

巻頭言

化学に論理を

A Little more Theory for Chemistry

Shigeyuki AONO

青野 茂行

金沢大学名誉教授 理学博士

一般化学の実験を受け持っていた時のことである。理論化学専門の私が実験の指導をしても不思議はない。分析化学でいう2族の重金属イオンに硫化水素を通すところである。ある学生がやってきて、“何もできません”。見ていると、彼はおら試薬棚から硫酸を取り出して混ぜてみせた。私はすっかり愉快になって(というのは私と同類のやつが現れたので)、硫酸と硫化水素との違いを真面目に説明した。彼は素直に頷いた。少し考えてみたい。硫酸と硫化水素は、ついでに亜硫酸や硫黄まで並べて、これらにどれほどの違いがあるというのか。酸化数というわけの分からぬものが減っていくだけではないか。

亜鉛に希硫酸をかけると水素がでてくる。今日は硫酸がないから硝酸で間にあわせておこうか？ 教科書にないことを言うと笑われそうな気がする(何ができるか)。一方、銅と硝酸の反応はこまかに書いてあって、酸化窒素や二酸化窒素が発生するとある。そして、硝酸は酸化剤だという。同じものが酸になったり酸化剤になったり、その理由を知りたいものである。

化学反応や分子構造はとどのつまり、電子の挙動で決まり、それを支配するのは量子力学だそうだから、これを勉強することにした。原子価とか、結合角とか、ほぼ満足のゆく説明が得られ、酸素が常磁性であることや、ジボランのような三中心結合まで明らかにしてくれて感激した。

すこし余裕ができたので量子力学を読みなおしてみた。電子は粒子であるとともに波である、なんてたいへん魅力的なことが書いてあり、ご丁寧に写真までついていた。ところがすこし先へ進むと、その波は実在の波ではなく(さっきの写真は何だったのか)、関数空間の確率波なのだそう。量子化学者は、このありもしない波をスパコンで計算し、それで演算子を挟み、でてきた数字を真理だと押しつける。実験の結果だから文句を言うな、という連中より始末が悪いような気がする。もう少し先へ進むと驚いたことに、関数空間の波がいつの間にか実在の波になり、第二量子化という手続きを経て粒子に化けてでる。でたらめじゃないかと量子化学者に話しても、あまりとりあってくれない。

以上とぼけて書いたところもある。然るべき人に尋ねて正しい答を得てほしい。要は、化学者にもっと頭を使ってもらいたいというのが私の気持ちである。