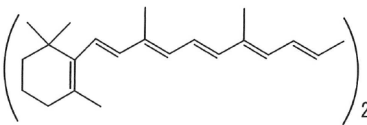
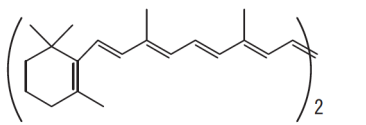
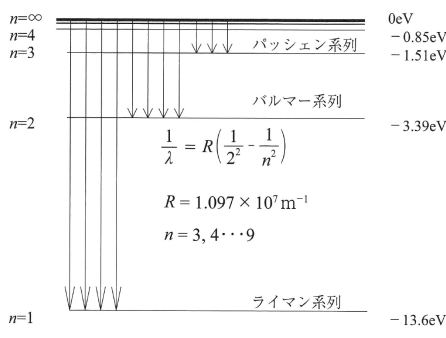
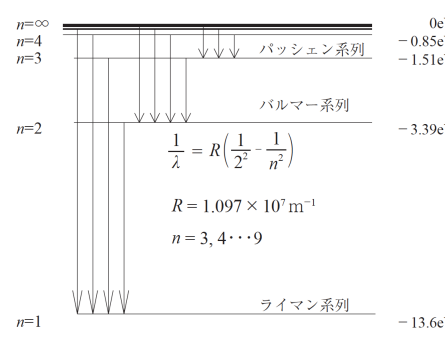


『有機分子の分子軌道計算と活用』

2013年4月10日発行初版用正誤表

頁	箇所	誤	正																																																														
2	表 1.1 1	…白色光の輝線スペクトルの屈折率との関係を解明	…白色光を虹色のスペクトルに分解し，白色光に様々な色の光が含まれることを発見																																																														
2	本文 5 行目	UV（電子吸収）スペクトル解析	UV・Vis（電子吸収）スペクトル解析																																																														
3	表 1.2 キャプション	(抜粋)	(第6周期以降省略)																																																														
4	図 1.1 枠内2行目	UV	UV・Vis																																																														
4	図 1.2 β-カロテンの構造式																																																																
6	図 1.4 上の表	<p>水素原子の波長観測（可視領域：バルマー系列）</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>波長 (nm)</th> <th>軌道 n (from)</th> <th>軌道 2 (to)</th> <th>色</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>383.5</td><td>9</td><td>2</td><td>赤紫</td></tr> <tr><td>388.9</td><td>8</td><td>2</td><td>紫</td></tr> <tr><td>397</td><td>7</td><td>2</td><td>紫</td></tr> <tr><td>410.2</td><td>6</td><td>2</td><td>青紫</td></tr> <tr><td>434.1</td><td>5</td><td>2</td><td>青</td></tr> <tr><td>486.1</td><td>4</td><td>2</td><td>シアン（青緑）</td></tr> <tr><td>656.3</td><td>3</td><td>2</td><td>赤</td></tr> </tbody> </table>	波長 (nm)	軌道 n (from)	軌道 2 (to)	色	383.5	9	2	赤紫	388.9	8	2	紫	397	7	2	紫	410.2	6	2	青紫	434.1	5	2	青	486.1	4	2	シアン（青緑）	656.3	3	2	赤	<p>水素原子スペクトルの観測波長と計算波長（可視領域：バルマー系列）</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>観測波長 (nm)</th> <th>計算波長 (nm)</th> <th>軌道 n (from)</th> <th>軌道 2 (to)</th> <th>色</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>397.01</td><td>397.04</td><td>7</td><td>2</td><td>紫</td></tr> <tr><td>410.17</td><td>410.21</td><td>6</td><td>2</td><td>青紫</td></tr> <tr><td>434.05</td><td>434.08</td><td>5</td><td>2</td><td>青</td></tr> <tr><td>486.13</td><td>486.17</td><td>4</td><td>2</td><td>シアン（青緑）</td></tr> <tr><td>656.28</td><td>656.34</td><td>3</td><td>2</td><td>赤</td></tr> </tbody> </table>	観測波長 (nm)	計算波長 (nm)	軌道 n (from)	軌道 2 (to)	色	397.01	397.04	7	2	紫	410.17	410.21	6	2	青紫	434.05	434.08	5	2	青	486.13	486.17	4	2	シアン（青緑）	656.28	656.34	3	2	赤
波長 (nm)	軌道 n (from)	軌道 2 (to)	色																																																														
383.5	9	2	赤紫																																																														
388.9	8	2	紫																																																														
397	7	2	紫																																																														
410.2	6	2	青紫																																																														
434.1	5	2	青																																																														
486.1	4	2	シアン（青緑）																																																														
656.3	3	2	赤																																																														
観測波長 (nm)	計算波長 (nm)	軌道 n (from)	軌道 2 (to)	色																																																													
397.01	397.04	7	2	紫																																																													
410.17	410.21	6	2	青紫																																																													
434.05	434.08	5	2	青																																																													
486.13	486.17	4	2	シアン（青緑）																																																													
656.28	656.34	3	2	赤																																																													
6	図 1.4 下の図	 <p> <math display="block">\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)</math> <math display="block">R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}</math> <math display="block">n = 3, 4, \dots, 9</math> </p>	 <p> <math display="block">\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)</math> <math display="block">R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}</math> <math display="block">n = 3, 4, \dots, 9</math> </p>																																																														
6	本文 5 行目	$1J = \dots = 0.629 \times 10^{19} \text{ eV}$	$1J = \dots = 6.24 \times 10^{18} \text{ eV}$																																																														
8	表 1.3 右下の式	$Nh \frac{1}{\lambda}$	$Nhc/\lambda$																																																														
13	7行目 文末に追記	…与える。	…与える。波動関数の説明は安積によるものが詳しい。																																																														

13	式 2-21	$\chi_{1,0,0} = \chi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right) e^{-\rho/2}$	$\chi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2}$
13	式 2-22	$\chi_{2,0,0} = \chi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$	$\chi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2}$
13	式 2-23	$\chi_{2,1,0} = \chi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos\theta$	$\chi_{2pz} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos\theta$
13	式 2-24	$\chi_{2,1,+1} = \chi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\theta \cos\varphi$	$\chi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\theta \cos\varphi$
13	式 2-25	$\chi_{2,1,-1} = \chi_{2pz} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\theta \sin\varphi$	$\chi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin\theta \sin\varphi$
15	文献に追加		安積徹, 学部学生のための量子化学講義ノート前編, 分子科学会 Archives ( <a href="http://j-molsci.jp/archives/">http://j-molsci.jp/archives/</a> (2015年7月17日アクセス)), AC0005 (2008), p. 246.
28	図 3.4 キャプションに追加		(本書添付 CD に収録されているのは SCIGRESS MO Compact 限定版だが、画面構成は同じである)
31	図 3.8 (a) キャプションに追加	入力 (.dat)	入力 (.dat) (WinMOPAC)
85	表 6.3 中段	HOMO:Root No. 10, LUMO:Root No. 11	HOMO:Root No. 11, LUMO:Root No. 12
88	表 6.5 中段	HOMO:Root No. 9, LUMO:Root No. 10	HOMO:Root No. 10, LUMO:Root No. 11
93	表 7.1 ベンゼンの $\epsilon_{\max}$	6,000	60,000
96	図 7.2 (a)	<p>(a) 基底配置と励起配置</p> <p>エネルギー <math>\phi_0</math> <math>\phi_{2,3}</math> <math>\phi_{2,4}</math> <math>\phi_{1,3}</math> <math>\phi_{1,4}</math>  0 1.236<math>\beta</math> 2.236<math>\beta</math> 2.236<math>\beta</math> 3.236<math>\beta</math></p>	<p>(a) 基底配置と励起配置</p> <p>エネルギー <math>\phi_0</math> <math>\phi_{2,3}</math> <math>\phi_{2,4}</math> <math>\phi_{1,3}</math> <math>\phi_{1,4}</math>  0 1.236<math>\beta</math> 2.236<math>\beta</math> 2.236<math>\beta</math> 3.236<math>\beta</math></p>
108	表 8.2 中段	HOMO:Root No. 22	HOMO:Root No. 24

117	☒ 8.14	<p>電荷 HOMO (-10.5 eV) IP = 10.5 eV</p> <p>HOMO (-10.6 eV) LUMO (-1.6 eV)</p>	<p>電荷 HOMO (-10.5 eV) IP = 10.5 eV</p> <p>HOMO (-10.6 eV) LUMO (-1.6 eV)</p>
117	☒ 8.15	<p>電荷 HOMO (-8.46 eV) LUMO (0.68 eV) IP=8.46eV</p>	<p>電荷 HOMO (-8.46 eV) LUMO (0.68 eV) IP=8.46eV</p>
124	☒ 8.25	<p>電荷 HOMO (-10.5eV) IP=10.5eV</p> <p>HOMO (-10.6eV) LUMO (-1.6eV)</p>	<p>電荷 HOMO (-10.5eV) IP=10.5eV</p> <p>HOMO (-10.6eV) LUMO (-1.6eV)</p>
124	☒ 8.26	<p>電荷 HOMO (-7.98eV) LUMO (0.78eV) IP=7.98eV</p>	<p>電荷 HOMO (-7.98eV) LUMO (0.78eV) IP=7.98eV</p>
159	表 11.2 (13)行の二面角	0.0000000	-90.0000000
181	[2.1]の3行目	電子分布	電子の確率分布