目　　次

1. まえがき

1・1　まえがき …… 1
1・2　原子単位 …… 2

2. 水素原子

2・1　水素原子の固有関数 …… 4
2・2　連続固有値と固有関数 …… 10
2・3　連続固有値に属する固有関数の規格直交化 …… 13
2・4　相対論補正 …… 18

3. He 原子

3・1　He 原子のエネルギー …… 25
3・2　He 原子の波動関数（独立粒子モデル）…… 27
3・3　He 原子の波動関数（変分法）…… 34
3・4　He 原子の波動関数（ハートレーの方法）…… 38
3・5　He 原子の波動関数（配置間相互作用 CI の方法）…… 42
（1）　水素型軌道関数 …… 49
（2）　直交ラゲール型軌道関数 …… 50
（3）　三次元調和振動子型軌道関数 …… 50
（4）　スレーター型軌道関数およびガウス型軌道関数 …… 51
3・6　質量補正 …… 63
3・7　相対論補正 …… 67

4. 多電子原子

4・1　スピン軌道関数 …… 76
4・2　電子配置 …… 81
4・3　電子状態のエネルギー …… 102

4・4　スピン・軌道結合 …… 114
4・5　配置間相互作用とハートレー・フォックの方法 …… 119
4・6　トーマス・フェルミの方法 …… 135

5. 二原子分子

5・1　断熱近似 …… 140
5・2　水素分子イオン …… 152
5・3　水素分子（LCAO MO 法）…… 159
5・4　水素分子（バレンス・ボンド（VB）法）…… 168
5・5　水素分子（変分法）…… 172
5・6　多電子の二原子分子 …… 179

6. 多原子分子

6・1　分子の対称性と波動関数 …… 187
6・2　多原子分子の波動関数 …… 203
6・3　π電子近似 …… 217
6・4　ヒュッケル分子軌道近似 …… 227
6・5　パリザー・パー・ポップルの近似 …… 239
（1）ZDO の近似 …… 239
（2）クーロン積分に用いる近似 …… 240
（3）1電子演算子についての近似 …… 241
6・6　いくつかの近似的な解法 …… 244
（1）EHT の方法 …… 246
（2）CNDO 法 …… 246

あとがき（参考書）

索　引