

み だ し

第 1 章 量子力学と実験事実	1
1.1 量子状態・電子回折	1
1.2 波動性と粒子性の関係	3
1.3 波動性と粒子性の両立	7
第 2 章 波動方程式	16
2.1 自由な電子	16
2.2 不連続な量子状態	19
2.3 Schrödinger の波動方程式	22
2.4 時間を含む波動方程式	25
第 3 章 水素原子	29
3.1 基底状態	29
3.2 励起状態	33
3.3 p 状態	35
3.4 波動関数の標準化と 1 次結合	38
第 4 章 角運動量・Zeeman 効果・スピン	41
4.1 びたりとした量とぼやけた量	41
4.2 s 状態, p 状態での角運動量	45
4.3 Zeeman 効果	49
4.4 d 状態・方向量子化	51
4.5 電子スピン	52
4.6 二つの電子とスピン	57
第 5 章 二電子問題	61
5.1 二つの電子と波動方程式	61
5.2 二つの電子の波動方程式の解き方	63
5.3 交換重なり	66
5.4 Pauli の排他原理	69
5.5 スピン波動関数	71
5.6 Pauli の排他原理と波動関数	74

第 6 章 摂動の理論	78
6.1 一般理論	78
6.2 ヘリウム原子	80
6.3 波動関数の直交化	84
第 7 章 元素と周期律	87
7.1 元素の電子構造	87
7.2 原子状態	90
第 8 章 二原子分子	96
8.1 電子状態	96
8.2 分子の回転	100
8.3 分子の振動	104
8.4 オルト水素・パラ水素	106
第 9 章 共有結合	110
9.1 水素分子	110
9.2 化学結合の飽和性	121
第 10 章 原子価	124
10.1 スピン原子価	124
10.2 原子間相互作用曲線の交わり、炭素の原子価	127
10.3 二原子分子での原子間相互作用	134
第 11 章 多原子分子	139
11.1 たくさんの原子の相互作用、原子価電子 一つをもった原子の場合	139
11.2 活性化エネルギー、非局在結合	147
11.3 原子価と結合方向	154
11.4 いくつかの不對電子をもった原子どうしの相互作用	162
11.5 炭化水素の結合エネルギー	162
和英対照	173
さくいん	1~3