

学部生が学ぶべき物理化学の基礎

基礎コース物理化学

I. 量子化学

II. 分子分光学

中田宗隆 著

A5判並製
I: 224 ページ
II: 216 ページ
定価: 各 2400 円 + 税
東京化学同人



本書(2冊)は、これまでに多くの物理化学分野のテキストを著している中田宗隆先生による『基礎コース物理化学』シリーズ(全4巻)の前半2巻である。いずれの巻も、「量子化学」と「分子分光学」の基礎として学部学生が学んでおくべき重要な事項について、必要な数式の記述をできるだけ省くことなく、それでも高等学校の物理と数学の知識があれば学部学生が一人で読み進められるように、丁寧に解説したテキストである。量子化学と分子分光学は、中田先生の研究上の専門分野でもあり、これらの本は、先生の研究者およびテキスト執筆者としての豊富な知識と経験を盛り込んだ完成形に近いものと感じた。

第I巻「量子化学」は、第I部：原子の量子論(1~10章)と第II部：分子の量子論(11~20章)からなる。第I部では、量子論が必要となった歴史的な実験事実の説明から始まり、水素原子と水素類似原子の波動関数と量子数について丁寧に説明した後、パウリの排他原理とフントの規則の説明を経て、多電子原子の電子配置と電子状態までを解説している。第II部では、最も単純な水素分子イオン H_2^+ のLCAO(linear combination of atomic orbitals)近似による分子軌道(MO)から始まり、等核および異核二原子分子のMOと多原子分子の三つの混成軌道の説明を経て、遷移金属錯体の配位

結合や共役二重結合分子のHückel近似までを幅広く解説している。

第II巻「分子分光学」も、第I部：二原子分子の分光学(1~9章)と第II部：多原子分子の分光学(10~18章)からなる。つまり、どちらの巻も二部構成で、それぞれの部に半数の章が割り当てられており、章立ては理路整然としており、章の順に学習すればよくなっている。第II巻の第I部では、二原子分子を対象に、並進運動と分子内運動(回転運動と振動運動)の分離、剛体回転子と調和振動子の量子論、吸収とラマン散乱による回転および振動スペクトル、さらに、振動回転スペクトルと電子スペクトルまで幅広く解説している。第II部では、直線分子、平面分子、立体分子に分けて、それぞれの回転および振動スペクトルについて、基本的に1章ずつを割いて解説している。第II巻で、特に同分野の類書では見られない特徴的な章は、第14章「基準振動の計算:GF行列法」と第18章「電子励起状態の振動スペクトル」である。第14章、すなわちGF行列法については、多原子分子における並進運動と分子内運動の分離、さらに、分子内座標と分子内対称座標の概念とそれらの基準振動への寄与について、より理解を深めさせるために1章を割いたと思われる。また、第18章では、マトリックス単離赤外吸収分光と過渡ラマン分光による電子

励起状態分子の振動スペクトルについて解説している。中田先生は前者の分光法の第一人者であり、その応用例として、電子励起状態分子の振動スペクトルを取上げ、密度汎関数法による解析までやさしく解説している。

ただし、2冊とも丁寧に解説しているとはいえ、ともに200ページちょっとのなかで、上述のような量子化学と分子分光学に関する多くの事項について、数式とその導出を完全に省かずに記述することは無理であろう。より高度な内容や数式までよりきちんとフォローしたい場合には、脚注で引用されている中田宗隆著、『量子化学III 化学者のための数学入門12章』(東京化学同人)や、D. A. McQuarrie, J. D. Simon著、千原秀昭、江口太郎、齋藤一弥訳、『マッカーリ・サイモン物理化学(上・下) 分子論的アプローチ』(東京化学同人)などを手元に置いておきたい。

実は、この書評の執筆をひき受けたことを機に、私の研究室に配属された4年生とこれらの本を輪読したが、いずれの章も1時間から1時間半程度で読み進められ、さらに各章の章末問題(各10題)を解かせることによって、その章の内容の理解度を確認できた。そういう意味では、本書はいずれも、週1回半期の授業でそれぞれの内容をカバーでき、学部学生向けの教科書として適しているように思う。(青山学院大学 坂本章)