

| | |
|------|---|
| はじめに | 3 |
|------|---|

第 I 部 量子力学

第 1 章 量子化学とは

| | |
|-------------------------------------------|----|
| 1-1 ニュートン力学で解決できない現象を解決するー量子化学とは | 10 |
| 1-2 微粒子はとびとびの値しかとることができないー量子とは | 14 |
| 1-3 2つの値を同時に正確に決定することはできないーハイゼンベルクの不確定性原理 | 20 |
| 1-4 電子の位置は確率でしか表すことができないー存在確率 | 22 |
| 1-5 微粒子は量子の性質と波の性質の両方を持っているー粒子性と波動性 | 25 |
| 1-6 電子の性質、挙動を方程式で表すーシュレーディンガー方程式 | 30 |

第 2 章 直線上の粒子運動

| | |
|------------------------------------|----|
| 2-1 量子力学の基本の基本ー直線上の粒子運動 | 36 |
| 2-2 量子数が出てくる理由を見てみようー量子数の出現 | 40 |
| 2-3 波動関数の2乗は粒子の存在確率を表すー波動関数の形と存在確率 | 42 |
| 2-4 量子化学における最重要事項ーエネルギーの量子化 | 46 |
| 2-5 原子構造を考える上での基礎事項ー立体空間の粒子運動と極座標 | 51 |
| りょうしかがくの窓 トンネル効果 | 57 |

第 II 部 量子化学と原子・分子構造

第 3 章 原子構造

| | |
|-------------------------------------|----|
| 3-1 全ての物質を作る基本的な微粒子ー原子構造 | 60 |
| 3-2 現代の原子モデルができたのは量子力学のおかげー原子モデルの変遷 | 63 |

| | | |
|-----|--------------------------------|----|
| 3-3 | 原子を構成する電子はどのような状態にいるのか — 電子の軌道 | 67 |
| | りょうしかがくの窓 なぜ「K」から始まるのか | 71 |
| 3-4 | 各軌道は固有のエネルギーを持つ — 軌道のエネルギー | 72 |
| 3-5 | 軌道は個性的な形をしている — 軌道の形 | 75 |
| 3-6 | 電子がどの軌道にどのような状態で入るか — 電子配置 | 78 |

第4章 化学結合

| | | |
|-----|---------------------------------------------------|-----|
| 4-1 | 原子は化学結合によって分子を作る — 化学結合とは | 84 |
| 4-2 | 原子軌道の重なりによって生じる結合 — 共有結合 | 89 |
| | りょうしかがくの窓 量子化学と計算機 | 93 |
| 4-3 | 分子軌道計算の基本は $+$ $-$ \times \div である — 分子軌道法の計算 | 94 |
| 4-4 | エネルギー極小を求めるのは微分である — 変分法 | 99 |
| 4-5 | 軌道エネルギーこそが量子化学の真髄 — 軌道関数とエネルギー | 103 |

第5章 分子軌道法と結合エネルギー

| | | |
|-----|---------------------------------------------------------------|-----|
| 5-1 | 結合を作る結合性軌道と結合をこわす反結合性軌道 — 結合性軌道と反結合性軌道 | 108 |
| 5-2 | 原子間の距離が変化すると結合エネルギーも変化する — 結合距離とエネルギー | 112 |
| | りょうしかがくの窓 原子・分子を見る | 113 |
| 5-3 | 電子が入った軌道によって結合エネルギーが変化する — 電子配置と結合エネルギー | 114 |
| 5-4 | 回転可能で強い σ 結合と回転不可能で弱い π 結合 — σ 結合と π 結合 | 117 |
| 5-5 | 一重結合、二重結合、三重結合 — $F-F$ 、 $O=O$ 、 $N\equiv N$ の結合 | 121 |

第6章 混成軌道と共役系

| | | |
|-----|-------------------------------------------|-----|
| 6-1 | 電子が作る合挽きハンバーグ — 混成軌道とは | 132 |
| 6-2 | 最も基本的な混成軌道 — sp^3 混成軌道 | 135 |
| | りょうしかがくの窓 クラスター | 140 |
| 6-3 | 二重結合、三重結合を作る混成軌道 — sp^2 混成軌道・ sp 混成軌道 | 141 |
| 6-4 | 一重結合と二重結合の中間 — 共役系の結合状態 | 147 |

| | | |
|-----------|------------------------------------|-----|
| りょうしかがくの窓 | 結合角度 | 151 |
| 6-5 | 3個、5個、7個など奇数個の炭素が作る共役系—奇数炭素系の共役化合物 | 152 |
| りょうしかがくの窓 | 球状共役系 | 156 |

第Ⅲ部 量子化学と分子の物性・反応性

第7章 共役系の分子軌道

| | | |
|-----------|----------------------------------------|-----|
| 7-1 | 分子軌道法の基礎—エチレンの分子軌道とエネルギー | 158 |
| 7-2 | 共役系の分子軌道法の基礎—ブタジエンの分子軌道とエネルギー | 163 |
| 7-3 | 軌道関数には独特な対称性がある—軌道関数・節・対称性・形 | 166 |
| 7-4 | 共役系が長くなるとエネルギーの間隔が狭くなる—共役系の長さとお軌道エネルギー | 168 |
| りょうしかがくの窓 | 分子軌道関数とエネルギーのまとめ | 172 |
| 7-5 | シクロブタジエンとベンゼンの分子軌道—環状共役系の分子軌道 | 173 |
| りょうしかがくの窓 | 分子軌道計算 | 176 |

第8章 分子の物性と分子軌道

| | | |
|-----------|----------------------------------|-----|
| 8-1 | 共役系はなぜ安定なのか?—分子の安定性と非局在化エネルギー | 178 |
| りょうしかがくの窓 | 分子の安定性 | 182 |
| 8-2 | π 電子はどこにいるのか?—分子のイオン性と電子密度 | 183 |
| 8-3 | 何重結合と考えたらよいのか?—結合距離と結合次数 | 186 |
| 8-4 | ラジカルは分子のどこに反応するのか?—ラジカル反応性と自由原子価 | 190 |
| りょうしかがくの窓 | 「転んでもただでは起きない」 | 192 |
| 8-5 | 芳香族とは何だろう?—芳香族性とヒュッケル則 | 193 |
| 8-6 | 芳香族化合物の性質と反応性—芳香族性と分子の挙動 | 198 |

第9章 分子の発光、発色と分子軌道

| | | |
|-----|---------------------|-----|
| 9-1 | 分子が光るのはなぜだろう?—発光の原理 | 202 |
|-----|---------------------|-----|

| | | |
|-----------|---------------------------------|-----|
| りょうしかがくの窓 | 色彩の三原色 | 205 |
| 9-2 | 水銀灯やネオンサインが光る原理 — 原子と電気の相互作用 | 206 |
| 9-3 | 有機ELは次世代のテレビといわれている — 有機ELが光る原理 | 209 |
| 9-4 | 発光と発色は全く異なる現象 — バラが赤い原理 | 213 |
| 9-5 | 漂白剤はなぜ色を無くすのか? — 光吸収と脱色の原理 | 217 |
| りょうしかがくの窓 | 混ぜるな危険! | 220 |

第10章 熱反応と光反応

| | | |
|-----------|-------------------------------------|-----|
| 10-1 | 加熱しても光照射しても化学反応は起こる — 熱反応と光反応の違い | 222 |
| 10-2 | 原子、分子は最も外側の軌道を使って反応する — フロンティア軌道理論 | 227 |
| 10-3 | 鎖状化合物が環状化合物に変化する反応 — 閉環反応とフロンティア軌道 | 230 |
| りょうしかがくの窓 | ウッドワード教授とノーベル賞 | 234 |
| 10-4 | 環の途中がつながって2個の環になる反応 — 縮環反応とフロンティア軌道 | 235 |
| 10-5 | 水素が炭素の間を移動する反応 — 水素移動反応とフロンティア軌道 | 238 |
| りょうしかがくの窓 | 理論と実験 | 243 |

付録の章

二次元・三次元空間の粒子運動

| | | |
|---|----------------|-----|
| 1 | 平面上の粒子運動 | 246 |
| 2 | 平面上を動く粒子の解析 | 249 |
| 3 | 波動関数とエネルギー | 252 |
| 4 | 関数の表現 | 254 |
| 5 | エネルギーと縮重 | 257 |
| 6 | 三次元空間の粒子運動と極座標 | 261 |

| | |
|------|-----|
| 参考文献 | 264 |
| さくいん | 265 |