

ずっとほしかった、
化学のための数学の教科書・問題集

化学への数学 基本の10章

田中一義 著

定価3630円
A5判, 256ページ
東京化学同人



大学では、すべての問題の解答が書かれた問題集がないのはなぜ? そう思っている人は多いのではないだろうか。実際に教科書や演習書を開いてみても、多くの問題の解答がない。しかも、解答に至る過程が書かれているものは、ほとんどない。大学に入ると自分で勉強するものと教えられるのに問題集がない。期末テスト対策や大学院入試対策は、どうすればよいの? 特に、数学は、自分の手で問題を解かないと身につかないと大学受験で痛いほど経験してきたのに、こんな不満と不安をいっきに解決してくれるのが本書である。

物理化学で学ぶ数学の問題が、170問もある。すべての問題に解答があり、解答に至る計算過程も丁寧に解説されている。なんと、計算過程の途中式が省略されていない。うれしいことに、章末の演習問題にも解答と計算過程が、演習問題の直後に記載されている。問題と解答の繰返しが続くわけではなく、物理化学のテーマごとに紐づけられて問題と解答が配置されている。本書の目的は、化学に必要な数学をツールとして身につけることにあるが、物理化学の教科書にはない式の成り立ちの背景も学ぶことができる。

大学の物理化学の二つの壁は、教科書の多くを占める熱力学と量子化学であることが多い。高校で習ったはずの

熱力学が偏微分で表されると難しく感じる。自分で式を導出しようとしても、なかなか答えにたどり着かないことがある。本書には、熱力学の代表的な関係式が、式の導出過程を含めて、丁寧に解説されている。熱力学における常微分方程式として、化学反応速度論の1次から3次反応、さらに逐次反応の数式と解説も漏れなく記述されている。速度論でつまずいたら、是非とも本書を手にとってもらいたい。

シュレーディンガー方程式と聞くと、まさに大学の講義だと期待が膨らむ。今や、量子コンピュータの研究開発が最盛期なので、よりいっそう、量子化学への期待が高まる。ところが、物理化学の教科書を読み進めると、量子化学の概要はわかるものの、はたと理解が止まることがある。原子1個と電子1個の水素原子のシュレーディンガー方程式でさえ、どこから出てきたかわからない特殊な関数のオンパレードである。しかも、その特殊な関数が、化学では重要なp型やd型などの原子軌道の形を表す。本書は、どの物理化学の教科書でも見たことがない、大学の微分積分までの数学と物理化学的な条件で特殊な関数を導き出し、読者を納得させてくれる。一生に一度の経験として、水素原子のシュレーディンガー方程式を自分の手で解いてみると、量子化学の見通しが変わる可能性大である。

量子化学と深く関係する対称性は、線形代数で学ぶ行列を用いる。分子軌道を基本とする量子化学では、分子軌道と分子振動の対称性は、分子の光学的性質や磁気的性質の基礎となる。対称性を学ぶと、その重要性はわかるものの、いざ行列を計算してみると、解答までたどり着かないことがある。ここで生じるストレスも、途中の計算式も解説することで、本書が解決してくれる。さらに、対称性の実用的な使い方も学ぶことができる。化学の研究では、量子化学計算が、分野を問わず日常的に使われている。分子軌道や振動モードの計算結果には、対称性が記述されている。この対称性を見ると、どの軌道からどの軌道へ遷移が生じるか、赤外分光に対して活性か、などを瞬時に知ることができる。本書を学ぶことで、計算結果を見る視点をレベルアップできる。

フーリエ解析や確率・統計など、物理化学だけでなく、広く解析に用いられる数式の使い方が、それらの成り立ちと解答つき問題で解説されている。フーリエ展開とフーリエ変換の違いや、二項分布・ポアソン分布・正規分布の関連など、日頃は意識しないことを本書は再認識させてくれる。

全体にわたって、長年、物理化学を教えてきた経験に著者独自の切れ味鋭い視点を加えることで、物理化学のキーとなる数式を自分の手で導き出せ、納得できる構成になっているのが本書の特徴である。物理化学だけでなく、微分積分や行列においても、わからなくなったり、不安になったときに助けてくれる、傍らに置いておきたい化学数学の教科書・問題集である。

大阪大学産業科学研究所
谷口正輝