

## 目次

第 1 章	はじめに	1
第 2 章	原子の電子状態	3
2.1	原子軌道	3
2.1.1	波動関数とエネルギー固有値	3
2.1.2	スピンと Zeeman 効果	7
2.1.3	結晶場分裂	9
2.1.4	混成軌道	12
2.2	Hartree-Fock 近似	14
2.2.1	Hartree 近似	16
2.2.2	Hartree-Fock 近似	19
2.2.3	Koopmans の定理	26
2.2.4	結晶場の効果	32
2.3	多重項構造	33
2.3.1	多重項構造の一般論	33
2.3.2	近似的な多重項構造	39
2.3.3	多重項理論	40
2.4	周期律	45
第 3 章	分子の電子状態	49
3.1	Heitler-London 法	51
3.1.1	水素分子	51
3.1.2	多原子分子への拡張：共鳴原子価状態	56
3.1.3	電荷移動の効果	58

3.1.4	スピン自由度	62
3.2	分子軌道法	64
3.2.1	制限 Hartree-Fock 近似	65
3.2.2	原子軌道線型結合法	66
3.2.3	多原子分子への拡張	70
3.2.4	非制限 Hartree-Fock 近似	78
3.3	電子相関	81
3.3.1	非制限 Hartree-Fock 近似解の 1 重項化	82
3.3.2	配置間相互作用	83
3.3.3	異なる取り扱いの間の関係	85
3.3.4	閉殻原子からなる分子	86
<b>第 4 章</b>	<b>固体中の原子の電子状態</b>	<b>89</b>
4.1	結晶場中の原子	89
4.1.1	非制限 Hartree-Fock 近似	91
4.1.2	配位子場理論	99
4.2	クラスター・モデル	105
4.2.1	モデル・ハミルトニアン	107
4.2.2	Mott-Hubbard 型と電荷移動型	111
4.2.3	多重項構造	119
4.2.4	非制限 Hartree-Fock 近似	120
4.2.5	配置間相互作用法	129
4.3	Anderson 不純物モデル	133
4.3.1	モデル・ハミルトニアン	134
4.3.2	非制限 Hartree-Fock 近似	135
4.3.3	配置間相互作用法	138
4.3.4	近藤効果	143
4.3.5	古典的局在スピンと価電子の相互作用	149
<b>第 5 章</b>	<b>固体中の原子間の磁氣的相互作用</b>	<b>153</b>
5.1	反強磁性的な超交換相互作用	154
5.2	強磁性的な超交換相互作用	164

5.2.1	90 度相互作用	164
5.2.2	軌道が異なる場合	166
5.2.3	電子数が異なる場合	168
5.3	原子間のスピン・軌道結合	169
5.4	金属中の原子間の磁氣的相互作用	172
5.4.1	2 重交換相互作用	172
5.4.2	$p-d$ 交換相互作用	175
5.4.3	RKKY 相互作用	176
<b>第 6 章</b>	<b>固体の電子状態</b>	<b>179</b>
6.1	様々な格子モデル	179
6.1.1	Hubbard モデル	180
6.1.2	Anderson 格子モデル	185
6.1.3	$t-J$ モデル	186
6.1.4	近藤格子モデル	187
6.2	金属-絶縁体転移	189
6.2.1	バンド幅制御とフィリング制御	189
6.2.2	長距離クーロン力と金属-絶縁体転移	192
6.3	バンド理論	194
6.3.1	常磁性金属	196
6.3.2	反強磁性	199
6.3.3	強磁性	204
6.3.4	軌道整列	206
6.4	バンド電子に対する電子相関効果	207
6.4.1	1 粒子 Green 関数	207
6.4.2	自己エネルギー	211
6.5	Fermi 液体	213
6.5.1	1 粒子励起スペクトル	213
6.5.2	熱力学的性質	217

付録 A 混成軌道の導出	221
付録 B 第 2 量子化	225
付録 C 原子内 2 電子積分のパラメータ化	229
付録 D 光電子・逆光電子分光	233
付録 E Clebsch-Gordan 係数	235
付録 F 原子の電子配置	241
付録 G 原子軌道間の移動積分	247
参考文献 . . . . .	251
索引 . . . . .	253