

まえがき

本書は、2019年に出版した「無機固体化学 構造論・物性論」の姉妹書として執筆した。前著と同様に、著者らが京都大学理学部化学教室や、同志社大学理工学部機能分子・生命化学科で2, 3回生向けに行った講義ノートを基にしている。したがって、基礎的な化学の学習を一通り終えた学部学生を念頭に、より専門的な物性化学、固体化学について、初学者が学習するための手引きとなる内容を読者にわかりやすく、というコンセプトは前著と同じである。ただし、「構造論・物性論」では磁性やバンド理論などを学ぶ上で重要な、量子論的な展開についてはほとんど触れられなかったので、本書ではそれらを中心に、「量子論・電子論」としてまとめたものである。

量子力学、量子化学は、19世紀終わり頃から20世紀初頭にかけて確立された、原子や電子などの微視的な粒子の振る舞いを取り扱うための学問である。したがって著者らが改めて述べるまでもなく、入門書から最新の研究にまで及ぶ専門書まで、すでに多くの書籍が出版されている。またほとんどの大学の理工系学部において、量子論の学習はカリキュラムにとり入れられている。これは、現代の自然科学分野において、量子論を学ぶことは必須であるとされていることを意味している。しかしながら、量子論を専門に学ぶのでなければ、特に化学系学部、学科の講義で学生諸君が教わるのは、中心力場におけるシュレディンガー方程式、すなわちせいぜい水素原子の波動関数や簡単な分子における摂動論、変分法などであろう。つまり、少なくとも筆者らが専門とする固体化学、物性化学などの専門分野との間にはやはり大きなギャップがある。そのギャップを少しでも埋められるような解説書があれば、初学者の敷居を軽減できるのではないかと考えて執筆したつもりである。当然、すべての項目を網羅的に書けるわけではないので、錯体、結晶場、角運動量、原子の周期性、遍歴電子磁性などのトピックスに絞って、それらを学ぶ上で必要最小限の知識をまとめたつもりである。

本書の内容は以下のとおりである。1章は、水素原子のボーア模型と量子論として、量子論的な描像を中心とした導入部としている。量子論の原点ともいえるべき、水素原子スペクトルから、原子の構造がどのように明らかにされたか、歴史的な経緯にも触れながら要点をまとめた。

2章は、水素様原子モデルと角運動量の量子力学の基礎として、中心力場でのシュレディンガー方程式の問題と、角運動量の量子論を扱い、3章以降の結晶や錯体、さ

ii まえがき

らには多電子系などの具体的な例を考える上での基礎概念を述べた。

3~5章は、量子論・電子論の具体例として、固体や錯体における結晶場・配位子場について述べた。固体の特徴的な電気的、磁氣的、光学的な性質は、化合物や結晶の中で遷移金属原子特有の電子状態に由来することが多い。3章では、まずは簡単な錯体モデルを用いて、遷移金属におけるd軌道分裂などを議論する。

4章では、3章に引き続き、結晶場の安定化と電子状態を考察する。高スピン、低スピン状態、軌道角運動量の消失、分光学的序列、ヤーン-テラー効果などについて概観する。

5章では、結晶場に基づく遷移金属化合物の光学的性質とその構造についてまとめた。特に結晶場の強弱などと、遷移金属原子のスペクトル(電子遷移)との関係を示す、オーゲルダイヤグラムや田辺-菅野ダイヤグラムについてまとめた。また結晶場と構造や熱化学的關係も議論した。

6章では、1, 2章で述べた量子論の基礎的事項をもとにして、角運動量について量子論の一般的なエッセンスを述べた。ディラックの記号を用いることにより、エルミート演算子、交換関係などから、角運動量の様々な性質や角運動量子数のとり得る値が自然に導かれる。さらに、多電子原子を記述する上で必要不可欠な角運動量の合成についても、できる限り平易に解説したつもりである。

7章では、2章でも触れたLS項、電子配列、スレーターの方法などについて、6章の議論をふまえて改めてまとめた。角運動量の量子論的な性質と、それを用いて原子の電子状態がどのような対応関係にあるのか、より深く理解していただけたと思う。

8章では、それまでの章で述べたことをもとに、改めて元素の周期性について述べた。無機化学は周期表の化学といっても過言ではなく、単に性質を暗記するのではなく、元素の周期性、規則性と量子論的な側面からどのように対応しているのかについて、理解を進めていただけたものと思う。

9章は、「構造論・物性論」で扱った結晶構造解析における電磁波の応答と同様に、結晶において遍歴する電子を取り扱うことにより、いわゆるバンド電子の振る舞いが導かれることを解説した。すなわち、多数の原子が固体結晶を組んだとき、その中で運動する電子の振る舞いがどのようになるのかを議論する。

10章は、9章のさらに発展的な内容として、遍歴電子が示す磁性について述べた。「構造論・物性論」でも相転移の観点から磁性や超伝導に関して議論したが、本章では量子論・電子論の立場から、遍歴電子の集団電子モードとしての振る舞いを解説した。

以上のような内容について、無機化学の基礎的な学習を終えた学部2, 3回生が順に本書を読み進めて理解できるような構成にしたつもりである。前著と同様に、1章か

ら順に読み進めていただくことを期待しているが、章ごとに内容はある程度まとまっているので、理工系の学部学生だけでなく、大学院生や実際に研究を行っている技術者や開発者にとっても、ご自身の理解の再確認として興味のあるところから読んでいただいても結構である。

前著も含めて、大学教養と固体化学、物性化学等の専門分野の橋渡しが十分にできているのか、執筆を終えた今も心配は尽きないが、引き続き忌憚のないご意見をいただけるとありがたい。

最後に、本書の企画、出版の機会をいただき、また前著と相変わらずの著者らの遅筆により、大変なご迷惑をおかけした株式会社内田老鶴圃の内田学氏ならびに編集部の皆様から感謝したい。

2023年6月

吉村 一良 加藤 将樹

