



# 目 次

## 上 卷

写	真(著者)
序	文
訳	者 序

## 第 I 部 経験的方法

### 第 I 章 化学における量子力学的方法の必要性

### 第 II 章 量子化学の若干の重要な結果

II-1	量子力学の確率的性格	8
II-2	原子構造および分子構造の簡単な描写	11
II-3	化学反応性	20

### 第 III 章 量子力学の原理

III-1	1個の粒子の運動	26
III-2	数個の電子の運動 軌道の概念	34

### 第 IV 章 二、三の簡単な計算法

IV-1	序	39
IV-2	LCAO 近似	41
IV-3	LCAO の係数の決定	43
IV-4	Hückel 近似	46
A	軌道エネルギー	46
B	係数 $C_{ij}$	51
C	係数の物理的意味	53
D	非結合軌道	59
IV-5	重なり積分の導入 Wheland 近似	60
IV-6	Pauling と Wheland による近似	62

IV-7	LCAO 近似における摂動法	72
A	分極率の方法	72
B	分子をその部分から組上げる方法	75
IV-8	LCBO (Linear Combination of Bond Orbitals) 近似	82
IV-9	スピンと Pauli の原理	85
IV-10	Slater 函数 (又はスピン状態) の方法	90
IV-11	原子価結合 (Valence Bond, V. B.) 近似	100

## 第 V 章 原子間隔の理論

V-1	序	108
V-2	原子間隔の実験的決定	108
V-3	原子間隔の理論的決定	109
V-4	多原子分子中の隣接原子	110
V-5	多原子分子中の強い結合の長さ：結合半径	113
V-6	結合次数の定義	116
A	分子軌道の近似	116
B	原子価結合および Slater 函数の近似	117
C	種々の方法の比較	123
D	若干の拡張と改良	125

## 第 VI 章 結合角の理論

VI-1	序	127
VI-2	結合角の実験値	127
VI-3	波動函数の反対称性の役割と最も可能性の大きい形状	134
VI-4	原子軌道	136
VI-5	軌道の混成 (Hybridization)	140
VI-6	環 (Ring) と歪んだ結合 (Bent Bond)	147
VI-7	アレンおよびアセチレン	154

## 第 VII 章 結合, 解離, 共鳴, イオン化エネルギー

VII-1	序	156
VII-2	飽和炭化水素の結合および解離エネルギーの計算	161

VII-3	共軛分子の共鳴エネルギーの計算	165
VII-4	イオン化エネルギーの計算	168

## 第 VIII 章 励起エネルギー・紫外および可視部の吸収スペクトル・分子の色

VIII-1	序	171
VIII-2	共軛炭化水素のスペクトル	175
VIII-3	ヘテロ原子を含む共軛分子のスペクトル	178
A	$\pi \rightarrow \pi$ 遷移	178
B	$n \rightarrow \pi$ 遷移	179
VIII-4	共軛分子のスペクトルの置換基の効果	182

## 第 IX 章 電子密度と双極子能率

IX-1	分子中の電子密度	188
IX-2	双極子能率の定義と性質	190
IX-3	非局在結合による双極子能率	193

## 第 X 章 スペクトルの強度・紫外部および可視部の吸収

X-1	電子遷移の平均振動子強度の計算	200
X-2	スペクトル遷移の偏り	205
X-3	強度によるスペクトル帯の帰属	206

## 第 XI 章 化学反応性の理論・反応速度

XI-1	序	207
XI-2	活性錯合体とポテンシャル障壁	209
XI-3	平衡と分配函数	211
XI-4	速度定数の式	215
XI-5	交互共軛炭化水素の置換反応の機構	219
XI-6	非交互炭化水素分子, ヘテロ, 原子を含む共軛分子, または置換基を含む共軛分子の置換反応	233
XI-7	飽和した炭素原子への置換反応	236
XI-8	附加反応	240

XI-9	光化学反応	247
<b>第 XII 章 化学反応性の理論・平衡定数</b>		
XII-1	序	251
XII-2	酸-塩基の平衡, 酸および塩基の強度	253
XII-3	酸化還元電位	256
XII-4	互変異性	259
XII-5	遊離基の安定性	261
XII-6	バイラジカル	263
XII-7	Hammett の定数	266
<b>第 XIII 章 生化学的応用・共軛分子の発癌力</b>		
XIII-1	序	268
XIII-2	電子の電荷と発癌力	268
XIII-3	発癌活性と若干の反応論的性質	271

1), 2), は原著者脚註

\* は訳者脚註

## 下 卷 内 容

### 第 II 部 非経験的及び半経験的方法

第 XIV 章 経験的方法に対する批判

第 XV 章 量子力学

第 XVI 章 一電子系

第 XVII 章 ヘリウム電子

第 XVIII 章 水素分子

第 XIX 章 軌道近似

第 XX 章 エチレンとベンゼン

第 XXI 章 最近の発展

附録 I 永年方程式の展開と解法

II SCF 方程式

III 原子積分の計算

索 引

