

サイ・テック 知と技の発信

埼玉大学・理工学研究の現場

【343】



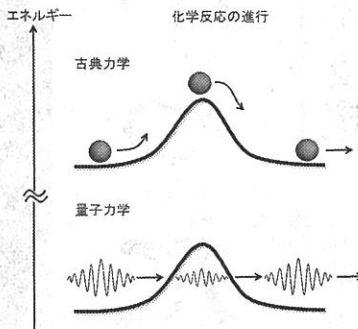
(たかやなぎ としゆき) 1990年理学博士。日本原子力研究所(現、日本原子力研究開発機構)を経て、2004年より埼玉大。専門は理論化学、計算化学。

■実験よりも正確な答え
コンピュータがわれわれの社会に浸透してからの時間が経った。コンピュータが使われるようになったのは1960年代後半くらいだった。コンピュータは実際には常に何らかの計算をしているのだ。それを意識する人はほとんどいないだろう。それくらいコンピュータは人々の生活を変えてしまったと言える。

私の専門である化学分野でコンピュータが使われるようになったのは1960年代後半くらいだった。原子や分子の性質を決めるのは電子の運動であり、それは量子力学の方程式で書くことができる。しかし、それを紙で解くのは不可能に近い。この方程式を解くのにコンピュータ

計算機が化学する時代

高柳 敏幸 教授



が使われ始めたのがその頃である。水素分子に始まり、その後のコンピュータの急速な発展のおかげで、今ではかなり大きな分子についても計算が可能になっている。もちろん、さまざまな物質が複雑に絡み合う化学の諸現象を理解するにはまたまた時間がかかるのであるが、数個の原子からなる分子であれば、通常のパソコンを使っ

て、実験よりも正確な答えを出すことができる。

■原子レベルの可視化

私はコンピュータを使って化学反応の研究をしている。コンピュータの良いところは、原子レベルでの可視化ができることである。したがって、反応がどのようなメカニズムで起こるのかをきちんと理解することができるのである。実はわれわれの体の中で起こる反応には、たいていの場合、水素が関わっている。人体がほとんど水でできていることから容易に想像できるだろう。

水素は元素の中で最も軽いのもので、量子力学的な性質が表れやすい。図は反応が起こる様子を模式的に示している。熱を加えると反応が進むのは、エネルギーの山を登ることができるようになるためである。古典力学で考える「エネルギー」は、水素(重い水素同位体)でできている水(軽い水素同位体)として使われていた。ご覧になった方も思い出す。私は講義の雑談でよくこの映画の話をする。「重水が毒薬として働くのは、量子力学的なトンネル効果の違いによるのかも」

埼玉経済

企業、団体、商店街などの話題や情報をお寄せください
TEL 048・795・9161 FAX 048・653
keizai@saitama-np.co.jp