

目 次

下 卷

第 II 部 非経験的および半経験的方法

第 XIV 章 経験的方法に対する批判

1. 序	277
2. 独立電子モデル	278
3. 分子軌道函数の形	279
4. 電荷分布	280
5. その他の難点	280

第 XV 章 量子力学の方法

1. 序	282
2. Schrödinger 方程式	282
3. Born-Oppenheimer 近似	283
4. Schrödinger 方程式のベクトルの解釈	285
5. Schrödinger 方程式の行列形式	287
6. ハミルトニアン演算子の性質	289
7. 波動方程式の解の性質	290
8. 変分定理	292
9. 変分定理の一次函数への適用	293
10. 摂動論	295
A 縮重のない準位	295
B 縮重した準位	297
11. 永年方程式の簡単化	299
A 系の角運動量	301
B 同等な粒子の座標の置換	302
12. 軌道角運動量	302
13. スピン角運動量	305

IV

14. 電子状態の分類	306
15. 2原子分子における空間対称性	307
A 等核2原子分子	307
B 異核2原子分子	311
16. 別の種類の空間対称性	311
17. 交換しない操作をもつ有限群	318
18. 交換しない操作をもつ群の単純指標の表	324
19. 表現の直積	325
20. 電子遷移に関する選択則	327

第 XVI 章 一 電 子 系

1. 序	331
2. 水素原子およびそれと等電子のイオン	331
A 波動関数	331
B 水素原子のエネルギー準位	334
C 等電子イオン (Isoelectronic Ions)	335
3. 水素分子イオン	336
4. 分子軌道近似	339
5. 併合原子 (united atom) の方法	345
6. H_2^+ に対する相関図	347
7. 二つの異なる核に対する相関図	350

第 XVII 章 ヘリウム原子

1. 序	352
2. ヘリウムの基底状態に対する独立電子モデル	352
3. 励起状態の波動関数の構成	354
4. 基底状態のエネルギーの改良法	362
A 変分法	362
B Self-Consistent Field (SCF) (自己無撞着場) の方法	363
C ヘリウムのもっと精密な取扱い	364
D 配置間相互作用 (Configuration Interaction) の計算	367

第 XVIII 章 水 素 分 子

1. 序	374
2. MO 近似	374
3. 水素分子の基底状態に対する LCAO-MO 近似	377
4. SCF の方法。SCF の方法に対する近似	383
5. 相関を考慮した分子軌道法	386
6. 配置間相互作用	386
7. 水素分子の基底状態についての最も正確な計算	392
8. 水素分子の基底状態に対する原子価結合法 (VB 法) の近似。Heitler-London の計算	393
9. 経験的原子価結合法の吟味	395
10. 改良された原子価結合	397
11. 準局在軌道	399
12. 結 論	400

第 XIX 章 軌 道 近 似

1. 序	403
2. 独立電子モデル	403
3. スピン多重度	405
4. S^2 演算子の固有函数	409
5. 射影演算子	415
6. 空間縮重	418
7. 直線分子の空間縮重	420
8. 非直線分子における空間対称	420
A 縮重表現のない場合	420
B 縮重した表現をもつ場合	422
9. SCF 軌道	427
10. SCF 原子軌道 SCF-MO	428
11. SCF MO	436
A Roothaan の方程式	436

VI

B	SCF ハミルトニアン of 行列要素の計算	440
C	対称性にもとづく簡単化	440
D	基底状態のエネルギーの計算	442
E	全ハミルトニアン of Slater 行列式についての行列要素の計算に関する 二, 三の規則	445
F	イオン化ポテンシャル	446
G	励起エネルギー	447
12.	配置間相互作用	449

第 XX 章 エチレンとベンゼン

1.	序	452
2.	16電子問題及び2電子問題としてのエチレン	452
3.	分子積分の計算—Goepfert-Mayer と Sklar のポテンシャル	461
4.	配置間相互作用	465
5.	4電子問題としてのエチレン	466
6.	π - σ 相互作用	471
7.	その他の取扱い	472
A	有効核荷電の変化	472
B	$3p\pi$ 軌道を含める計算	473
8.	半経験的な取扱い Pariser と Parr の方法	474
A	より簡単な計算方法によって非経験的に得た結果を再現すること	474
B	実験結果に合わせる事	479
9.	ベンゼン, Goepfert-Mayer と Sklar の取扱い	480
10.	GMS 計算の改良	486
11.	実験結果との比較	487
12.	Pariser と Parr によるベンゼンの取扱い	489
13.	ベンゼンの自由電子モデル	490

第 XXI 章 最近の発展

1.	序	492
2.	非経験的な方法	493

A	Goepfert-Mayer と Sklar の計算の拡張	493
B	交換項を含めたポテンシャル	494
C	完全な SCF-LCAO-MO の計算	497
D	もっと精密な計算	498
3.	半経験的な計算	499
A	共軛交互炭化水素に対する半経験的 SCF LCAO-MO 法	499
B	交互炭化水素の最も低い励起状態	503
C	ヘテロ分子	506
D	Atoms in Molecules の方法	508
4.	増大する Digital 計算機の重要性	511
附録 I	永年方程式の展開と解法	514
附録 II	SCF 方程式	522
附録 III	原子積分の計算	533
	索引	