

化学は数学の発展にいかに関与できるか

細矢治夫

お茶の水女子大学（名誉教授）

1. はじめに

著者は最近、HYLE (International Journal of Philosophy of Chemistry) というインターネットジャーナルから、化学と数学の関わりについての論文の寄稿を依頼された。そこで、"What can mathematical chemistry contribute to the development of mathematics?" という小論を書いた。その要約を紹介する [1]。

化学の長い歴史の中で、数学との深い関わりがどこで生じたかを探ることは極めて難しい。原子・分子の存在の仮説とその実証そのものを数学と切り離して考えることができないからである。しかし、化学の問題が数学の発展に影響を与えたという点では、炭化水素の異性体の数え上げの問題が 1930 年代に Cayley や Polya という数学者達によって解かれ、それによって Euler 以来 200 年間眠り続けて来たグラフ理論が大きな進展を遂げたことに誰も異論を唱えることはできない。そしてそれ以後、有機化学における対称性と異性体の問題は全て解決されたかのように思われて来たのである。

こういう歴史的に大事な事実があるのに、化学の発展に数学を重視しようという大きな意識改革の波が、当の化学者集団の中で広がろうとしないのは極めて残念なことである。そこで改めて、これ以外の問題で化学と数学が密接に関わり合ったことがあるかを考えてみることにしよう。

2. 化学と数学の関わり

上述の Polya の論文が出たのは 1936 年であるが [2]、ちょうどその頃ヨーロッパでは、誕生したばかりの量子力学を原子や分子の問題に適用する試みが物理学者を中心に盛んに行われた。少数の化学者もそれに加わっていた。その成果が、点群の指標表や種々のスペクトルの選択則の諸原理として、今日の量子化学のカリキュラムの中での重要な項目に採用されている。それと関連する結晶の対称性の群論的な取扱いに関しては、多くの著名な数学者の貢献が残されているが、点群に関しては、数学者の目立った寄与はほとんどないのである。

恐らくそういう歴史的な経緯が原因であろうが、今日世界中のほとんどの大学の数学科では、群論のカリキュラムの中で点群は扱われていないのである。つまり、ほとんどの数学者は、点群が何であるかも知らないし、化学の中でそれが如何に重要な役割をもっているかも知らないのである。

そういうこともあって、著者自身は機会あるごとに数学者集団に点群の問題とその重要性

を知ってもらう努力を続けている。

一方近年、グラフェンやナノチューブも含めたフラーレンの研究は、多くの化学者と物理学者をとりこにしている。 C_{60} のサッカーボール構造決定のためには、 I_h 対称性の点群の指標表と、炭素原子の作るネットワークについてのグラフ理論的データベースが不可欠であった。しかし、この問題に関しても、数学者の寄与は皆無であった。

実は、この問題以前にも、数学からの化学への寄与の不十分なことが次第に明らかになっていたのである。それは、飽和炭化水素の異性体の数え上げに関するPolyaの理論の欠陥である。キラル構造の発現する炭素原子が複数個あるような炭化水素やその誘導体での異性体の数え上げの問題は、数学的にもそう簡単には解決されない。

こういう立場からのPolyaの理論の修正と改良を藤田は地道に行っているが、不幸なことに、それを完全に理解できる数学者も化学者も出て来ていないので、彼の孤独な戦いが依然として続いている [3]。数学教育と化学教育の両面の改善が待たれること大である。

3. トポロジカルインデックスについて

かく言う著者も数理化学の展開の中で孤独な戦いを30年以上も続けて来た。しかし、最近の風向きが大変良い方向に変わって来ている。それは、トポロジカルインデックス(Z)が数学の中でかなり重要な役割を果たしていることが次々に判明して来たからである。また、数あるグラフの中でも、従来何の役にも立っていなかった「毛虫グラフ」の Z が化学や数学の様々な問題の中に現れて来るので、その数学的な性質を更に掘り下げることの重要性がわかって来たのである。最近の数学の論文の中に、 Z インデックスや毛虫グラフが散見されるようになっている。

4. 結語

以上のような論理展開から、冒頭にあげた論文の中で著者は次のような結語を書いた。

Mathematics is not the property of a limited number of mathematicians who cannot survey and follow every detail of the rapid, wide and deep development of modern science. Mathematics should be developed by mankind as was the case with the very beginning of its long history. If there happens something wrong in some new mathematics, mathematicians have a right and duty to advise, correct, or improve it. Anyhow, mathematical chemistry will be able to contribute to the development of mathematics by interplaying with mathematicians in the same way as it has been developing up to the present stage as it stands now.

[1] H. Hosoya, *Int. J. Phil Chem. (HYLE)*, **18** (2012) in press.

[2] G. Polya, *Acta Math.*, **68** (1936) 145.

[3] 藤田眞作, 分子の対称性を考慮した有機立体異性体, 日本コンピュータ化学会, 2010年秋季年会 他.