



Title	量子化学教科書の課題
Author(s)	小泉, 均
Citation	工学教育, 60(4), 20-25
Issue Date	2012
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/52980
Type	journal article
File Information	vol60_04_20.pdf, 本文



量子化学教科書の課題

Issues for Current Textbooks on Quantum Chemistry in Japan

小 泉 均^{※1}
Hitoshi KOIZUMI

Elementary textbooks on quantum chemistry published for the last dozen years in Japan were surveyed. In the most of the textbooks, Heitler-London theory or simple linear atomic combination-molecular orbital theory is still used to explain the nature of the chemical bond of a hydrogen molecule, which theories were criticized in 1960s. Physical meanings on several problems that many students may have questions were not described in these books. Some of the problems were answered in this paper. Desirable textbooks on quantum chemistry which fit with times were proposed.

Keywords : Educational Material, Learning Motivation, Engineering Education, Faculties for Engineering

キーワード：教材，学習動機，工学教育，工学系学部

1. はじめに

理工系学部の化学系の学科では，必ず量子化学の講義が行われている．原子数がそれほど多くなく，原子番号の大きな原子を含まない分子なら，市販の普通のパソコンでも，比較的簡単に，量子化学的な計算ができるようになってきた．また，Gaussian¹⁾などの有料のソフトウェアなら使い勝手の良さやいろいろな物理量の計算がしやすいなどの利点はあるものの，GAMESS^{2), 3)}やORCA⁴⁾など，無償で配布されているソフトとFacio⁵⁾などのプリプロセッサ，表示ソフトなどを用いれば，お金をかけずに十分研究レベルの計算ができる．分子軌道法や密度汎関数法による量子化学的計算は，化学系の技術者や研究者にとって，手軽に使えるものになってきた．

しかし，ここ十数年の間に発行された量子化学の教科書をほとんど見たが^{6) - 45)}，それぞれの著者が様々な工夫をし，たとえ話やカラー化，図表などを用い，一見わかりやすくはなっているが，内容は，著者の学生の頃とほぼ大差がないように見える．

これらの教科書で問題なのは，分子結合の原因についての説明が間違っていること，肝心な問題について物理的意味がきちんと説明されていないことである．

本論文では，これらの教科書の問題点を指摘するとともに，説明されていない疑問点に対する答えを解説する．また，教科書として目指すべき方向について著者の私見を述べる．

2. 分子結合の物理的本質について

水素分子がなぜ結合を作るかという問題に関しては，1927年にHeitlerとLondonが初めて量子力学的計算により説明して見せた⁴⁶⁾．しかし，この解は，ビリアル定理を満たさないことが，HirschfelderとKincaidにより指摘され⁴⁷⁾，その後，Ruedenbergにより，詳しい分析がなされ，HeitlerとLondonの理論は，どういう力が化学結合を形成するのに寄与しているかという問題について，定性的にも，間違っていることが明らかに⁴⁸⁾になった．

日本でも物理学会では，会誌にそのことについて解説が掲載されたりしたが⁴⁹⁾，化学の分野では，この事実は浸透しなかったようで，上記の日本の量子化学の教科書では，そのことがまったく反映されていない．

水素分子の基底状態の波動関数は，2つのH原子核をA，Bとし，それぞれを中心とする原子軌道を χ_A ， χ_B とし，重なり積分をSと書くと，HeitlerとLondonの近似（HL法，原子価結合法）では，次のように表わされる⁴⁹⁾．

$$\psi_{\text{H}_2}^{\text{HL}} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} \{ \chi_A(1)\chi_B(2) + \chi_A(2)\chi_B(1) \} \quad (1)$$

原子軌道についた括弧内の数字は，2つの電子を区別する番号である．ここで，重なり積分は，つぎのような式で与えられる．

$$S = \int \chi_A^* \chi_B d\tau \quad (2)$$

また，単純な原子軌道の線型結合による分子軌道法（LCAO MO法）では，波動関数は，次のように表わされる⁴⁹⁾．

2012年4月28日受付

※1 北海道大学大学院工学研究院

$$\psi_{H_2}^{LCAO\ MO} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} \{ \chi_A(1) + \chi_B(2) \} \{ \chi_B(1) + \chi_A(2) \} \quad (3)$$

これらの式を用いてシュレーディンガー方程式を解き、原子核間距離を変化させてエネルギーを計算し、プロットすると、原子核間距離が近づくにつれ2つの原子として存在するときよりエネルギーが小さくなり、極小点が現れ、その後増加し、無限大に向かう。原子核同士が近づき、個々に存在するよりエネルギー的に小さな位置があることから、水素分子の結合が説明できるように見える。

しかし、これらの理論には、根本的な間違いがある。近似が簡単で、エネルギー的に合わないという問題以前に、どういう力が、結合に寄与しているかということについて、定性的にも、間違っているのである。

古典力学でも、量子力学でも、平衡状態にあるときは、ビリアル定理 (Virial Theorem) というものが成立する。分子では、運動エネルギーの平均を $\bar{T}$ 、ポテンシャルエネルギーの平均を $\bar{V}$ とすれば、次のような式がなりたつ⁵⁰⁾：

$$2\bar{T} = -\bar{V} \quad (4)$$

水素分子の運動エネルギー、ポテンシャルエネルギーの平均をそれぞれ、 $\bar{T}_{H_2}$ 、 $\bar{V}_{H_2}$ 、水素原子の運動エネルギー、ポテンシャルエネルギーの平均をそれぞれ、 $\bar{T}_H$ 、 $\bar{V}_H$ とすれば、結合解離エネルギー D_e は、

$$D_e = +2\bar{T}_H + 2\bar{V}_H - \bar{T}_{H_2} - \bar{V}_{H_2} \quad (5)$$

(4)式を適用すれば、(5)式は次のようになる。

$$D_e = -2\bar{T}_H + \bar{T}_{H_2} \quad (6)$$

運動エネルギーは負の値はとらないから、結合解離エネルギーの分だけ、運動エネルギーが水素分子になることにより増加する。結合により電子の運動エネルギーは増加するのに対し、その倍のエネルギー分、ポテンシャルエネルギーが低下するから水素原子間の結合が形成されるのである。

表1に、(1)式および(3)式の波動関数を用いて計算した水素原子2つと水素分子の運動エネルギーの差 ΔT 、ポテンシャルエネルギーの差を ΔV 、 D_e の値⁴⁹⁾ および著者が計算した、もっと精度の良い密度汎関数法 (DFT) を用いて計算した値を示す。ビリアル定理は ΔT 、 ΔV についても次のようにならないから、

$$2\Delta T = -\Delta V \quad (7)$$

HL法およびLCAO MO法とも、ビリアル定理を満たしておらず、ポテンシャルエネルギーは増加し、運動エネルギーが低下することにより結合エネルギーが生じており、定性的にも、分子結合を形成する力が何

表1 Heitler-London法 (HL法)⁴⁹⁾ および単純な水素原子軌道の線型結合による分子軌道法 (LCAO MO法)⁴⁹⁾、密度汎関数法 (DFT) により計算した平衡状態における水素原子2つと水素分子の運動エネルギーの差 (ΔT)、ポテンシャルエネルギーの差 (ΔV)、および結合解離エネルギー (D_e)。DFTによる計算は、プリプロセッサとしてFacio ver. 15, 1, 1⁵⁾ を用い、Firefly (PC GAMESS) ver. 7.16²⁾ で、密度汎関数法で計算した。交換-相関エネルギー汎関数および基底には、B3LYP/6-31G*を用いた。

波動関数	HL	LCAO MO	DFT
$\Delta T / \text{eV}$	-5.01	-4.22	+3.16
$\Delta V / \text{eV}$	+2.53	+1.33	-7.92
D_e / eV	2.48	2.88	4.76

かという問いに対し、まちがった解答を与えていることがわかる。

しかし、著者の見た範囲では、日本人の書いた教科書は、すべて、(1)式あるいは(2)式を用いて、水素分子の結合を説明している。また多くの教科書で、プラスとプラスの位相で波動関数が重なり、原子核間の電子密度が増加し、静電的に引き合うため結合が生じると書かれている^{7), 9), 15) - 18), 26), 27), 30), 35), 37)}。この説明は、正しくない。2つの正電荷をもつ原子核から引力を受け、電子の存在確率分布が原子核に近づき、ポテンシャルエネルギーが低下し、化学結合が生じるのである^{48), 51)}。

スケールファクター、すなわち水素原子の波動関数の指数の係数に(8)式のようにパラメーター (ζ) を導入することより、ビリアル定理を満足する波動関数を得られることが分かっている^{52) - 55)}。

$$\chi = \exp\left(-\frac{\zeta}{a_0}r\right) \quad (8)$$

ここで、 a_0 はボーア半径、 r は原子核の中心からの距離である。ビリアル定理を満たす、より真に近い波動関数では、スケールファクターは1以上となる。すなわち、2つの水素原子から水素分子を形成することにより、電子は原子核の近くに在る確率が高くなる。そのためポテンシャルエネルギーが下がり結合が生じるのである⁵²⁾。

ポテンシャルエネルギーとしては、原子核の位置に電子があるのが最もエネルギーが低いが、不確定性原理のため、電子は、原子核には引き込まれず、ある分布をもって2つの原子核のまわりに存在することになる³¹⁾。

井戸型ポテンシャルで、水素分子ができる理由を説明している本もある³⁷⁾。

ポテンシャルが、 $V = 0$ ($0 \leq x \leq L$)、 $V = \infty$ ($x < 0$, $L < x$) の時の質量 m の電子の運動エネルギーは

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n=1, 2, 3 \cdots \quad (9)$$

となる。最低のエネルギー状態は、 $n=1$ で

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad (10)$$

となる。この状態に2つ電子が入ると

$$E = 2E_1 = \frac{h^2}{4mL^2} \quad (11)$$

となる。一方、この2倍の幅の井戸型ポテンシャル $V = 0$ ($0 \leq x \leq 2L$), $V = \infty$ ($x < 0, 2L < x$) の場合のエネルギーは、

$$E_n' = \frac{n^2 h^2}{32mL^2} \quad (12)$$

最低エネルギー $n=1$ のオービタルに2つの電子が入ると、

$$E' = 2E_1' = \frac{h^2}{16mL^2} \quad (13)$$

幅 L の2つの井戸に一つずつ電子を入れるより、幅 $2L$ の井戸に2つの電子を入れる方が、エネルギーが小さくなる。水素分子でも同様に、2つの水素が近づいて、電子の動ける範囲が増えれば、運動エネルギーが低下するから、水素分子が生成すると説明する。しかし、これは、上で述べたように、HL法の説明にはなっているが、実際は、ポテンシャルエネルギーの低下により、水素分子は、生成しなければならないから、間違っている。

ただし、電子の動ける範囲の増加による運動エネルギーの低下の効果は、2つの水素が遠方から近づいてきて、水素分子を形成する途中段階では、現れている。Riouxの論文⁵⁶⁾に、運動エネルギー、ポテンシャルエネルギー、全エネルギーの原子間距離依存性が載っている。水素分子が遠方から近づく途中では、その効果で運動エネルギーが低下する。しかし、その後運動エネルギーは、上昇し、平衡の位置では、ポテンシャルエネルギーの低下により安定化が大きくなり、2つの水素原子のときより運動エネルギーは大きくなる。運動エネルギーの増加とポテンシャルエネルギーの減少の和が最小となる位置が平均の分子間距離となる。

3. 重要な問題の物理的意味を説明しているか？

3.1 なぜ水素原子の電子は、原子核に突入しないのか？

古典力学では、原子や分子の性質を説明できず、量子力学が必要である例の一つとして、電子が原子核に引き込まれず、ある広がりを持って電子が分布していることがいくつかの教科書で、書かれている^{6) - 10), 12), 17), 18), 23), 41), 45), 52)}。

原子核の周りを回る電子は、古典力学では、原子核の周りを回っていると、電磁波を出しながら、原子核に引き込まなければならない。しかし、量子力学のどのような効果により、原子核に引き込まれず、電子がボーア半径程度に広がるようになるのか、説明され

ている教科書は、非常に少ない。

著者の見た限り、上で引用した教科書のどれにも、その理由が、きちんと書かれていない。シュレーディンガー方程式を水素原子について解くと、ボーア半径程度に、広がった解が得られるからと説明していると言えなくもないが、これでは、量子力学のどういう性質が、このような結果をもたらすのか、わからない。

電子が、原子核に引き込まれないのは、量子力学の持つ不確定性原理という性質のためである。水素が原子核に入り込むとはば位置の不確定性がゼロとなり、運動量は無限大の大きさをとらなくてはならなくなる。だから、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和が極小になるように、水素原子の電子は広がりをもって分布しているのである。

この疑問に、このように、はっきりと答えを書いているのは、著者が知る範囲では、量子力学とタイトルのついた本であるが、市川の本⁵⁷⁾と野村の本⁵⁸⁾位である。野村の本では、実際に水素の電子の平均半径がボーア半径程度になることを、不確定性原理を元に見積もった例題が記載されている。

3.2 なぜ水素原子の角運動量は、 $\sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ であり、 $\ell\hbar$ にならないのか？

細かい問題かも知れないが、なぜ水素原子の角運動量が、 $\sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ のような変な値になるか、注意深い学生は、不思議に感じると思う。そのことについてきちんと説明している本は、非常に少ない。

これは、不確定性原理を満たすためである。著者の調べた範囲では、小尾と渋谷による本⁶⁾のみにこのことが書かれている。

この本に補足し、数式を使ってもう少し詳しく書くと、角運動量の x, y, z 成分の角演算子は交換せず、不確定性原理により、角運動量の x 成分の不確定性を ΔL_x 、角運動量の y 成分の不確定性を ΔL_y 、原子の波動関数を ψ_{n, ℓ, m_ℓ} 、 x 成分の波動関数の演算子を $\hat{L}_x$ 、 y 成分の波動関数の演算子を $\hat{L}_y$ 、 z 成分の波動関数の演算子を $\hat{L}_z$ とすると、次のような不確定性関係を満たさなくてはならない⁵⁹⁾。

$$\begin{aligned} \Delta L_x \cdot \Delta L_y &\geq \frac{1}{2} \left| \int \psi_{n, \ell, m_\ell}^* [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \psi_{n, \ell, m_\ell} d\tau \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \int \psi_{n, \ell, m_\ell} i\hbar \hat{L}_z \psi_{n, \ell, m_\ell} d\tau \right| = \frac{1}{2} \hbar^2 m_\ell \end{aligned} \quad (14)$$

方位量子数 ℓ の場合の角運動量の z 成分 $= m_\ell \hbar$ は、次のような値を持つ；

$$-\ell\hbar, -(\ell-1)\hbar, -(\ell-2)\hbar, \dots, (\ell-2)\hbar, (\ell-1)\hbar, \ell\hbar \quad (15)$$

もし角運動量の大きさが、 $\ell\hbar$ であったとすると、角運動量の z 成分 $= \ell\hbar$ の場合、角運動量の x 成分、 y 成分は、ゼロと確定してしまい、不確定性 ΔL_x , ΔL_y は、ゼロだから、上の(14)の不等式を満たさない。すなわち、不確定性原理を満たすために、水素原子の角運動量は、

$\sqrt{l(l+1)}\hbar$ となり、角運動量の z 成分 $= l\hbar$ の場合でも、 ΔL_x , ΔL_y に不確定性を残すようになっているのである。

3.3 不確定性原理の説明

不確定性原理は、量子力学の基礎原理から数式的に導かれるものである⁵⁸⁾。むしろ、不確定性原理をみただけで、量子力学の体系が作られている¹²⁾ と言っても良い。このことが、きちんと書かれていない教科書が多い。原理という言葉から、これは、実験事実などから求められたものと誤解する学生がいるかもしれない。

また、不確定性原理が全く出てこない量子化学の教科書もある^{11), 14), 19), 22), 23), 40), 42), 45)}。不確定性原理は、量子力学の最も重要な性質の一つであるから、記述がないのは、問題であると思う。

3.4 混成軌道の扱い方

sp^3 , sp^2 , sp などの混成軌道は、原子価結合法で、局所的な結合を説明するために導入されるもので、そのことをきちんと説明すべきであろう。例えばメタンの分子軌道を計算しても、 sp^3 のような4つの等価な分子軌道が解として、でてくるわけではない。

原子価結合法の立場であるということをきちんと記述してある本もあるが^{10), 24), 28), 32), 44)}、分子軌道法と混同し、混乱を招きそうな書き方のものが多くある^{8), 9), 11) - 13), 16), 18), 20), 21), 26), 29), 33), 35), 37), 41), 42)}。

混成軌道 sp^3 , sp^2 , sp などは、有機化学だけでなく、物理化学など他の化学分野でも、いろいろなところで使われる概念である。Hawardの本²⁴⁾ に書かれた次の記述が良く混成軌道の立場を表している：“混成軌道は取り扱っている原子のシュレーディンガー方程式の真の解でなく、厳密な量子論の産物とは言えない。しかし、それらは多原子分子の形を直感的にきめるため、きわめて有効に用いられることが多い。”

混成軌道は、誤解を招きやすい概念であるが、化学の関係する学科の学生に教えないわけにはいかない。あくまでも原子価結合法の立場から、結合の原子価を説明するために導入したものであることやHawardの書いているようなことを十分説明してから、教えるべきであると思う。

4. どのように量子化学の教科書は記述されるべきか

現在は、簡単な分子なら、普通のパソコンでも比較的簡単に、エネルギーや分子軌道などが計算できるようになってきた。紙と鉛筆で計算できる範囲の近似を使った分子軌道だけでなく、学生自身が、簡単に、様々な分子の分子軌道や電子密度分布をパソコン上で見ることができる。

量子化学では、量子力学の導入が必要な理由、量子力学の基本的原理や波動関数の持つ意味を教え、簡単

な系の波動関数の解き方については、いくつか教えるべきであろうが、HL法など定性的にもまちがっている近似計算を詳しく解説することはやめ、量子力学のどのような性質が、古典力学で説明できないことを説明できるようになるのか、どのような効果が量子力学を使うと表れるのかを教えることが、非常に重要であると著者は考える。

また、分子結合の部分になったら、HL法やLCAO MO法などの間違った答えを与える方法で水素分子の化学結合について教えるのではなく、きちんとビリアル定理を満たすように求めた波動関数や電子の存在確率を図示し、2つの水素原子を重ねた場合との違いから、どのような力によって水素分子が形成されるかを説明すべきだろう。

また、ヒュッケル法による共役系分子の解法を詳しく教える意味は、あまりなくなってきたと著者は考える。このような系も、きちんと精度の良い方法で計算した波動関数や電子の存在確率を示し、反応性などを教えるべきだと思う。

等核二原子分子の電子状態について、多くの教科書^{6), 8), 10), 12), 18), 21), 23), 24), 27), 33), 40), 41)} で、それぞれの原子軌道との重なり（すなわち単純なLCAO MO法で考えていることになる）からそれぞれの分子の化学結合の違いが説明されている。

原子軌道の同符号同士の部分が重なると、結合性軌道が形成され、反対符号同士の部分が重なると、反結合性軌道ができる。 σ 結合の方が、 π 結合より、原子軌道間の重なりが大きいから、結合性軌道の形成によるエネルギーの低下が大きいなど分子軌道の重なり方の符号と重なりで、形成される分子軌道のエネルギーや形が説明されている。

それらの結合性軌道と反結合性軌道に、それぞれの原子の電子を順番に詰めてゆくことにより、ヘリウムやベリリウムでは2原子分子が形成されないこと、酸素分子が三重項になること等がうまく説明できる。

実際、いくつかの分子について著者の行ってみた範囲では、きちんと分子軌道法で分子軌道を計算してみても、定性的には、エネルギー関係や分子軌道の形は、そのような単純な考えから予想されるようになる。

しかし、このような単なる原子軌道の重ね合わせで議論することは、水素分子の結合で単純なLCAO MO法で計算した場合と同様な問題を、抱えているはずである。分子軌道をビリアル定理を満たす波動関数で、きちんと計算し、その結果を示すとともに、かなり面倒な仕事かもしれないが、なぜこのようなエネルギー関係や分子軌道の形が形成されるのか、原子軌道と分子軌道の電子分布の違いなど、きちんとした分析が必要であろう。その上で、分子軌道の形成によりどのような電子密度分布の違いが現れ、どういう力が結合に寄与しているか説明できることが望ましい。

また、最近では、密度汎関数法 (Density Functional Theory, DFT) による計算が、研究では多用されている。DFT について、簡単に説明されている教科書もいくつかある^{28), 60)}。DFT については、学部 4 年生や大学院で用いられる教科書では、その原理や解法の概略などの解説が記述されるべきであろう。

参 考 文 献

- 1) Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G. A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X. H., Izmaylov H. P., A. F.; Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J. L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T.; Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J. A., Jr., Peralta J. E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J. J., Brothers E., Kudin K. N., Staroverov V. N., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J. C., Iyengar S. S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam N. J., Klene M., Knox J. E., Cross J. B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R. E., Yazyev O., Austin A. J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J. W., Martin R. L., Morokuma K., Zakrzewski V. G., Voth G. A., Salvador P., Dannenberg J. J., Dapprich S., Daniels A. D., Farkas O., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cioslowski J., Fox D. J., Gaussian 09 ver. C.01 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2011)
- 2) Granovsky A. A. www Firefly version 7.1.G, <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>, 2012
- 3) M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.Su, T.L.Windus, M.Dupuis J.A.Montgomery: The General Atomic and Molecular Electronic Structure System, J.Comput.Chem. 14 – 11, pp.1347 – 1363, 1993
- 4) Neese F. www ORCA Version 2.9 <http://www.thch.uni-bonn.de/tc/orca/>, 2012
- 5) Suenaga M.: PC GAMESSのための新しい計算化学統合環境Facioの開発, J. Comput. Chem. Jpn. 4 – 1, pp.25 – 32, 2005
- 6) 小尾欣一 渋谷一彦: 基礎量子化学, 化学同人 京都, 2002
- 7) 齋藤勝裕: 絶対わかる化学結合, 講談社, 2003
- 8) 原田義也: 量子化学, 裳華房, 2007
- 9) 齋藤勝裕: 絶対わかる量子化学, 講談社, 2004
- 10) Winter M. J., 西本吉助 訳: フレッシュマンのための化学結合論, 化学同人, 1996
- 11) 伊藤和明: 物理化学 2, 量子化学編 化学同人, 2008
- 12) 阿部正紀: はじめて学ぶ量子化学, 培風館, 1996
- 13) 濱田嘉昭 大野公一: 量子化学, 放送大学教育振興会, 2009
- 14) 中嶋隆人: 量子化学: 分子軌道法の理解のために, 裳華房, 2009
- 15) 齋藤勝裕: わかる×わかった! 量子化学, オーム社, 2009
- 16) 山内 淳: 基礎物理化学 I – 原子・分子の量子論 –, サイエンス社, 2004
- 17) 真船文隆: 量子化学: 基礎からのアプローチ, 化学同人, 2008
- 18) 福岡智人: 単位が取れる量子化学ノート, 講談社, 2007
- 19) 友田修司: 基礎量子化学: 軌道概念で化学を考える, 東京大学出版会, 2007
- 20) 寺阪利孝, 森 聖治: 量子物理化学入門, 三共出版, 2007
- 21) 高塚和夫: 化学結合論入門, 東京大学出版会, 2007
- 22) 中田宗隆: 演習による基本の理解, 東京化学同人, 2006
- 23) 中田宗隆: なっとくする量子化学, 講談社, 2005
- 24) Hayward D. O., 立花明知 訳: 入門量子化学, 化学同人, 2005
- 25) 齋藤勝裕: 絶対わかる量子化学, 講談社, 2004
- 26) 馬場正昭: 基礎量子化学: 量子論から分子をみる, サイエンス社, 2004
- 27) 平尾公彦 濱田嘉昭: 物質の科学・量子化学, 放送大学教育振興会, 2003
- 28) 上田豊甫: 1からはじめる量子化学, 三共出版, 2003
- 29) 山崎 巖: 有機量子化学と光化学, 一麦出版社, 2003
- 30) 大野公一, 山門英雄, 岸本直樹: 図説量子化学: 分子軌道への視覚的アプローチ, 裳華房, 2002
- 31) 志田忠正: 化学結合, 岩波書店, 2001
- 32) 中島 威, 藤村勇一: 現代量子化学の基礎, 共立出版, 1999
- 33) 松林玄悦: 化学結合の基礎, 第2版, 三共出版, 1999
- 34) 山口裕之 寺阪利孝: 基礎量子化学, 三共出版, 1998
- 35) 菊池 修: 基礎量子化学, 朝倉書店, 1997
- 36) 近藤 保, 真船文隆: 量子化学, 裳華房, 1997
- 37) 井上晴夫: 量子化学 I, 波動方程式の理解, 丸善, 1996
- 38) 中村賢市郎: 量子物理化学の基礎, 東海大学出版会, 1996
- 39) 阿武聡信: 量子化学基礎の基礎, 化学同人, 1996
- 40) 中田宗隆: 基本の考え方16章, 東京化学同人, 1995
- 41) 小笠原正明, 田地川浩人: 化学結合の量子論入門,

三共出版, 1994

- 42) 細矢治夫：絵とき量子化学入門, オーム社, 1993
- 43) 大野公一：量子物理化学, 東京大学出版会, 1989
- 44) 大岩正芳：初等量子化学：その計算と理論, 化学同人, 1988
- 45) 藤谷正一, 木野邑恭三, 石原武司：絵とき化学結合の見方・考え方, オーム社, 1987
- 46) Heitler W. London F.: Interaction of neutral atoms and homopolar binding according to the quantum mechanics, Z. Phys. 44, pp.455–472, 1927
- 47) Hirschfelder J. O. Kincaid J. F.: Application of the Virial Theorem to Approximate Molecular and Metallic Eigenfunctions, Physical Review. 52-6, pp.658–661, 1937
- 48) Ruedenberg K.: The Physical Nature of the Chemical Bond, Rev. Mod. Phys. 34–2, pp.326–376, 1962
- 49) 石黒英一：化学結合の分析, 日本物理学会誌, 29–5, pp.412–419, 1974
- 50) Eyring H., Walter J. Kimball G. E., Quantum Chemistry, John Wiley & Sons, Inc., New York, pp.355–358, 1944
- 51) Gordon M. S. Jensen J. H.: Perspective on “The physical nature of the chemical bond”, Theor. Chem. Acc. 103, pp.248–251, 2000
- 52) Hanna M. W., 柴田周三 訳：化学のための量子力学, 培風館, 1985
- 53) Finkelstein B. N. Horowitz G. E.: The energy of

the helium atom and of the positive hydrogen ion in the normal state, Z. Phys. 48, pp.118–122, 1928

- 54) Wang S. C.: The problem of the normal hydrogen molecule in the new quantum mechanics, Phys. Rev. 31, pp.579–586, 1928
- 55) Rosen N.: The normal state of the hydrogen molecule, Phys. Rev. 38, pp.2099–2114, 1931
- 56) Rioux F.: The Covalent Bond Examined Using the Virial Theorem, Chem. Educator. 8–1, pp.10–12, 2003
- 57) 市川恒樹：物質科学のための量子力学, 三共出版, 2002
- 58) 野村昭一郎：量子力学入門, 第5版, コロナ社, 1977
- 59) 小川 哲：量子力学講義, サイエンス社, 2006
- 60) Atkins P. Paula J. d., 千原秀昭, 中村亘男 訳：物理化学, 第8版, 東京化学同人, 2009

.....

著 者 紹 介



小泉 均

東京工業大学理学部化学科卒業
同大学大学院博士課程中退, 理学博士. 北海道大学工学部助手を経て, 現在, 同大学大学院工学研究院准教授.
所属学会 日本化学会, 高分子学会, 応用物理学会, 日本放射線化学会
連絡先 〒060-8628
札幌市北区北13条西8丁目
E-mail : koizumih@eng.hokudai.ac.jp