

## 目 次

はじめに .....	1
<b>1. 水素原子の電子構造</b> .....	<b>3</b>
1・1 Bohr の水素原子模型 .....	3
1・2 水素原子のスペクトル .....	9
1・3 不連続的なエネルギー単位の存在を確かめる実験 .....	12
1・4 電子による衝撃とスペクトル .....	14
1・5 連続スペクトルとイオン化エネルギー .....	15
1・6 “波数” について .....	16
1・7 水素原子の一般的な取扱い .....	17
1・8 磁気量子数——外力の場におかれた水素原子 .....	20
1・9 Zeeman 効果 .....	22
<b>2. 量子力学による原子構造の理論</b> .....	<b>24</b>
2・1 電子と波動 .....	25
2・2 不確定性原理 .....	26
2・3 量子力学 .....	27
2・4 波動関数および Schrödinger の方程式の意味 .....	31
2・5 簡単な系についての波動関数 .....	33
2・6 調和振動子の波動関数 .....	36
2・7 水素原子の波動関数 .....	39
2・8 水素原子の波動関数のまとめ .....	45
2・9 原子軌道関数 .....	47

<b>3. 一般の原子の電子構造</b> .....	52
3・1 スピン量子数 .....	52
3・2 Pauli の原理 (Pauli の排他律) .....	54
3・3 ヘリウム原子 .....	55
3・4 変分法 .....	58
3・5 アルカリ金属の原子 .....	60
3・6 組立ての原理と電子配置 .....	62
3・7 “殻” の構造 .....	68
3・8 イオン化電位 .....	69
3・9 原子のベクトル模型 .....	72
3・10 選択律 .....	74
3・11 アルカリ金属およびアルカリ土類金属のスペクトル .....	75
3・12 X線スペクトル .....	78
<b>4. 原子間に働く力——分子の形成</b> .....	81
4・1 水素分子の形成 .....	82
4・2 水素分子の波動関数 (I) .....	84
4・3 水素分子の波動関数 (II) Heitler-London の理論 .....	87
4・4 実測値に近づける試み .....	90
4・5 電子のスピンを考慮に入れた波動関数 .....	92
4・6 水素分子イオンの波動関数——分子軌道関数 .....	93
4・7 水素分子の波動関数——MO 法による取扱い .....	101
4・8 VB 法と MO 法との関係 .....	102
4・9 イオン結合 .....	103
<b>5. 二原子分子における結合</b> .....	107
5・1 等核二原子分子 (I) $\sigma$ 軌道 .....	107
5・2 等核二原子分子 (II) $\pi$ 軌道 .....	109
5・3 異核二原子分子 .....	115
5・4 結合の極性 .....	117
5・5 VB 法の立場 .....	120
5・6 電気陰性度 .....	124

5・7 電気陰性度と双極子モーメント .....	127
<b>6. 多原子分子における結合——方向原子価</b> .....	130
6・1 結合軌道——局在化した分子軌道 .....	130
6・2 原子価の方向性 .....	132
6・3 電子対結合の理論 .....	133
6・4 水の分子 .....	135
6・5 混成軌道 .....	137
6・6 $sp^3$ (正四面体) 混成 .....	138
6・7 $sp^2$ および $sp$ 混成 .....	141
6・8 混成の効果 .....	146
6・9 $d$ 軌道を含む混成軌道 .....	151
6・10 配位化合物 .....	155
<b>7. 共役化合物, 芳香族化合物における結合——非局在分子軌道</b> .....	158
7・1 ベンゼン分子 .....	158
7・2 VB 法によるベンゼン分子の取扱い .....	160
7・3 MO 法によるベンゼン分子の取扱い .....	166
7・4 プタジエンの分子軌道 .....	170
7・5 $\pi$ 電子密度 .....	174
7・6 結合次数 .....	175
7・7 自由原子価 .....	178
7・8 複素環式化合物および置換芳香族化合物 .....	180
7・9 電荷移動型錯化合物における結合 .....	185
<b>参考書</b> .....	191
<b>索引</b> .....	193
<b>欧文索引</b> .....	196