

新刊紹介

物質科学を学ぶ人の空間群練習帳

北條博彦 著

結晶構造解析は、新しい材料や医薬品の開発、生体内でのタンパク質などの働きを解明する上で必要不可欠になっている。近年では、膨大な結晶構造データをもとに、人工知能を利用した解析の自動化、新規化合物の創出が始まっている。

結晶構造解析の基礎として、結晶構造の分子配列の対称性を記述できる「空間群」がある。ここでいう対称性とは、原子や分子が空間を占有する規則正しさを示す。空間群の考えによると、空間を規則的に埋め尽くすパターンは230通りに分類されるという。本書は空間群練習帳とある通り、空間群の代数的表現としてアフィン変換を用い、実際に問題を解きながら習得する構成になっている。問題の解答は出版社のHPから入手できる。1章「結晶格子」、2章「対称操作と変換行列」では、空間群を学ぶための基礎と数学的に表現するための用語や概念を学ぶことができる。3、4章と5、6章はそれぞれ「結晶の対称操作」と「空間群の等価点一覧表」(前・後編)になっている。4章には三斜晶、単斜晶、直方晶、6章には正方晶、三方晶、六方晶、立方晶の一覧が示してある。初めて学ぶ方や過去に断念した方にとって「空間群」習得の心強い1冊となるであろう。

(ISBN 978-4-339-06653-1・A5判・178ページ・2,600円+税・
2020年刊・コロナ社)

基礎コース物理化学 III 分子動力学

中田宗隆 著

2018年に発刊された同シリーズ「II 分子分光学」の続編である。まず、第I部「気体分子運動論」の第一章～第三章では、気体分子の運動エネルギー、理想気体の状態方程式、気体分子の速度分布・衝突頻度というなじみのある理論について丁寧に記述されている。第4～6章では、単分子(希ガス)、二原子分子(H_2 , N_2 など)、多原子分子(CO_2 , CH_4 , NH_3 など)のそれぞれの場合の分配関数からモル熱容量を求めるという、統計熱力学的な記述がなされている。第7～8章は実在気体の状態方程式とそれに関連した分子間相互作用(永久電気双極子-永久電気双極子、誘起電気双極子-誘起電気双極子、誘起電気双極子-永久電気双極子)である。第II部「分子反応速度論」では、まず第9章で素反応と反応速度式について触れたのち、第10～11章にて並発反応と逐次反応、第12章にて可逆反応・平衡定数に関連したボルツマンプロット・アレニウスプロットといった基本概念が解説されている。第13～15章は複合反応、触媒反応、生体内の酵素反応、活性複合体、遷移状態理論について述べられている。全体を通じて、文章の所々に同シリーズ既刊「I 量子化学」「II 分子分光学」で関連する巻・章の引用があり、読者への便宜が図られている。

(ISBN 978-4-8079-0938-4・A5版・192ページ・2,400円+税・
2020年刊・東京化学同人)