

<書評>

たのしい物理化学 2 量子化学

山本 雅博・池田 茂・加納 健司 著 講談社 2024年1月29日発行

Masahiro Yamamoto, Shigeru Ikeda, and Kenji Kano

Joyful Physical Chemistry Volume 2- Quantum Chemistry

本書の感想を述べたいと思います。「量子化学」の教科書が掲げる目標は、分子の電子状態を明らかにし、その反応性がわかるようになることだと思います。この場合、なぜそのような複雑な式が表れて、その式は何を意味するのかという記述が省略されがちです。一方、「量子力学」の教科書では、ミクロな世界がなぜシュレディンガー方程式で記述できるかを詳しく説明していますが、分子の反応性に関して言及されることはほとんどありません。この本は、前半に量子論で用いられる数式の意味や導出方法が非常に詳しく記載されていて、後半に、分子の波動関数についての詳細や、量子化学計算ソフトウェアを使った反応性の理解について詳しく記述されています。「あとがき」にもあるように、著者の山本先生が物理系の研究室に留学した経験が、このように物理と化学の領域を行き来するような教科書を完成させたのではと推測しています。

本書は、160ページから成り(対して、第1巻は272ページ)、手に取った最初の感想は、「思った以上に薄い」でした。丁寧な数式展開が目立ちますが、言葉ではなく数式で物理現象を語っている箇所が多いので、薄くても内容は濃密です。第15章から第23章までである本書では、最初に、熱力学や統計力学で説明できな

い現象を理解するために量子論が生まれたことが紹介されています。17章では、波動方程式を紹介し、ミクロな世界での一般的な波動関数は複素数ということ(重要な事実ですが強調はされていません)を利用してシュレディンガー方程式を導いています。最後に演算子を導入していますが、17章までに出てくる数式は、せいぜい、2階の微分方程式で、少し時間をかければ化学系の初学者でもついていける程度に抑えられています。

18章はわずか8ページしかありませんが、ディラックの記法(ブラ・ケット、 $\langle\psi|\psi\rangle$)、エルミート演算子、演算子の交換関係、不確定性、波動関数の直交性、角運動量のベクトル表示といった、量子化学の理解に必須の情報が凝集されています。Web資料18-1は必読で、ブラ・ケット方式はただ単に、共役な波動関数の積の積分という意味ではなく、波動関数が級数展開できる場合に基底関数さえ決めてしまえば、その展開係数を行列として表すことができる、ということを知っておけば、後に出てくるブラ($\langle\psi|$)やケット($|\psi\rangle$)だけの単独表記などの意味を理解しやすくなると思います。

19章は、伝統的な方法でシュレディンガー方程式を導入していますが、あまり気にしないであろう(しかし重要な考察)、不連続なポテンシャルに対してシュレデ

インガー方程式が成り立つかどうかの議論があります。トンネリングでは、SPMの実例を挙げ、透過率（トンネリング電流）とポテンシャル障壁、透過距離の関係性が詳細に議論されています。

20章では、水素原子に対するシュレディンガー方程式を解いていきますが、ここは難所だと思います。化学系の教科書には通常、（馴染みのない物理、数学が使われるので）ここまで詳細に述べられていないのですが、全て丁寧に詳しく書かれています。この章を読むと、s軌道やp軌道の形や、各軌道における（電子スピンを除いた）電子収容数がわかります。

21章では、最初に、摂動論、変分法と難しい物理数学が続きますが、 π 電子を持つ炭化水素の具体例が出てきて、化学の教科書であることを思い出させてくれます。

22章は第一原理計算に充てられています。密度汎関数理論を使った理論計算は最近非常に利用されていますが、この理論計算の発展の歴史を振り返りながら、その利点、弱点などが非常にわかりやすくまとめられています。

最終章の23章は分光と量子力学についてまとめられていて、光（電磁波）が電子をわずかに揺らす効果を摂動論で考え、光吸収や光放出による基底状態や励起状態への遷移確率などが与えられ、さらに、量子化学計算ソフトを使った赤外吸収、ラマン分光の計算結果も紹介されています。

全体的にカラー印刷でとても見やすく、多くの脚注や物理学者のイラスト、コラム、詩、計算実例など、興味をそそられました。すぐに理解できる内容ではないかもしれませんが、じっくり時間をかけ

て、数式を自分で解いていけば、かなりわかるようになるのではないかと思います。有名な物理化学の教科書とは、内容、形式がかなり異なります。

タイトルにある「たのしい」の意味を考えると、本の見やすさと、工夫された章末課題を自学して得られる「分かった！」という感覚ではないかと想像しています。この本に書かれている内容を全て理解できると、量子論を深く理解できるようになって、さらに楽しさを味わえるのでしょうか？web資料が非常に豊富で、たくさん学べます（学ばないといけないことがあります）。

ポーラログラフ学会の主題である電流電圧曲線の解析には、熱力学、統計力学、速度論が強力な武器になるので、第1巻をお持ちの方は多数いらっしゃると思います。今回の量子化学の分野は電気分析化学にはそれほど関係ないような気もしますが、原子や分子、半導体の電子状態や反応性を理解する上で量子論は必要です。電極反応も、量子論に基づく解析や考察は有用なことがあると思います。「あとがき」に、「40年にわたる量子力学の宿題を必死に解き、その結果として、ここに教科書を書かせていただいている」とあり、そのような凝縮された知見を短時間で（理解できるかどうかは別として）紆余曲折なしに追従できると考えると、非常にお得だと考えます。

（福井大学 石松 亮一）

