

# 目 次

## 第 3 編 化学物理 A

### 第 1 章 化学結合論

小谷正雄・柿内賢信・新楽和夫

1.1	分子構造の序説	1
1.1.1	分子のエネルギー準位	1
1.1.2	電子の運動と核の運動との分離 (その 1)	5
1.1.3	電子の運動と核の運動との分離 (その 2)	8
1.2	多原子分子の振動および回転	14
1.2.1	原子核系の運動	14
1.2.2	分子の回転	16
1.2.3	多原子分子の振動	19
1.3	水素分子の電子状態	21
1.3.1	分子軌道函数法 (MO 法)	22
1.3.2	ハイトラー・ロンドン法 (HL 法), 分子軌道函数法との関係	30
1.3.3	その他の方法	43
1.4	化学結合の序説	46
1.4.1	化学結合の種類	46
1.4.2	原子軌道・混成軌道・原子価状態	49
1.5	イオン結合	53
1.6	共有結合	55
1.6.1	LCAO MO	55
1.6.2	電子対結合	63

1.6.3	SCF MO	70
1.6.4	SCF MO の解釈	74
1.7	$\pi$ 電子的結合	77
1.7.1	2重結合, 3重結合	77
1.7.2	共役2重結合 (MO法)	85
1.7.3	共役2重結合 (半経験的 MO法)	92
1.7.4	共役2重結合 (HL法)	101
1.8	錯塩の化学結合	106
1.8.1	錯イオン	106
1.8.2	イオン結合 (弱い結晶場)	108
1.8.3	イオン結合 (強い結晶場近似)	113
1.8.4	共有結合 (MO法)	116
1.8.5	共有結合 (HL法)	121
1.9	分子場と原子核の相互作用	124
1.9.1	電氣的相互作用	124
1.9.2	四極相互作用	126
1.9.3	磁氣的相互作用	129
1.9.4	分子における核四極相互作用	133
1.9.5	分子における磁気相互作用	139
1.10	附 録	155
1.10.1	群 論	155
1.10.2	結合固有函数の方法	175

## 第2章 固体の凝集機構

森 田 章

2.1	固体の凝集機構による分類	179
2.1.1	分子性結晶	180
2.1.2	イオン結晶	181

2.1.3	金 属	181
2.1.4	共有結合結晶	182
2.2	分子性結晶の凝集エネルギー	183
2.2.1	分子間ポテンシャル	183
2.2.2	分子性結晶の凝集エネルギー	186
2.3	イオン結晶の凝集エネルギー (古典的取扱)	192
2.3.1	静電エネルギー	192
2.3.2	斥力によるエネルギー	195
2.3.3	補正エネルギー (ファン・デア・ワールス) エネルギー, 零点エネルギー, etc)	198
2.3.4	Born-Haber の熱化学的輸業過程	199
2.3.5	イオン結晶の格子型とその安定性	201
2.3.6	イオン半径	203
2.4	イオン結晶の凝集エネルギー (量子力学的取扱)	203
2.4.1	一般論	204
2.4.2	イオン結晶の凝集エネルギー	209
2.4.3	計算例	213
2.4.4	局在結晶軌道の方法 (凝集エネルギー理論の改良)	217
2.5	金属の凝集エネルギー	219
2.5.1	簡単な考察	219
2.5.2	電子間の交換エネルギー	222
2.5.3	反平行スピンを持つ電子間の相関エネルギー	225
2.5.4	週期場内の伝導電子のエネルギー準位を求める方法	230
2.5.5	金属の凝集エネルギー	238
2.5.6	金属の凝集エネルギーの半経験的取扱い	247
2.6	共有結合結晶の凝集エネルギー	249
2.6.1	Pauling-Slater の方法	250
2.6.2	局在結合軌道の方法および局在結晶軌道の方法	255

文 献	257
-----	-----

### 第3章 反 応 論

#### 大 鹿 譲

3.1	化学反応	261
3.2	反応速度式	264
3.3	素 反 応	268
3.4	定常状態法の吟味	275
3.5	アレニウスの式と衝突論	277
3.6	1分子反応と活性化の機構	280
3.7	断熱ポテンシャル面と遷移状態	284
3.8	遷移状態理論	287
3.9	遷移状態の概念と透過係数	290
3.10	非断熱反応	295
3.11	単分子反応の理論	298
3.12	断熱ポテンシャル面の決定	303
3.13	分子軌道法の応用	308
3.14	準平衡仮定	312
3.15	有機電子論	316
	文 献	320
	索 引	1~6