

目次

第 1 章 電子の発見と原子模型	1
1.1 原子の発見	1
1.2 電子の発見	2
1.3 原子模型	4
問題	7
第 2 章 量子論のはじまり	9
2.1 説明できない現象	9
2.1.1 水素原子発光スペクトルの謎	9
2.1.2 原子は存在しない?	11
2.2 新しい理論の登場	11
2.2.1 プランクの量子論	11
2.2.2 光電効果	14
2.3 ボーアの水素原子模型の誕生	16
2.4 物質の波動性	24
2.4.1 光は波なのか? 粒子なのか?	24
2.4.2 電子も二重性?	28
2.5 不確定性原理	29
問題	31
第 3 章 量子力学の基礎	33
3.1 シュレーディンガーの波動方程式	33
3.2 ボルンの解釈	37
3.3 箱の中の粒子	38
問題	43

第 4 章 原子軌道と原子の電子構造	45
4.1 水素類似原子の波動関数	45
4.2 量子数	48
4.3 原子軌道の形	51
4.4 原子の基底電子配置	55
4.4.1 構成原理	55
4.4.2 遮蔽効果	57
4.4.3 例外	58
4.5 原子の電子配置と元素の周期性	62
4.5.1 原子のイオン化エネルギー	62
4.5.2 原子の電子親和力	64
問題	65
第 5 章 水素分子イオンの分子軌道	67
5.1 なぜ、電子が結合の担い手となるのか	67
5.2 水素分子イオンの波動関数	69
5.3 分子軌道の表記法	72
問題	76
第 6 章 等核二原子分子の分子軌道	77
6.1 結合次数	77
6.2 結合エネルギー	78
6.3 HOMO と LUMO	79
6.4 磁性	79
6.5 二原子分子の分子軌道	80
6.5.1 二原子分子の分子軌道の形成のルール	80
6.5.2 第一周期元素の等核二原子分子の分子軌道	82
6.5.3 第二周期元素の等核二原子分子の分子軌道	84
6.5.4 結合の強さ	93

問題	94
第 7 章 異核二原子分子の分子軌道	95
7.1 異核二原子分子の分子軌道	95
7.2 結合の極性	100
7.2.1 電気陰性度	100
7.2.2 電気双極子モーメント	102
7.2.3 結合のイオン性	104
問題	106
第 8 章 分子の形	107
8.1 混成軌道	107
8.1.1 sp^3 混成軌道	107
8.1.2 sp^2 混成軌道	110
8.1.3 sp 混成軌道	113
8.1.4 sp^3d^2 混成軌道	115
8.2 孤立電子対の影響	117
8.3 VSEPR 法	120
8.4 局在化軌道と非局在化軌道	122
問題	127
第 9 章 配位結合と金属錯体	129
9.1 配位結合	129
9.2 金属錯体	133
9.2.1 二配位錯体	133
9.2.2 四配位錯体	134
9.2.3 六配位錯体	136
9.2.4 結晶場理論	138
問題	141

第 10 章 分子間相互作用	143
10.1 静電相互作用	143
10.2 電荷移動相互作用	145
10.3 水素結合	146
10.4 疎水相互作用（疎水結合）	150
問題	154
第 11 章 結晶構造	155
11.1 結晶格子	155
11.2 共有結合結晶	157
11.3 金属結晶	157
11.4 イオン結晶	165
11.5 分子性結晶（分子結晶）	170
11.6 水素結合性結晶	171
問題	173
付表	175
索引	178