

# 目 次

1 序 論	1
2 波動力学	
2-1 等速円運動と単振動	6
2-2 波 動	8
2-3 波動方程式	10
2-4 波動関数と波動方程式の性質	12
2-5 原子単位系	15
3 水素原子の波動力学	
3-1 水素原子のシュレディンガー方程式	18
3-2 波動方程式の座標変換と変数分離	20
3-3 角成分方程式の解	21
3-4 角関数の性質	24
3-5 球面調和関数の実数型表示	25
3-6 動径方程式の解	27
3-7 動径波動関数の性質	30
付 録 3A 極座標におけるラプラシアン	37
3B 演算子の直交座標から極座標への座標変換	39
3C 角運動量	44
3D ルジャンドル陪微分方程式とルジャンドル陪関数	47
3E ラゲール陪多項式	52
4 多電子原子の原子軌道	
4-1 一電子近似とセルフ・コンシステント・フィールド法	56
4-2 軌道電子による原子核の遮蔽効果	58
4-3 スレーター型軌道	59
4-4 ハートリーのセルフ・コンシステント・フィールド法	60
4-5 ハートリー・フォック法	62
4-6 ハートリー・フォック・スレーター法	65

4-7	原子構造理論	69
<b>付録</b>	<b>4A</b> ハートリー法における全エネルギーと一電子方程式	73
	<b>4B</b> ハートリー・フォック法における交換相互作用	77
	<b>4C</b> $X\alpha$ 法における交換ポテンシャル	81
	<b>4D</b> ハートリー・フォック・スレーター方程式	86
	<b>4E</b> スレーターの遷移状態法	91
	<b>4F</b> 相対論による原子の波動方程式	101
<b>5</b>	<b>分子軌道論</b>	
5-1	分子のポテンシャルと LCAO 法	112
5-2	分子軌道法	113
5-3	等核 2 原子分子の分子軌道	118
5-4	マリケンの電子密度解析	121
5-5	異核 2 原子分子の電子状態	122
<b>付録</b>	<b>5A</b> 分子の対称性	126
<b>6</b>	<b>簡単な分子の分子軌道</b>	
6-1	$H_2O$ 分子の分子軌道	130
6-2	$NH_3$ 分子と $CH_4$ 分子の分子軌道	135
6-3	等核 2 原子分子の化学結合と多重結合	142
<b>付録</b>	<b>6A</b> 原子軌道間の重なり積分の評価	145
	<b>6B</b> 軌道の混成	156
	<b>6C</b> 電子分光	160
	<b>6D</b> 分子軌道計算の実際— $DV-X\alpha$ 法—	169
<b>7</b>	<b>オキソアニオンの分子軌道</b>	
7-1	オキソアニオンの構造	178
7-2	$BF_3$ の分子軌道	181
7-3	$BO_3^{3-}$ , $CO_3^{2-}$ , $NO_3^-$ の電子状態と結合性	184
7-4	$SiO_4^{4-}$ , $PO_4^{3-}$ , $SO_4^{2-}$ , $ClO_4^-$ の電子状態と結合性	185
7-5	$CrO_4^{2-}$ , $MnO_4^-$ の電子状態と結合性	187
<b>付録</b>	<b>7A</b> 物質中の原子間距離	189
<b>8</b>	<b>遷移金属錯体の電子状態と化学結合</b>	
8-1	金属錯体の化学結合	206
8-2	金属錯体の分子軌道	207

8-3	$\text{CrO}_4^{2-}, \text{MnO}_4^-$ の電子状態	209
8-4	d 軌道レベルの配位子場分裂	210
8-5	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 錯体の電子状態	212
8-6	Co(III) 錯体の化学結合と分光化学系列	215
付録	8A スピン分極	217

## 9 金属化合物の電子状態と化学結合

9-1	金属酸化物	227
9-1-1	金属酸化物の分類	227
9-1-2	典型元素酸化物	229
9-1-3	遷移金属酸化物	232
9-1-4	岩塩型, コランダム型およびルチル型構造の遷移金属酸化物	235
9-2	金属化合物	238
9-2-1	岩塩型化合物	238
9-2-2	ヒ化ニッケル型化合物	242
9-2-3	閃亜鉛鉱型化合物	247
9-2-4	ウルツ鉱型化合物	250
9-2-5	結晶構造の違いによる化学結合性の違い	253
付録	9A イオン結晶中の静電場	257

## 10 分子と電磁波との相互作用

10-1	電磁波	261
10-2	輻射の遷移確率に関するアインシュタインの理論	262
10-3	電磁場中におけるハミルトニアンと摂動項	264
10-4	分子と電磁波との相互作用	265
10-5	電磁波の吸収および放出の遷移確率	267
10-6	光イオン化過程の理論	272
付録	10A ラグランジェ方程式およびハミルトン方程式	279
	10B 摂動論	286
	10C 電磁気学における基本的法則とマクスウェルの方程式	292
	10D 電磁波の波動方程式と波動関数	297
	10E プランクの熱輻射理論	300

索引		303
----	--	-----

## 電子書籍



計算実習編 (Windows 対応ソフト付) は DL マーケットで販売しています。  
ソフトには下記の項目が入っています。本編と併せてご使用下さい。



DV-X $\alpha$ , IIIA, IIIB, IVA, VA, VIA, IXA

定価(本体 2,000 円) + 税

## 量子材料化学の基礎-計算実習編 (Windows 対応ソフト付)

### 目 次

- IIIA 動径波動方程式の数値計算 (Numerov 法)
- IIIB 水素様原子の動径波動関数
  
- IVA 原子構造計算プログラム “ATOMXA”
- IVB 原子核近傍での電子構造計算
  
- VA 2 原子分子の永年方程式
  
- VIA 原子軌道間の重なり積分の評価 “プログラム OIA” の説明
- VIB DV-X $\alpha$  計算 CO 分子
  
- VIIA DV-X $\alpha$  計算 NO<sub>3</sub><sup>-</sup> イオン
- VIIIB DV-X $\alpha$  計算 ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> と MnO<sub>4</sub><sup>-</sup> イオン
  
- VIIIA DV-X $\alpha$  計算 [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup> 錯体
- VIIIB DV-X $\alpha$  計算 Ti<sub>2</sub> クラスターのスピン状態
  
- IXA マーデルング場の計算
- IXB DV-X $\alpha$  計算 MgO クラスタ
- IXC DV-X $\alpha$  計算 Fe 酸化物
  
- XA DV-X $\alpha$  計算 オキソアニオンの L<sub>2,3</sub> 蛍光 X 線スペクトル
- XB DV-X $\alpha$  計算 SF<sub>6</sub> の X 線吸収スペクトル
- XC DV-X $\alpha$  計算 CO 分子の X 線光電子スペクトル