

1 量子論と波動方程式	1
1.1 量子化学とは	2
1.2 物質を構成する荷電粒子とクーロン力	6
1.3 波動と振動	8
1.4 エネルギーの量子論	12
1.5 原子のスペクトルとエネルギー準位	18
1.6 粒子性と波動性	25
1.7 波動方程式	28
1.8 波動関数と粒子の存在確率	31
1.9 定常状態と固有方程式	32
1.10 1次元の箱の中の粒子	35
1.11 波動方程式の一般化	41
1.12 2粒子系の運動	44
1.13 角運動量	53
1.14 測定値と期待値	56
1.15 交換関係と不確定性原理	58
演習問題	60
2 原子	63
2.1 水素様原子	64
2.2 原子軌道の形	71
2.3 多電子原子	80
2.4 電子のスピン	85
2.5 原子の電子配置	93
2.6 周期性	97
2.7 励起原子とスペクトル項	104
演習問題	112
2 近似法の基礎	113