



## 目 次

はしがき

第1章 序 説 .....	1
§1 分子間の引力と斥力 .....	1
§2 水素原子間の化学結合とヘリウム原子間の斥力 .....	4
§3 van der Waals の状態式 .....	7
§4 マクロな物体の間の van der Waals 引力 .....	9
第2章 分子の対称性 .....	12
§5 分子の骨ぐみ .....	12
§6 原子の基底状態 .....	14
§7 線形分子 .....	17
§8 線形でない分子 .....	19
第3章 分子の静電的な特性 .....	23
§9 分 極 率 .....	23
§10 原子が電子を引きつける力の強弱 .....	24
§11 双極子, 四重極, および八重極 .....	26
§12 水素結合 .....	30
第4章 分散力のポテンシャル .....	34
§13 分極率の分散特性 .....	34
§14 時間を含まない摂動 .....	36
§15 2分子間の引力ポテンシャル .....	38

§ 16	3分子間のポテンシャル	45
§ 17	一軸性対称分子の場合	48
第5章	気体の状態式	52
§ 18	ビリアル係数とクラスター係数	52
§ 19	ガンマ関数	56
§ 20	クラスター係数の零点と臨界温度	58
§ 21	正準分布	63
§ 22	大きい正準分布	68
§ 23	クラスター積分	71
§ 24	球対称の井戸型ポテンシャル	74
第6章	Lennard-Jones ポテンシャル	80
§ 25	第2ビリアル係数	80
§ 26	3体クラスター積分	83
§ 27	4体, 5体のクラスター積分	89
§ 28	クラスター積分への量子効果	91
§ 29	異種希ガス原子間のポテンシャル	101
第7章	凸体をコアにもつポテンシャル	104
§ 30	コア・ポテンシャルと凸体の基本量	104
§ 31	Steiner の公式	106
§ 32	石原-Hadwiger の公式	111
§ 33	コア・ポテンシャルによる第2ビリアル係数	114
§ 34	3凸体問題	121
§ 35	多原子分子の3体クラスター積分	126

第 8 章 分子の向きにより深さの異なる ポテンシャル	130
§ 36 多重極の役割	130
§ 37 四重極と組み合わせたコア・ポテンシャル	133
§ 38 $H_2, N_2, O_2, CO_2$ の分子間ポテンシャル	136
第 9 章 結晶の構造を現わす分子モデル	147
§ 39 結晶構造の対称性	147
§ 40 四重極球による $Pa3$ 構造の表現	151
§ 41 一軸性四重極を有する縦に長い分子の結晶	153
§ 42 一軸性四重極を有する横に広い分子の結晶	160
§ 43 八重極の対称性を有する分子の結晶	165
§ 44 $UF_6$ の対称性を有する分子の結晶	169
第 10 章 気体の粘性と熱伝導度	176
§ 45 気体分子の速度分布関数	176
§ 46 Boltzmann 方程式	179
§ 47 Boltzmann の H 定理と Maxwell の速度分布	182
§ 48 Maxwell 分布に近い速度分布	185
§ 49 粘性率を表わす式	190
§ 50 熱伝導度を表わす式	194
§ 51 Lennard-Jones ポテンシャルでの $\Omega^{(l,r)}$	201
§ 52 輸送係数より定めた希ガス原子間のポテンシャル	205
第 11 章 気体における拡散と熱拡散	208
§ 53 2 成分気体	208
§ 54 拡散係数	211

§ 55 同位体間の熱拡散 .....	214
§ 56 多原子分子の凸体モデル .....	218
§ 57 輸送現象へのコア・ポテンシャルの応用 .....	220
参考書と文献 .....	225
分子索引 .....	229
事項索引 .....	232

