



Joyful Physical Chemistry
Volume 2

Quantum Chemistry



たのしい 物理化学



2



量子化学

山本雅博
Masahiro Yamamoto

池田 茂
Shigeru Ikeda

加納健司
Kenji Kano

講談社



9784065340431



1923043028000

ISBN978-4-06-534043-1

C3043 ¥2800E

定価: 本体 2800円 (税別)



KODANSHA



Joyful Physical Chemistry Volume 2

Quantum Chemistry



目次

第15章 緒言

1

コラム 15.1 量子力学と量子化学 3

第16章 量子力学はどのように誕生したのか?

4

16.1 誕生の歴史 4

16.2 粒子か波動か 7

コラム 16.1 量子力学の解釈問題の歴史 9

演習問題 10

第17章 ド・ブロイ波とシュレーディンガー方程式

11

17.1 二重スリット実験 11

参考 17.1 干渉縞はなぜ観測される? 12

17.2 ハイゼンベルクの不確定性原理 13

参考 17.2 単一スリットにおける波の回折の考え方 14

コラム 17.1 ファインマンの爆撃 16

17.3 前期量子論 (ボーアの原子モデル) 17

コラム 17.2 原子核を回る電子が原子核に引かれて、原子はつぶれてしまう!? 18

コラム 17.3 どこまで重い原子は存在する?: 微細構造定数の逆数 20

17.4 波動方程式 20

演習問題 26

第18章 量子力学の形式論

27

18.1 波動関数の規格化 27

18.2 演算子 27

18.3 固有値問題 28

18.4 演算子の交換関係 29

18.5 交換関係と不確定性 30

18.5.1 位置と運動量の交換関係と不確定性 31

18.5.2 時間とエネルギーの交換関係と不確定性 31

18.5.3 位置と角運動量の交換関係と不確定性 31

演習問題 34

第19章 1次元のシュレーディンガー方程式

35

19.1	1次元ポテンシャルでのシュレーディンガー方程式の一般的性質	35
19.2	自由粒子	36
19.3	無限の壁をもつ1次元の井戸型ポテンシャル	37
19.4	無限の壁に囲まれた3次元の井戸型ポテンシャル	40
	参考 19.1 ナノ粒子の量子サイズ効果	42
19.5	ポテンシャルステップ：有限の高さの障壁	43
	19.5.1 $E \geq V_0$ の場合	43
	19.5.2 $E < V_0$ の場合	45
19.6	トンネリング：有限の高さ・幅をもつポテンシャル障壁	46
	19.6.1 $E \geq V_0$ の場合	46
	19.6.2 $E < V_0$ の場合	48
19.7	1次元の調和振動子：分子振動	52
	19.7.1 調和振動子の古典論	52
	19.7.2 調和振動子の量子論	53
	19.7.3 調和振動子としての水素分子	56
	19.7.4 生成・消滅演算子による表記	56
	演習問題	60

第20章 水素原子

62

20.1	球対称ポテンシャルでのシュレーディンガー方程式	62
20.2	角運動量の z 成分 $\hat{L}_z$ の固有関数	63
20.3	角運動量の2乗 $\hat{L}^2$ の固有関数	64
20.4	動径方向に対する固有値・固有関数	66
	コラム 20.1 SI単位系での質量の新定義	67
20.5	水素原子型の波動関数	71
20.6	多電子原子：電子間相互作用により縮退が解ける	76
20.7	電子スピン	77
	コラム 20.2 スピン 1/2 の謎?	78
	演習問題	79

第21章 近似理論と化学結合

80

21.1	時間に依存しない摂動論（縮退がない場合）	80
	21.1.1 電場中での水素原子：分極率	82
	21.1.2 スピン軌道相互作用による微細構造	83
21.2	時間に依存しない摂動論（縮退がある場合）	85
	コラム 21.1 波動力学と行列力学	88
21.3	変分法	88
21.4	水素分子カチオン H_2^+	90
21.5	2原子分子：一般論	94
21.6	等核2原子分子	95

21.7	異核
21.8	多原子
21.9	混成
21.10	ヒュッケル
	演習問題

第22章 第一

22.1	電子
22.2	密度
22.3	DF
22.4	DF
22.5	DF
22.6	DF
22.7	第一
22.8	第一
22.9	原子
	演習問題

第23章 分光

23.1	電
23.2	電
23.3	時
23.4	運
23.5	電

演習問題

あとがき
索引

たのし

第1章
第2章
第3章
第4章
第5章

21.7	異核 2 原子分子	96
21.8	多原子分子: LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) 理論	97
21.9	混成軌道	98
21.10	ヒュッケル近似: π 電子系	99
	演習問題	105

第22章 第一原理計算 107

22.1	電子状態の数値計算	107
22.2	密度汎関数理論に基づいた第一原理計算	109
22.3	DFT の発展 1 vdW-DFT	112
22.4	DFT の発展 2 バンドギャップ: GW 近似による改良	113
22.5	DFT の発展 3 強相関系: DFT + U 法	113
22.6	DFT の発展 4 励起状態: TD-DFT	114
22.7	第一原理計算の例 (1): H_2 分子, HF 分子	115
22.8	第一原理計算の例 (2): ナフタレンへの求核・求電子置換反応	119
22.9	原子間力: ヘルマン-ファインマンの定理	120
	演習問題	122

第23章 分光と量子力学 124

23.1	電磁場と量子力学	124
23.2	電磁場	125
23.3	時間依存の摂動論	126
23.4	遷移確率	128
	コラム 23.1 フェルミの黄金律?	130
23.5	電磁波の吸収・放出の遷移速度	131
	23.5.1 行列要素	132
	23.5.2 振動子強度	135
	23.5.3 赤外吸収分光	136
	コラム 23.2 ラマン散乱	140
	コラム 23.3 ラマン散乱の古典論	141
	演習問題	142
	あとがき	143
	索引	145

たのしい物理化学1 化学熱力学・反応速度論 目次

第1章	物理化学で用いる数学の復習
第2章	物理量と単位と物理法則
第3章	熱力学入門
第4章	エントロピー
第5章	自由エネルギーと化学ポテンシャル

第 6 章	相平衡
第 7 章	化学平衡
第 8 章	酸塩基反応
第 9 章	酸化還元反応
第 10 章	界面
第 11 章	反応速度式
第 12 章	反応速度論
第 13 章	酵素反応速度論
第 14 章	物質移動と物質輸送

本書では、「化学系
るときの電子の組み
子力学という 1900
る。」ということに
目がいてしまうか
タを用いることがほ
ンピュータにより近
ムを作成する理論研
くつかの系の解法を
大学受験生の誰も

「原子のまわりを
引力は電子が感じ

という記述があった
めば理解できる(注

化学系の学生にも
用いる数学よりも少
てしまうことが多い
を作成する理論研
似が正しくないと
やはり知っておく
ematics, D. S. Sivia
訳した書籍(注 2)が

本書は 9 章から
入って、基礎理論
を終えれば、最後
できる。現実の系
子・イオンの構造
和、そして化学反
ムパッケージを使

著者紹介

やまもとまさひろ

山本雅博 工学博士

1985年 京都大学大学院工学研究科修士課程修了

現在 甲南大学理工学部機能分子化学科 教授

著書 『実験データを正しく扱うために』化学同人(2007)

いけだ しげる

池田 茂 博士(工学)

1999年 東京工業大学大学院総合理工学研究科博士後期課程修了

現在 甲南大学理工学部機能分子化学科 教授

かのうけんじ

加納健司 農学博士

1982年 京都大学大学院農学研究科博士後期課程修了

現在 京都大学名誉教授

著書 『ベーシック電気化学』化学同人(2000)

『実験データを正しく扱うために』化学同人(2007)

NDC 431 154p 26 cm

たのしい物理化学2 量子化学

2024年1月26日 第1刷発行

著者 やまもとまさひろ いけだ しげる かのうけんじ
山本雅博・池田 茂・加納健司

発行者 森田浩章

発行所 株式会社 講談社

〒112-8001 東京都文京区音羽 2-12-21

販売 (03)5395-4415

業務 (03)5395-3615

編集 株式会社 講談社サイエンティフィク

代表 堀越俊一

〒162-0825 東京都新宿区神楽坂 2-14 ノービビル

編集 (03)3235-3701

本文データ制作 株式会社双文社印刷

印刷・製本 株式会社KPSプロダクツ



KODANSHA

落丁本・乱丁本は、購入書店名を明記のうえ、講談社業務宛にお送りください。
送料小社負担にてお取替えます。なお、この本の内容についてのお問い合わせ
は講談社サイエンティフィク宛にお願いいたします。
定価はカバーに表示してあります。

© M. Yamamoto, S. Ikeda, and K. Kano, 2024

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製は著作権法上での例外を除き
禁じられています。本書を代行業者等の第三者に依頼してスキャンやデジタル化
することはたとえ個人や家庭内の利用でも著作権法違反です。

JCOPY (社)出版者著作権管理機構委託出版物

複写される場合は、その都度事前に(社)出版者著作権管理機構(電話 03-5244-
5088, FAX 03-5244-5089, e-mail: info@jcopy.or.jp)の許諾を得てください。

Printed in Japan

ISBN 978-4-06-534043-1