

サイ・テク こらむ 知と技の発信

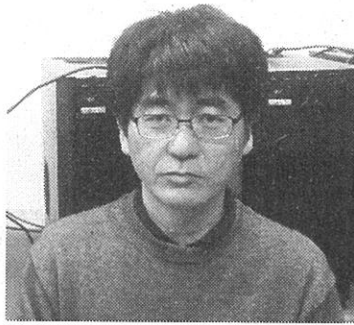
【113】

埼玉大学・理工学研究の現場

■理論化学

理論化学という言葉をご存じでしょうか。理論物理学という物質を記述するのに基本となると、相対論や素粒子論、あるいは宇宙論など、ある程度の世間的認知度があるだろうが、理論化学にはほとんどなじみがないのが実情ではないだろうか。

私は、化学反応がなぜ、どのように起こるのかを知りたくて



高柳 敏幸氏(たかやなぎ・としゆき) 63年生まれ。東京工業大学大学院総合理工学研究科博士課程修了。博士(理学)。日本原子力研究所(現・日本原子力研究開発機構)研究員を経て、04年埼玉大学。07年より現職。専門は量子論に基づいた化学反応動力学の理論的研究。

埼玉経済

化学とコンピュータ

高柳 敏幸 大学院理工学研究科 教授

研究している理論化学者である。

大抵の方は、化学者と言えば白衣やビーカー、フラスコなどを思い浮かべるだろうが、私は白衣も着なければ、実験もしない。私の主な研究道具は計算機(つまりコンピュータ)である。

■方程式で理解
化学反応は、狭い意味では結合の組み換えであり、この現象を支配しているのは原子の中の電子である。電子の運動は量子力学の方程式で記述できるの

で、これを解けば化学反応すべて理解することができるはずである。

■現状と将来
理論化学は一見すると不思議に思えるような化学現象を原理から説明してくれるので、なぜそつなるかを理解することができ

る。今後は、実験結果を説明するだけでなく、結果を予測するために使われると考えられる分子1個だけであれば、コンピュータで完全に計算でき、実験するよりも正確な答えが得られる。例えば、高校の化学ではヘリウムは不活性原子とされ、化合物をつくらないと教わるが、理論化学を利用するとヘリウムを含む分子の存在を予言することができる。私の研究室では最近 He Be O や He Cu F などの分子ができるかと予測している。

また、星間分子と呼ばれる宇宙に存在する分子がどのようにできるかについても研究している。宇宙は希薄で極めて冷たい空間であるため、実験室では宇宙環境を簡単に作り出すことができないが、コンピュータ上にはそのような制約はないからである。

近い将来、理論化学と計算機がもつと発展すれば、何かと何かを混ぜて、どんな生成物がどれくらいできるかをコンピュータで予測できる時代が来るのではないだろうか。

企業、団体商店街などの話題や情報をお寄せ下さい
TEL 048-795-9161 FAX 048-653-9040