリシャ語の仕事をするものという意味．

ということになります．
　高いところにある物体が落ちるとき，あるいは運動している物体が止るとき仕事をすることができます．次に運動している物体のエネルギーについて考えます．

１．４．運動エネルギー

　1 次元の加速度は次に示す左の式で表されますが，右側の式に書き換えます．

$$\alpha = \frac{dv}{dt} \quad \Rightarrow \quad dv = \alpha dt$$

この式両辺を時間（t）について積分すると 1-8 式が得られます（v_0 は積分定数）．

$$v\left(\equiv \frac{dx}{dt}\right) = \alpha t + v_0 \qquad \text{1-8}$$

$t = 0$ とき，$v = v_0$ ですので，はじめの速度（初期速度）です．この式は，初速 v_0，加速度αで運動する物体の任意の時刻 t での速度を表します．この式をさらに，t で積分して x を求めます．

$$x = \frac{1}{2}\alpha t^2 + v_0 t + c' \qquad \text{1-9}$$

　$t = 0$ のときの位置を x_0 とすると，c'を x_0 で置き換えることができます．1-9 式は，x_0 の位置にある，速度 v_0，加速度αで運動している物体が t 秒後に到達する位置を表します．1-8 式から t を求める式は，

$$t = \frac{v - v_0}{\alpha} \qquad \text{1-10}$$

となり，1-9 式の t に代入すると，

$$v_1^2 - v_0^2 = 2\alpha(x - x_0) \qquad \text{1-11}$$

の関係式がえられます．
　質量 m の物体に力が働き加速度αで運動しているとき，はじめの速度 v_0 から s だけ移動するときの速度が v_1 であるとします．

$$v_1^2 - v_0^2 = 2\alpha s \qquad \text{1-12}$$

この式の両辺に(1/2)m を掛けます．ここで，$F=m\alpha$（1-6式）の関係を用います．

$$\frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{1}{2}mv_0^2 = m\alpha s = F \cdot s \qquad \text{1-13}$$

$F \cdot s$ は F が物体にした仕事です．初速度を 0 とすると，$v_0^2 = 0$ ですので次の式が得られます．

$$\frac{1}{2}mv_1^2 = F \cdot s \equiv T \qquad \text{1-14}$$

$\frac{1}{2}mv_1^2$ は，物体が力をうけて得たエネルギーです．つまり，v で運動している質量 m の質点は静止するまで，(1/2)mv^2 の仕事をすることができるということです．この量を T で表し**運動エネルギー（kinetic energy）**とよびます．

１．５．位置エネルギー

　１．３では，均一の力で引かれている質量 m の物体を高さ h だけ持ち上げるその物体は mgh だけのエネルギーを持つということを述べました．高さ s だけ持ちあげればその物体は mgs だけのエネルギーを持つということになります．
　このように位置（座標を与える）のみで決まるエネルギーを一般に**位置エネルギー（potential energy）**とよびます．後に原子の位置エネルギーについて述べます．

１．６．全エネルギーと力学的エネルギーの保存則

　粒子（物体）の位置（座標）は，空間の場合は直交座標系など[4]を **r** でまとめて[5] 表します．**系（system：考慮の対象となっているものの集まり）**の持つ運動エネルギー（T）と位置エネルギー（V）の和を**全エネルギー（E: total energy）**といいます．

4　直交座標系以外の極座標，円柱座標などでも空間の位置を表すことができます．
5　x，y，z の値からなります．このような表し方をベクトル表現といいます．

$$E = T + V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r}) \qquad 1\text{-}15$$

Eは，エネルギーの出入りがなければ保たれ，力学的エネルギー保存則といい，これは私たちが目にする大きさの世界でも，宇宙空間のような膨大な世界でも，原子や分子の微小な世界でも成り立つ重要な法則です.

地上 0 [m]からの高さ 10 [m]にある質量 1 [kg]の物体の持つ位置エネルギーは，mgh に代入し 1 [kg]×9.8[m·s^{-2}]×10 [m] = 98 [J]です．この物体が落ちて地上 0 m に到達するときの速度を求めましょう．その物体の全エネルギーは 98 [J]で，地上では位置エネルギーが 0 となるので，E のすべてが運動エネルギーへ変わります．したがって，$T = 98$ [J]，そして $T = 1/2mv^2$ ですので，速度 $v = 14$ m·s^{-1} が求まります.