

## 目次

テーマ1 基本概念	1	6・2 基本原理Ⅳ：固有値と固有関数	51	トピック12 振動運動	95	18・2 動径分布関数	170
トピック1 もの	2	チェックリスト	54	12・1 エネルギー準位	96	チェックリスト	172
1・1 原子	2	重要な式の一覧	54	12・2 波動関数	97	重要な式の一覧	172
1・2 分子	3	トピック7 実験結果の予測	55	12・3 振動子の性質	100	トピック19 多電子原子	173
1・3 バルクのもの	5	7・1 一次結合で表された波動関数	55	12・4 調和振動子モデルの化学での応用	103	19・1 オービタル近似	173
チェックリスト	9	7・2 期待値	56	チェックリスト	105	19・2 電子構造に影響を与える諸因子	174
重要な式の一覧	9	7・3 固有関数の直交性	57	重要な式の一覧	105	19・3 つじつまの合う場の計算	179
トピック2 エネルギー	10	7・4 固有関数の一次結合の期待値	58	トピック13 二次元の回転運動	106	チェックリスト	180
2・1 力	10	チェックリスト	59	13・1 環上の粒子	106	重要な式の一覧	180
2・2 エネルギー：はじめに	12	重要な式の一覧	59	13・2 角運動量の量子化	111	トピック20 元素の周期性	181
2・3 分子の性質とバルクの性質の関係	16	トピック8 不確定性原理	60	チェックリスト	113	20・1 構成原理	181
チェックリスト	19	8・1 相補性	60	重要な式の一覧	114	20・2 元素の電子配置	182
重要な式の一覧	20	8・2 ハイゼンベルクの不確定性原理	61	トピック14 三次元の回転運動	115	20・3 原子の性質の周期性	184
トピック3 波	21	8・3 可換性と相補性	63	14・1 球面上の粒子	115	チェックリスト	186
3・1 調和波	21	チェックリスト	65	14・2 角運動量	119	トピック21 原子分光法	187
3・2 電磁場	22	重要な式の一覧	65	チェックリスト	122	21・1 水素原子のスペクトル	187
チェックリスト	24	テーマ2 演習と問題	66	重要な式の一覧	123	21・2 項の記号	189
重要な式の一覧	24	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題		テーマ3 演習と問題	124	21・3 多電子原子の選択律	194
テーマ1 演習と問題	25	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題		記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題		チェックリスト	195
記述問題 / 演習 / 総合問題		数学の基礎2 微分方程式	71	数学の基礎3 複素数	132	重要な式の一覧	195
数学の基礎1 微分と積分	29	テーマ3 運動の量子力学	73	テーマ4 近似の方法	134	テーマ5 演習と問題	196
テーマ2 量子力学の諸原理	33	トピック9 一次元の並進運動	75	トピック15 時間に依存しない摂動論	135	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題	
トピック4 量子力学の出現	35	9・1 自由な運動	75	15・1 摂動展開	135	数学の基礎4 ベクトル	201
4・1 エネルギーの量子化	35	9・2 制約された運動：箱の中の粒子	76	15・2 エネルギーに対する一次の補正	137	テーマ6 分子の構造	204
4・2 波-粒子二重性	39	チェックリスト	81	15・3 波動関数に対する一次の補正	138	トピック22 原子価結合法	206
4・3 まとめ	42	重要な式の一覧	82	15・4 エネルギーに対する二次の補正	139	22・1 二原子分子	207
チェックリスト	43	トピック10 トンネル現象	83	チェックリスト	140	22・2 多原子分子	209
重要な式の一覧	43	10・1 長方形ポテンシャルのエネルギー障壁	83	重要な式の一覧	141	チェックリスト	213
トピック5 波動関数	44	10・2 エッカートポテンシャル障壁	86	トピック16 遷移	142	重要な式の一覧	213
5・1 基本原理Ⅰ：波動関数	44	10・3 二重井戸形ポテンシャル	88	16・1 時間に依存する摂動論	143	トピック23 分子軌道法の原理	214
5・2 基本原理Ⅱ：ボルンの解釈	45	チェックリスト	89	16・2 放射線の吸収と放出	146	23・1 原子オービタルの一次結合	214
チェックリスト	48	重要な式の一覧	89	チェックリスト	148	23・2 オービタルの名称	219
重要な式の一覧	48	トピック11 多次元の並進運動	90	重要な式の一覧	149	チェックリスト	220
トピック6 波動関数からの情報抽出	49	11・1 二次元の運動	90	テーマ4 演習と問題	150	重要な式の一覧	220
6・1 基本原理Ⅲ：量子力学の演算子	49	11・2 三次元の運動	93	記述問題 / 演習 / 問題		トピック24 等核二原子分子	221
		チェックリスト	94	テーマ5 原子構造と原子スペクトル	152	24・1 電子配置	221
		重要な式の一覧	94	トピック17 水素型原子	154	24・2 光電子分光法	226
				17・1 水素型原子の構造	154	チェックリスト	228
				17・2 原子オービタルとそのエネルギー	160	重要な式の一覧	228
				チェックリスト	163	トピック25 異核二原子分子	229
				重要な式の一覧	163	25・1 極性結合	229
				トピック18 水素型原子オービタル	164	25・2 変分原理	231
				18・1 殻と副殻	164	チェックリスト	235
						重要な式の一覧	236
						トピック26 多原子分子	237

26・1	ヒュッケル近似	238
26・2	ヒュッケル法の応用	240
	チェックリスト	243
	重要な式の一覧	243
	<b>トピック 27 つじつまの合う場</b>	<b>244</b>
27・1	解決すべき中心課題	244
27・2	ハートリー-フォック法	245
27・3	ローターン方程式	248
27・4	基底セット	251
	チェックリスト	253
	重要な式の一覧	254
	<b>トピック 28 半経験的方法</b>	<b>255</b>
28・1	再びヒュッケル法について	255
28・2	微分重なり	256
	チェックリスト	257
	重要な式の一覧	257
	<b>トピック 29 アブイニシオ法</b>	<b>258</b>
29・1	配置間相互作用	258
29・2	多体摂動論	260
	チェックリスト	262
	重要な式の一覧	262
	<b>トピック 30 密度汎関数法</b>	<b>263</b>
30・1	コーン-シャム方程式	263
30・2	交換-相関エネルギー	264
	チェックリスト	266
	重要な式の一覧	266
	<b>テーマ 6 演習と問題</b>	<b>267</b>
	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題	
	<b>数学の基礎 5 行列</b>	<b>277</b>
	<b>テーマ 7 分子の対称性</b>	<b>281</b>
	<b>トピック 31 分子の形の解析</b>	<b>282</b>
31・1	対称操作と対称要素	283
31・2	分子の対称による分類	285
31・3	対称性からすぐ導ける結果	289
	チェックリスト	290
	<b>トピック 32 群論</b>	<b>291</b>
32・1	群論における要素	291
32・2	行列表現	293
32・3	指標表	296
	チェックリスト	298
	重要な式の一覧	298
	<b>トピック 33 対称性の応用</b>	<b>299</b>
33・1	積分の消滅	299
33・2	オービタルへの応用	302
33・3	選択律	303

	チェックリスト	304
	重要な式の一覧	304
	<b>テーマ 7 演習と問題</b>	<b>305</b>
	記述問題 / 演習 / 問題	
	<b>テーマ 8 分子間の相互作用</b>	<b>309</b>
	<b>トピック 34 分子の電気的性質</b>	<b>311</b>
34・1	電気双極子モーメント	311
34・2	分極率	314
	チェックリスト	316
	重要な式の一覧	316
	<b>トピック 35 分子間の相互作用</b>	<b>317</b>
35・1	部分電荷の間の相互作用	317
35・2	双極子が関与する相互作用	318
35・3	水素結合	324
35・4	全相互作用	325
	チェックリスト	327
	重要な式の一覧	328
	<b>トピック 36 実在気体</b>	<b>329</b>
36・1	気体における分子間相互作用	330
36・2	ビリアル状態方程式	330
36・3	ファンデルワールス状態方程式	332
36・4	熱力学的な考察	336
	チェックリスト	338
	重要な式の一覧	339
	<b>トピック 37 結晶構造</b>	<b>340</b>
37・1	周期結晶の格子	340
37・2	格子面の同定	343
37・3	X線結晶学	345
37・4	中性子回折と電子回折	351
	チェックリスト	352
	重要な式の一覧	352
	<b>トピック 38 固体における結合</b>	<b>353</b>
38・1	金属性固体	353
38・2	イオン性固体	357
38・3	分子性固体と共有結合ネットワーク	361
	チェックリスト	363
	重要な式の一覧	363
	<b>トピック 39 固体の電気的, 光学的, 磁氣的性質</b>	<b>364</b>
39・1	電気的性質	364
39・2	光学的性質	367
39・3	磁氣的性質	368
39・4	超伝導性	371
	チェックリスト	372
	重要な式の一覧	372
	<b>テーマ 8 演習と問題</b>	<b>373</b>
	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題	

	<b>数学の基礎 6 フーリエ級数とフーリエ変換</b>	<b>383</b>
	<b>テーマ 9 分子分光法</b>	<b>386</b>
	<b>トピック 40 分子分光法の原理</b>	<b>388</b>
40・1	分光計	389
40・2	吸収分光法	392
40・3	発光分光法	394
40・4	ラマン分光法	395
40・5	スペクトルの線幅	396
	チェックリスト	398
	重要な式の一覧	398
	<b>トピック 41 分子の回転</b>	<b>399</b>
41・1	慣性モーメント	399
41・2	回転エネルギー準位	401
	チェックリスト	405
	重要な式の一覧	405
	<b>トピック 42 回転分光法</b>	<b>406</b>
42・1	マイクロ波分光法	406
42・2	回転ラマン分光法	409
42・3	核統計と回転状態	411
	チェックリスト	413
	重要な式の一覧	414
	<b>トピック 43 振動分光法: 二原子分子</b>	<b>415</b>
43・1	二原子分子の振動運動	415
43・2	赤外分光法	417
43・3	非調和性	418
43・4	振動回転スペクトル	420
43・5	二原子分子の振動ラマンスペクトル	422
	チェックリスト	423
	重要な式の一覧	424
	<b>トピック 44 振動分光法: 多原子分子</b>	<b>425</b>
44・1	基準振動モード	425
44・2	多原子分子の赤外吸収スペクトル	427
44・3	多原子分子の振動ラマンスペクトル	429
44・4	対称性から見た分子振動	430
	チェックリスト	431
	重要な式の一覧	432
	<b>トピック 45 電子分光法</b>	<b>433</b>
45・1	二原子分子の電子スペクトル	434
45・2	多原子分子の電子スペクトル	440
	チェックリスト	443
	重要な式の一覧	443
	<b>トピック 46 励起状態の減衰過程</b>	<b>444</b>
46・1	蛍光とりん光	444
46・2	解離と前期解離	447
46・3	レーザー作用	448

	チェックリスト	453
	重要な式の一覧	453
	<b>テーマ 9 演習と問題</b>	<b>454</b>
	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題	
	<b>テーマ 10 磁気共鳴</b>	<b>468</b>
	<b>トピック 47 一般原理</b>	<b>470</b>
47・1	核磁気共鳴	470
47・2	電子常磁性共鳴	474
	チェックリスト	476
	重要な式の一覧	476
	<b>トピック 48 NMR スペクトルの特徴</b>	<b>477</b>
48・1	化学シフト	477
48・2	遮蔽定数の起源	479
48・3	微細構造	482
48・4	コンホメーションの転換と交換過程	487
	チェックリスト	488
	重要な式の一覧	488
	<b>トピック 49 パルス法 NMR</b>	<b>489</b>
49・1	磁化ベクトル	489
49・2	スピン緩和	492
49・3	核オーバーハウザー効果	494
49・4	二次元 NMR	496
49・5	固体 NMR	497
	チェックリスト	499
	重要な式の一覧	499
	<b>トピック 50 電子常磁性共鳴</b>	<b>500</b>
50・1	$g$ 値	500
50・2	超微細構造	501
	チェックリスト	504
	重要な式の一覧	504
	<b>テーマ 10 演習と問題</b>	<b>505</b>
	記述問題 / 演習 / 問題 / 総合問題	
	<b>資料</b>	<b>A1</b>
1	積分公式	A2
2	量子数と演算子	A3
3	単位	A5
4	データ表	A6
5	指標表	A16
	<b>索引</b>	<b>A20</b>
	<b>テーマ末問題の解答 (東京化学同人ホームページ)</b>	
	演習 (a) の解答	
	問題 (奇数番号) の解答	