

# 目 次

---

<b>第 1 章 結合と構造の実験傾向</b> .....	1
1.1 はじめに.....	1
1.2 純元素の構造.....	1
1.3 格子タイプ: Pearson 記号.....	5
1.4 局所配位多面体: Jensen 記号.....	7
1.5 元素の結合と構造傾向.....	11
1.6 AB 化合物中の結合と構造傾向.....	12
1.7 分子の構造傾向.....	18
参考文献.....	20
<b>第 2 章 量子力学の基本概念</b> .....	21
2.1 はじめに.....	21
2.2 波動-粒子の二重性.....	21
2.3 Heisenberg の不確定性原理.....	27
2.4 Schrödinger 方程式.....	30
2.5 自由電子ガス.....	32
2.6 自由原子.....	37
2.7 量子力学による構造の予言.....	47
参考文献.....	51
<b>第 3 章 分子の結合</b> .....	53
3.1 はじめに.....	53
3.2 s 価電子二量体のボンド形成.....	53
3.3 電気陰性度.....	61
3.4 水素二量体の解離.....	65
3.5 $\sigma$ , $\pi$ と $\delta$ ボンド.....	70
3.6 sp 価電子二量体のボンド形成.....	73
3.7 混成軌道.....	79
参考文献.....	82

<b>第 4 章</b>	<b>分子の構造</b> .....	83
4.1	はじめに.....	83
4.2	構造安定性：説明に役立つ実例.....	84
4.3	構造エネルギー差定理.....	89
4.4	s 価電子分子の構造.....	91
4.5	構造傾向の起源：モーメント定理.....	98
4.6	ボンドオーダー.....	104
4.7	3 原子分子：直線と屈曲.....	108
	参考文献.....	115
<b>第 5 章</b>	<b>sp 価電子金属の結合</b> .....	117
5.1	はじめに.....	117
5.2	ジェリウム：小さい分子からバルクへ.....	118
5.3	バンド理論の一般原理.....	122
5.4	ほとんど自由な電子の近似.....	129
5.5	擬ポテンシャル.....	131
5.6	sp 価電子金属における金属結合の性質.....	138
5.7	埋め込み原子ポテンシャル.....	142
	参考文献.....	147
<b>第 6 章</b>	<b>sp 価電子金属の構造</b> .....	149
6.1	はじめに.....	149
6.2	遮蔽：Thomas-Fermi 近似.....	149
6.3	遮蔽：線形応答理論.....	152
6.4	逆格子表示.....	159
6.5	実空間表示.....	164
6.6	構造傾向.....	171
6.7	Hume-Rothery 電子相.....	182
	参考文献.....	186
<b>第 7 章</b>	<b>遷移金属と半導体の結合</b> .....	189
7.1	はじめに.....	189
7.2	強束縛近似.....	190
7.3	NFE-TB 混成バンド.....	195

7.4	遷移金属の金属結合の性質 .....	199
7.5	矩形 d バンドモデルによる凝集 .....	205
7.6	矩形 d バンドモデルによる生成熱 .....	209
7.7	半導体の飽和結合 .....	218
	参考文献 .....	227
<b>第 8 章</b>	<b>固体の構造傾向</b> .....	<b>229</b>
8.1	はじめに .....	229
8.2	飽和ボンド 対 不飽和ボンド .....	229
8.3	sp 価電子元素の構造傾向 .....	235
8.4	モーメントによる解釈 .....	240
8.5	sd 価電子元素の構造傾向 .....	244
8.6	磁性による異常構造 .....	248
8.7	pd 結合した AB 化合物の構造傾向 .....	254
8.8	ボンドオーダーポテンシャル .....	261
	参考文献 .....	263
<b>問 題</b>	.....	<b>265</b>
<b>索 引</b>	.....	<b>273</b>