

理論・計算化学の潮流

中辻 博・長谷川淳也・江原正博

京都大学工学研究科合成・生物化学専攻

ノーベル化学賞は「化学において重要な発見と改良により人類の利益に貢献」した研究者に授与されるとされている。受賞者の研究をたどれば、さまざまな有用な化学反応や現象が発見され、科学における大きなブレイクスルーとなった歴史が見えてくる。これらの受賞はいわば、化学の多様性の発見とその波及効果が評価されてきたわけである。今後ますます化学の多様性が世に見いだされるであろうし、この多様性がそれが化学の醍醐味だろう。化学が多様である理由は、反応にかかわる分子が、百種以上の元素によるさまざまな組み合わせと幾何構造から成り、その分子の組み合わせで起る化学反応がほぼ無限に存在しうるところにある。

理論・計算化学分野におけるノーベル賞受賞者のうち、一九八一年の福井謙一、R・ホフマン、九八年のJ・A・ポープル、W・コーンらは、こうした化学の多様性という意味合いからは、対極的な受賞といえる。これらの受賞は、第一原理である量子力学を化学に適用することによって、福井、ホフマンらは量子論から導き出される化学反応の概念を構築し、ポープル、コーンらは電子計算機を用いて量子論の方程式を解く方法の開発に貢献している。

P・A・M・ディラックが「物理学の大部分と化学の全体の基礎的法則は完全にわかつ

ている」と述べているように、量子力学は、電子が従うべき力学、すなわち化学の反応と現象を説明する力学として提出されたが、得られたシンプルな方程式と、複雑で多様な化学の世界とは、なんと大きな開きがあることだろうか。しかし、現実の系についてのE・シュレーディンガーやディラックの方程式を解いて、多様な化学現象を経験によらずに理解したいという願望は、自然な流れとして量子化学という研究分野を着実かつ堅実に切り開いた。提出されたさまざまな方法論は現実のさまざまな系で試され、鍛え上げられ、実験精度に比肩しうるレベルにまで成長した。そして、ノーベル賞に値する研究分野として評価され、重要性が広く認識されるに至ったのである。量子論の建設を端緒とする泉が、理論・計算化学として化学における大きな潮流を形成するに至った経過をここに振り返ることができる。

福井・ホフマンと化学概念

一九八一年にノーベル化学賞を受賞された福井謙一先生は、化学という学問を、できるだけ経験に頼らず、非経験的な方向に導きたいと考えられた。学生時代に当時、理学部で始まったばかりの量子力学の講義に通い、量子論の教科書や原論文を独学で学ばれた学問

