

目 次

1 章 高分子と電子

- A. 分子科学における電子論 1
- B. 高分子における電子論 2
- C. 低分子モデルによる高分子へのアプローチ 3

2 章 規則的な高分子の電子論

- A. 規則的な一次構造 7
- B. 周期的境界条件 8
- C. ブロッホ関数とブロッホ定理 10
- D. 高分子における電子の軌道 12
- E. タイト・バインディングの方法 14
- F. エネルギーバンド 16
- G. 種々の計算法 18
 - a. ヒュッケル法 18
 - b. 拡張ヒュッケル法 19
 - c. VEH 法 20
 - d. 半経験的ハートリー・フォック法 21
 - e. 非経験的ハートリー・フォック法 21

3 章 高分子の電子物性

- A. バンドの属性 25
- B. バンドギャップ 26

C. イオン化ポテンシャル	28
D. 電子親和力	29
E. バンド幅	29
F. 有効質量	29
G. 状態密度	30
H. フェルミエネルギー	32
I. 結晶軌道相	33
J. 電子密度	34
K. 高分子の全エネルギー	34
L. 永久双極子モーメントと分極率	35

4章 不規則な高分子の電子論

A. 不規則な高分子の構造	39
B. 局所的な構造の乱れ	40
C. ランダム共重合体の数値解法	41
D. ランダムさの平均化処理によるもの	44
E. ランダム系における波動関数の局在	46

5章 高分子の導電性の電子論

A. 導電性をもつ高分子	49
B. 電子的過程と導電機構	51
C. パイエルス転移	55
D. ソリトン	57
E. ポーラロン・バイポーラロン	60
F. 高濃度ドープ状態における導電機構	64
G. 鎖間導電機構	67
H. 超伝導性	70

6章 高分子の磁性の電子論

A. 高分子と磁性	74
B. 磁性の用語	75
C. 強磁性高分子の分子設計	79

文 献	86
-----	----

索 引	91
-----	----