量子化学と高分子科学

中條利一郎 ●東京工業大学工学部

量子力学，統計力学，電気力学——この三つが物理学学科のカリキュラムの中心だと教わって，学生時代にこの三つと等間隔につきあって来た．勉強する時は同じ程度に勉強し，サボる時は同じようにサボり，その結果，成績も同じような点数がついていた．その筆者が卒業研究に統計力学の研究室を選び，やがて高分子で禄を食むようになり，そして今回，量子化学の特集に際して，素描の執筆を求められた．この間の個人的な遍歴を記すことは，量子化学と高分子科学の関係を知るのに，なにがしかの役に立つかもしれない．

地表での潮汐は地球と月と太陽との引力で決まる三体問題である．これはすでに Poincaré によって解析的に解けないことがわかっている．事柄は系が古典的であると量子論的であるとを問わない．三体問題は解けない．原子，分子に話を限れば，解析的に解けるのは水素原子だけで，ヘリウム原子も水素分子イオンもだめ．水素分子になればもう四体問題である．したがって，筆者の学生時代の量子力学的物性論の中心課題は水素分子をできるだけ正確に記述すること，言い換えれば期待値をできるだけ固有値に近づけ，それに対応する波動関数を見つけることであった．それが重要であることは十分認識していたつもりである．しかし，卒業研究として選ぶためには，重要さの認識だけでは迫力に欠ける．何よりも好きでなければならぬ．今にして思えば，筆者は多体系が好きだったのだ．

化学は多体系の学問であり，多体系の量子力学，すなわち，量子力学から量子化学への流れは，量子力学の誕生以来ずっと続いている．Heitler-London や Heisenberg のように，物理学者は量子力学の適用できる化学系の発見に努めて来たし，Pauling や本号執

筆者の一人である福井謙一教授は，化学者として化学系に適用可能な量子化学の建設に努めて来た．しかし，これを多くの人にとってなじみの深いものにしたのは何と言ってもコンピュータの登場である．半経験的分子軌道法と相まって，量子化学が利用可能なものになった．高分子科学の分野で言えば，コンホメーションの計算が可能になり，また，NMR その他の機器分析から得られる情報を，ストーリーとしてつじつまがあっていればがまんするという状態から，定量的な妥当性で議論できるようになった．

ほぼ同じ頃の出来事として，もう一つ忘れてならないのは Woodward-Hoffmann 則の発見である．これは難しい式や計算をしなくても，反応が量子力学の言葉で理解できるようになったという意味で，大きい意義をもつ．熱過程と光過程のいずれが許容であるかが容易に理解できるのは，劣化をはじめ高分子科学の諸分野の発展にも大きく貢献して来た．

このようにみて来ると，量子化学は，いつの間にか筆者のすきな対象になっていた．それで遅ればせながら勉強をはじめたというのが正直なところである．

ここで，*ab initio* 法についてふれるべきであるが，紙幅もつきかけたので，Woodward-Hoffmann 則を勉強していた時の，個人的な驚きをもう一言つけ加えるだけで終りにしたい．波動関数はその2乗が確率密度になる．したがって，波動関数の符号は，パリティといういささか高尚な概念を除いて，問題にならない．これが物理学科で教わった量子力学であった．ところが量子化学では，二つの分子軌道が接近すると，つまり，二つの分子の反応に際して，両者の符号の異同が決定的である．量子化学はすごい学問ではないか？

Riichirô Chûjô, 東京工業大学工学部高分子工学科 (152 東京都目黒区大岡山 2-12-1) 教授・理博
 <略歴> 昭和29年京都大学理学部物理学科卒業，43年東京工業大学助教授，55年同教授，現在に至る。