

A high-speed photograph of a water droplet falling into a pool of water. The droplet is captured mid-fall, creating a series of concentric ripples that spread outwards. The background is a soft, light blue gradient.

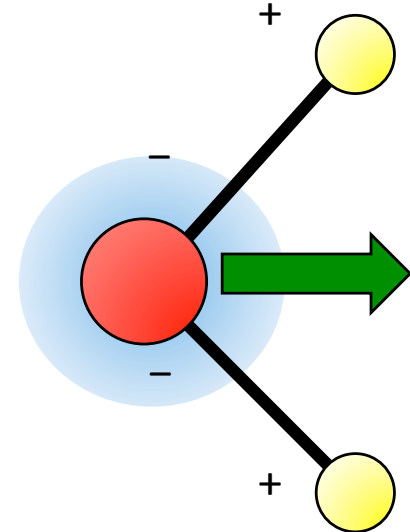
水と生命

地球上に豊富に存在する水。
その水が無ければヒトは生きていけない。
水は命の源。
そう言われる水は他の液体と何が違うのだろうか？

水の特異な性質

<u>分子式</u>	水 H ₂ O	エタノール CH ₃ OH	メタン CH ₄
<u>分子量</u> g/mol	18.02	46.1	16.04
<u>密度</u> g/cm ³	1.0	0.8	0.42
<u>融点</u> °C	0	-117	-183
<u>沸点</u> °C	100	78	-162
<u>比熱</u> cal/g K	1	0.6	0.5

低温で体積が増加する。4°Cで最も体積が小さい。



水は生物にとって不可欠な、特殊な液体。

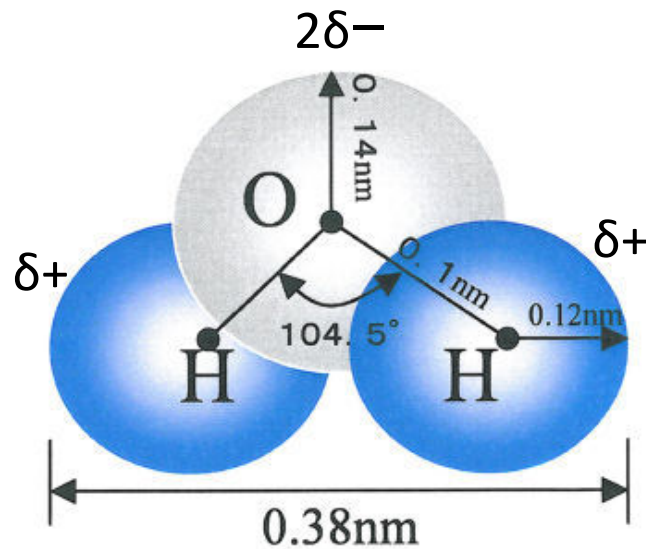
高い**極性**—>イオンの電荷を中和して溶解させる

化学反応の活性化エネルギーを下げる—>**触媒作用**

疎水的相互作用—>生体膜構造

高い誘電率、分子量に比べて高い沸点、高い比熱

水分子の形



水の分子構造モデル

電子は酸素原子に引きつけられ、水素は残った原子核の電荷で正に帯電し、酸素は負に帯電する。

電磁気学的には電荷は打ち消し合うように分布使用とする。なぜ電子が偏るかは量子力学的効果による。

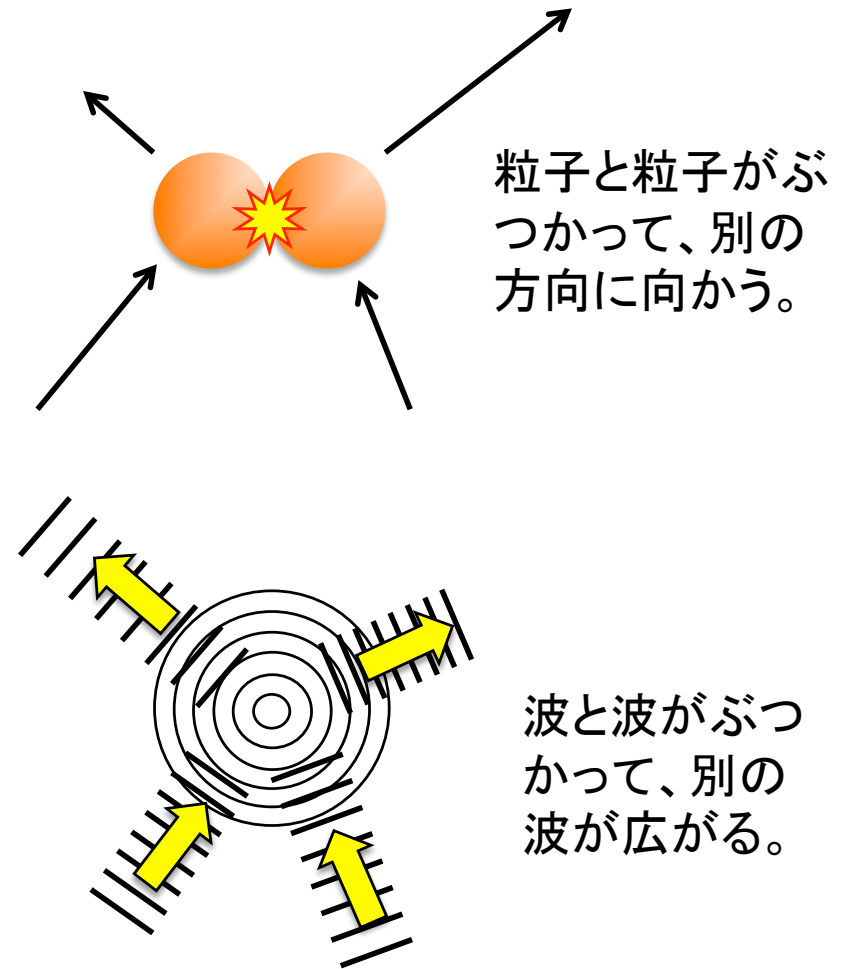
量子力学

物質は波と粒子の両方の性質を持っている。

と言うより、

この世の現象は全て波で、そのエネルギーが飛び飛びの値に限定されている。

その理由はまだ分かっていないので、信じるしかない。



量子力学という信仰

量子力学を難しいと感じるのは、日常では出会ったことのない現象が起きるからだ。

粒子が波のように干渉しあう。薄い壁を通り抜ける。

そんな現象を説明するために作ったモデルが量子力学だ。

だから、直感的に理解することはできない。ただ信じるだけだ。

理解しようとするとう失敗する。

・直進する粒子の波動関数 $\psi = A \exp j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ 式1-1

事実として、粒子の運動量 p は波の波数 k の $\hbar$ 倍、エネルギー E は周波数 ω の $\hbar$ 倍になる。（ $\hbar$ はプランク定数の 2π 分の1。）

運動量と位置、エネルギーと時間は共役な物理量で、その積はプランク定数と同じ次元を持つ。

運動量 $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \hbar(1/\lambda_x, 1/\lambda_y, 1/\lambda_z)$ 式1-2 位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 式1-3

エネルギー $E = \hbar \omega = h/T$ 式1-4 時間 t 式1-5

波の速度は光速 c で、 $\omega = c k$ 式1-6 の関係がある。

シュレーディンガー方程式

式1-1から運動量とエネルギーが微分演算子で計算できることが分かる。

運動量演算子 $-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = p_x \psi$ (x,y,zとも同様) 式1-7

エネルギー演算子 $j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi$ 式1-8 (自分で計算してみよう☺)

これらを運動エネルギーの式 $E = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m}$ 式1-9

に代入すれば微分方程式が得られる。

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \quad \text{式1-10}$$

特に状態に時間変化がない場合は時間微分が一定のエネルギーになる。
(位相変化はあるので0にはならない。)

$$E \psi = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \quad \text{式1-11}$$

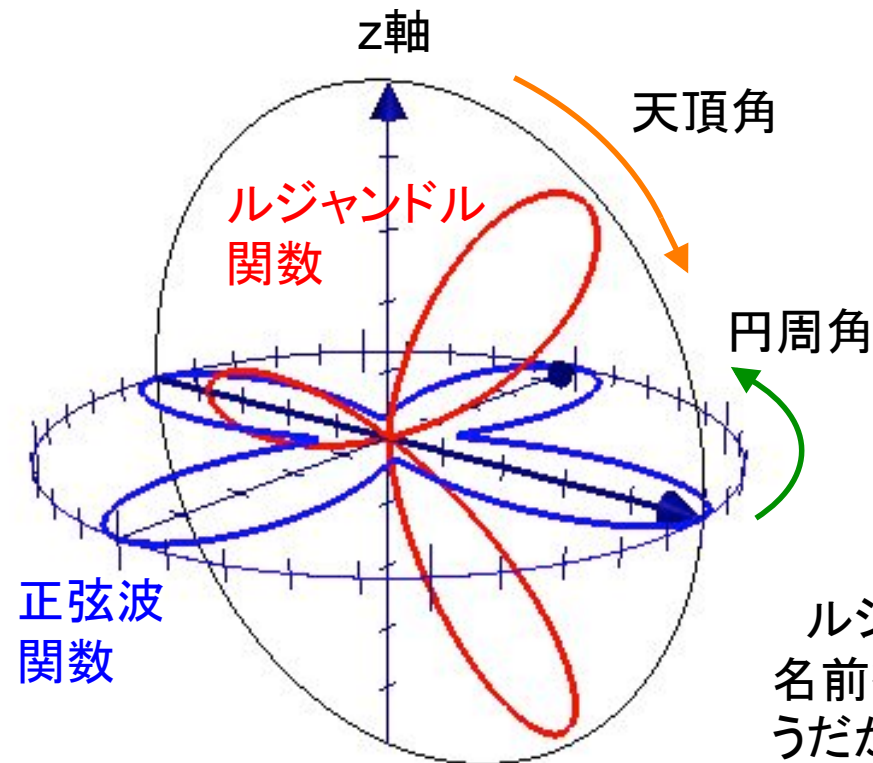
球座標系の解

2階の微分方程式を球座標系で解くと、円周角回りの正弦波関数と天頂角回りのルジャンドル関数に分解される。

半径方向成分は指数関数の多項式が得られる。

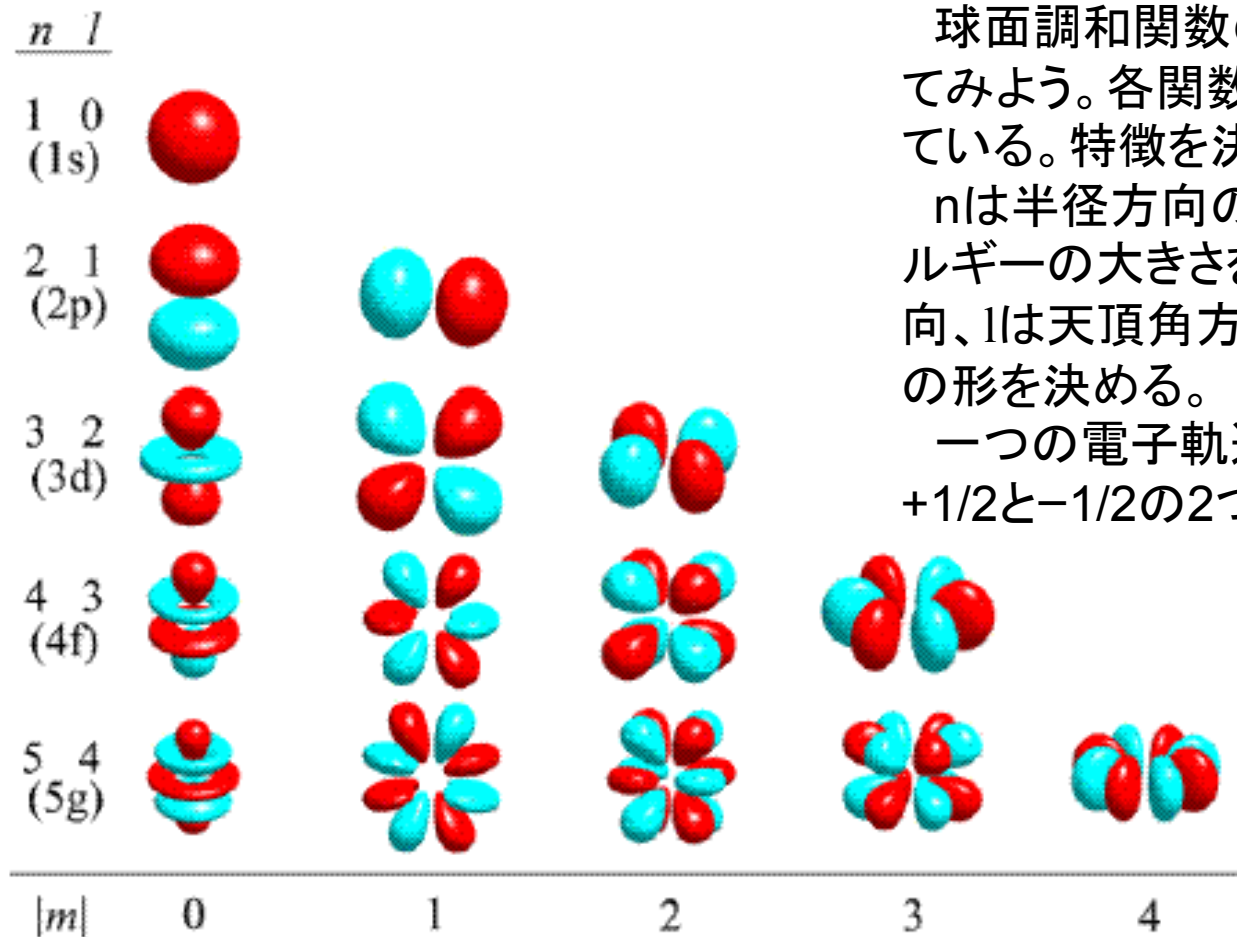
何れも座標に対して振動する関数なので、一般に狸の尻尾のようなコブやドーナツが組み合わさった複雑な形になる。

両者をまとめたものを球面調和関数と呼ぶ。



ルジャンドル関数は名前を聞くと一見難しそうだが、実はZ軸に関する多項式展開に過ぎない。

水素原子の電子軌道



球面調和関数の形をいくつか見てみよう。各関数を電子軌道と言っている。特徴を決める変数の、

n は半径方向の波打回数で、エネルギーの大きさを決める。 m は周方向、 l は天頂角方向の波打で、こぶの形を決める。

一つの電子軌道にはスピンの $+1/2$ と $-1/2$ の2つの電子が入れる。

電子は n が小さい軌道から埋めていく。 n が大きくなるほど軌道に節が増えて細かく分かれる。

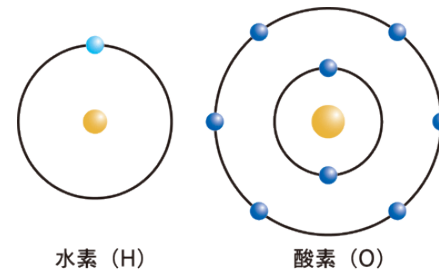
酸素と水素の電子軌道

大ざっぱな話、節が多いと波長が短くなり、振動数が増えてエネルギーが上がる。また、電子はスピン $\pm 1/2$ がペアで安定になる。

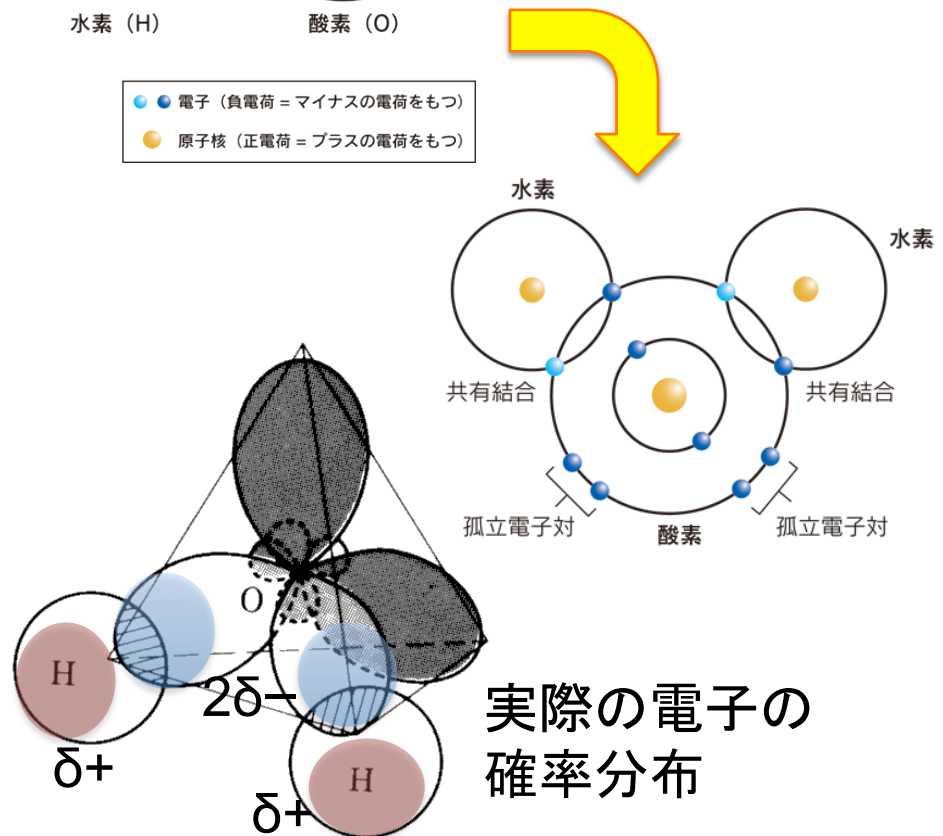
水素は電子1個なので、一番エネルギーの低い1s軌道($n=1, l=0$)に入り、席が1個分空いていて不安定になる。

酸素は1sから埋め、2sと2p($n=2, l=0, 1$)に6個まで電子が入るが、2個分空いていて電子を欲しがる。

量子力学では、電子は確率的に振る舞い、完全に酸素に取り込まれるのではなく、やや酸素寄りの分布を取って安定になる。



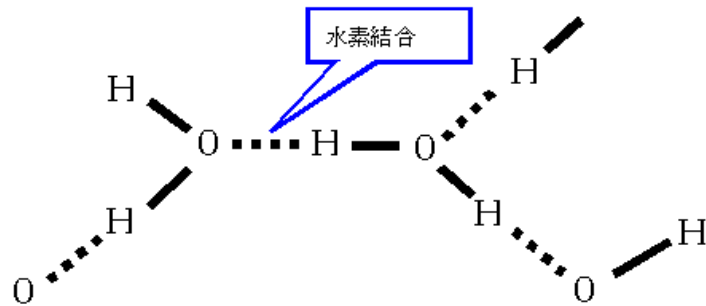
酸素の軌道に水素の電子が引き込まれる。



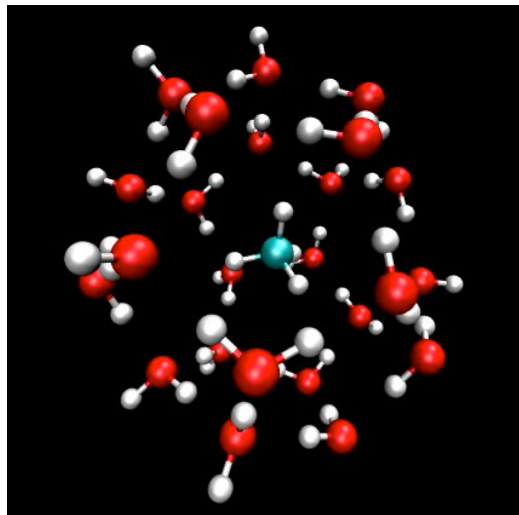
水の構造

水素結合

電気力による弱い結合



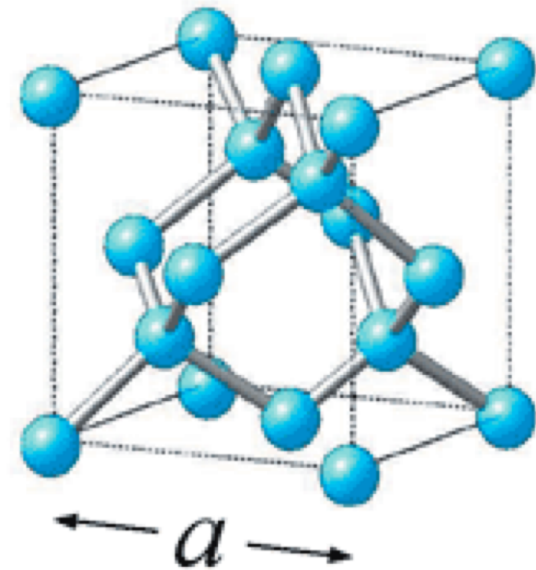
図ー1 水素結合をした水の巨大分子



メタンハイドレート

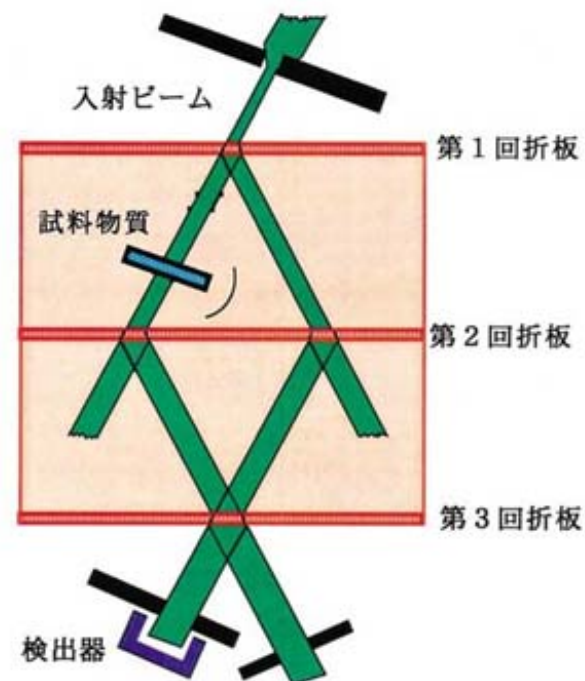
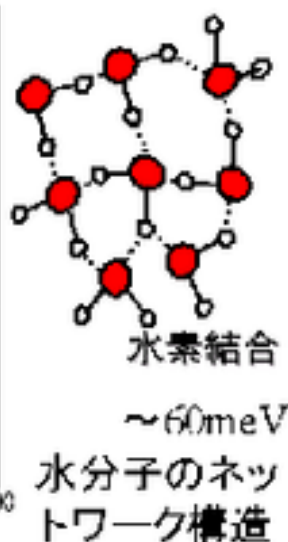
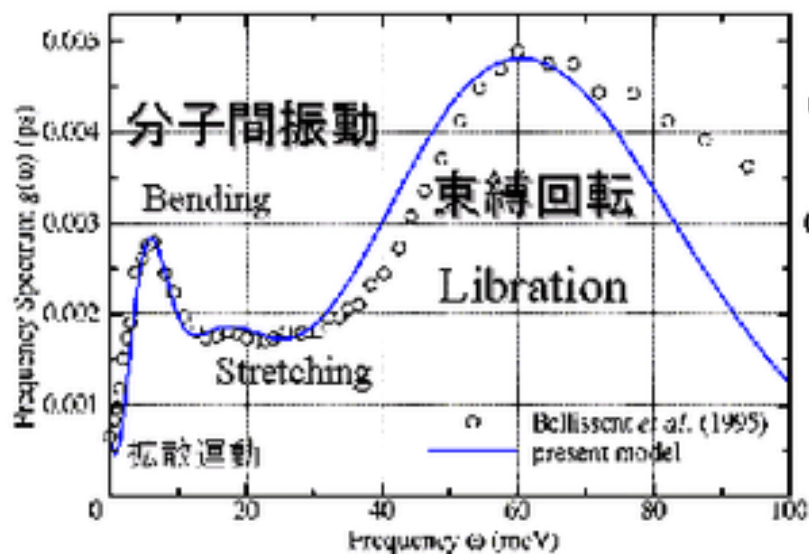
水分子は酸素のマイナスと水素のプラス電荷の間に水素結合を作る。このため水は液体でありながら、局所的に結晶構造をとっている。

このことが、水に特殊な性質を与える。



ダイヤモンド結晶

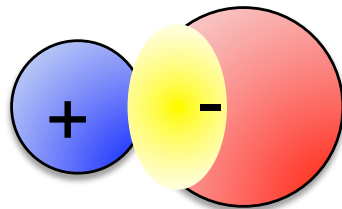
中性子回折による構造解析



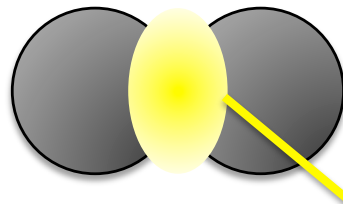
http://www.ne.t.kyoto-u.ac.jp/ja/research/introduction/laboratory/neutron_t

日本原子力研究所 先端基礎研究センター 超低温中性子散乱研究グループ 富満 廣

弱い結合

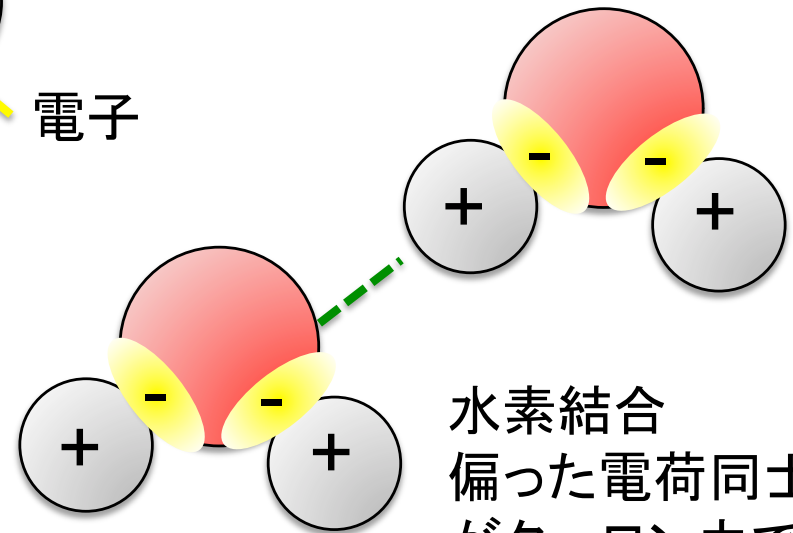


イオン結合
電子が偏り、
水中では結合
が切れる。

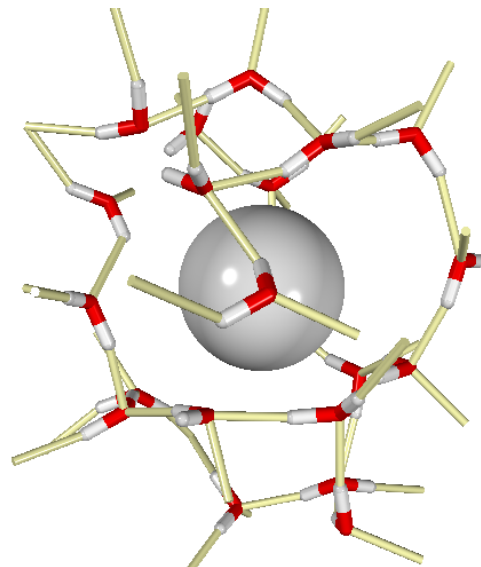


共有結合
強い結合

電子



水素結合
偏った電荷同士
がクーロン力で
引き合う



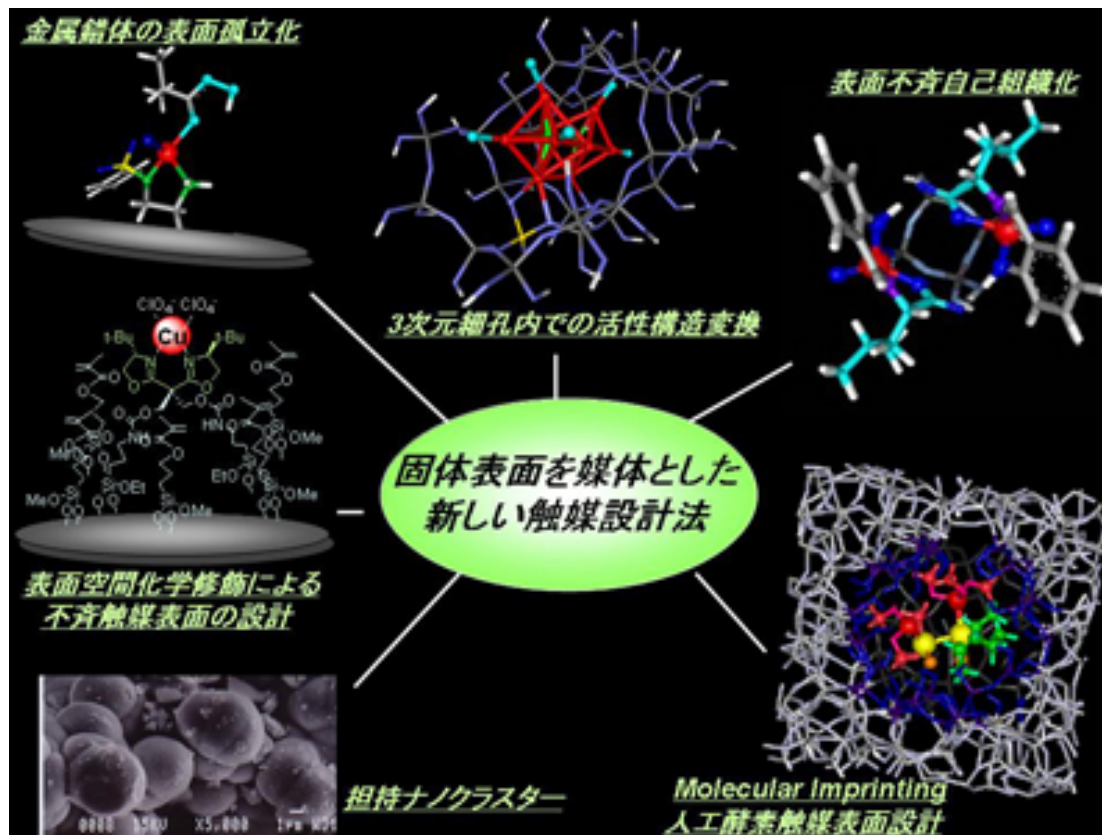
疎水性相互作用
水素結合によって引き合
う水から油がはじき出さ
れる。

弱い結合のエネルギー

水素結合に由来する弱い結合	結合	エネルギー/mol	分子の1つのエネルギー
	共有結合	400kJ/mol	4eV
	水素結合	<10kJ/mol	100m eV
	イオン結合	<10kJ/mol	100m eV
	疎水性相互作用	<10kJ/mol	100m eV
	SS結合	400kJ/mol	4eV
	熱運動	2.5kJ/mol	25m eV

生物は、水素結合に由来する弱い結合を利用して、熱振動でいどのエネルギーで化学構造を変えていくことができる。

触媒効果

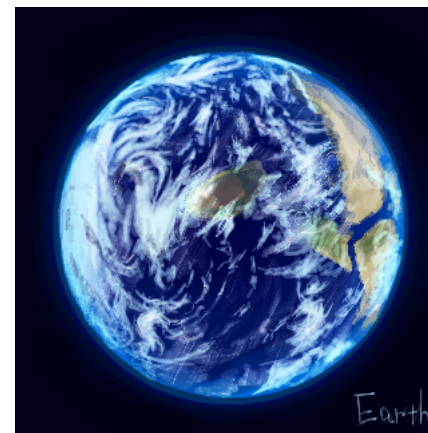


弱い結合を組み
合わせることで、
化学結合を切る
だけの電子の変
化を引き起こす。

表面の電子構造との相互作用で化学反応が進む。

水のお陰で・・・

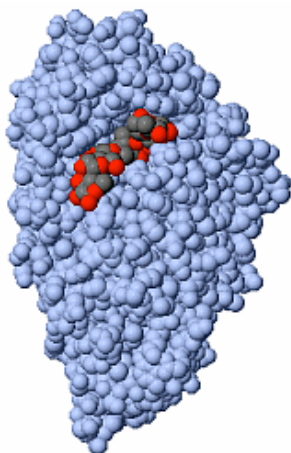
地球の環境は水の比熱のお陰で温和になる。



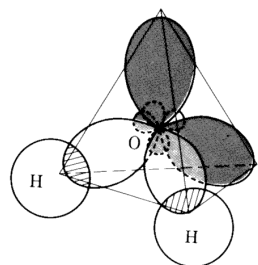
細胞は体液の中で酸素と栄養を供給される。



弱い結合のお陰で
酵素反応が実現する。



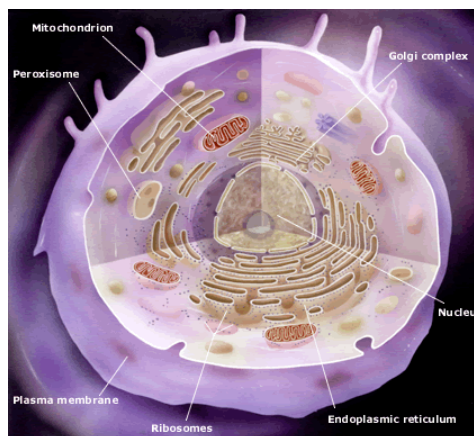
量子効果で
水ができる。



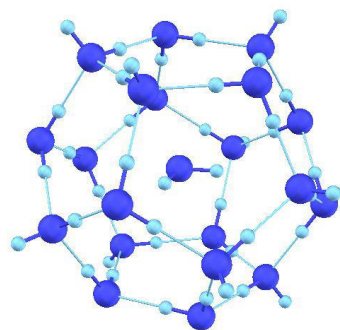
生物は水の中で/水を飲んで
生きている。



酵素反応が組み合わ
さって細胞が機能する。



水の分極が水素結合と
弱い結合を可能にする。



今日はここまで一休み



解析力学的表記

ニュートンの運動方程式は3次元直交座標で考えるために作られた。
だから一般の座標系で考えることは難しい。

一般座標 q_i で運動方程式を考える際は、運動方程式はラグランジアン L を使って以下の形で表す。ただし、 p_i は座標に対し共役な運動量である。

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad \dot{q}_i = -\frac{\partial L}{\partial p_i}$$

なぜそうなるか、知りたい人には解析力学の教科書を読んでもらうとして、運動方程式が非常にキレイな連立1階の微分方程式になってしまうことが分かった。

この式を使うと、運動量が何らかの関数 L の空間1階微分であることが分かる。

L は作用の次元を持つ。作用は、波動関数の位相の進行量。プランク定数 h の次元。共役な座標と運動量の積。様々な意味をもつが、物理現象の進行の程度を表すと考えてはどうだろうか？

共役な物理量

何でラグランジアンなんて恐ろしげで面倒なモノを持ち出したのか？
実は、共役な座標 q と運動量 p は、波動関数の座標 r と波数 k に相当する。

$$q=r \qquad p=\hbar k$$

これは偶然ではなく、我々が波の波数を運動量として認識していただけである。そして、時間も座標の一つなので共役量が存在する。

$$q=t \qquad E=\hbar\omega$$

時間の共役量はエネルギーで、波数に当たるのは角周波数 ω である。
時間でも空間でも、座標と共役量(周波数・波数)の積は角度で、位相変化を表す量になる。それにプランク定数を掛けるとまさに「作用」の大きさを表す。

実は、世の中の現象は波動関数の位相変化＝作用によって、かなり規定されている。

物理現象には作用以外にも様々な保存量があり、それらの組み合わせが世の物理現象を決めている。