

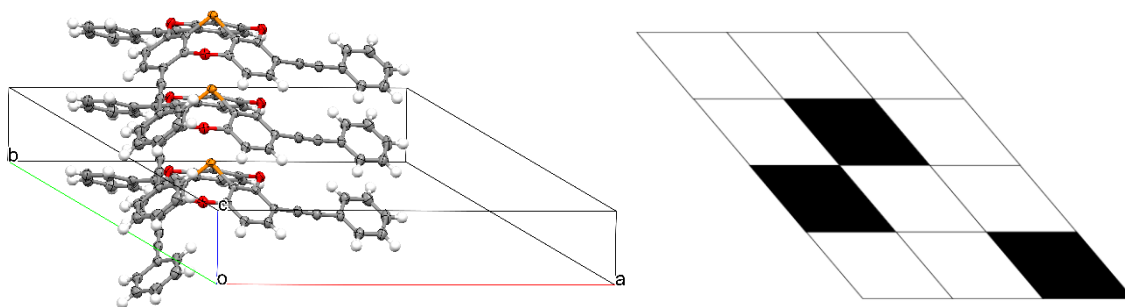


山村 正樹（有機化学）

有機化学者と数学

筆者は高校生までは数学の成績がかなり良かったです。少なくとも大学入試は理数科目だけで困ることはないくらいにはよく出来ました。ところが、大学入学後に有機化学を専門としたため、その後数学を使う機会がほぼ無くなってしまいました。有機化学の研究の大部分がガラス器具の中で薬品を混ぜることなので、紙の上で計算することはほとんどありません（せいぜい薬品の量を計算するくらい）。もちろん、有機化学を行うにしても、量子論や分光学などで数学が無用なわけではないのですが、量子論は簡略化されて分子模型を組めれば計算する必要もなく研究することは出来るし、有機化合物を分析するための分光学はマシンがブラックボックス化されているのでフーリエ変換などを自力で行う必要もありません。そういうわけで大学教養部のときに学んだ数学のことはほとんど忘れていますが、時たま急に数学力が要求されることがあります。その一例を以下に示します。

下の図はある分子の単結晶の構造です。この分子は「おわん」のような形をしていて、おわん同士が重なり合った結晶を作っているのですが、おわんには上向き下向きの方向があることに注意が必要です。積層したおわんの集まりがさらに集まって全体の結晶を作るのですが、上向きと下向きのおわんはほとんど区別できないので、結晶中では向きの異なる単位格子がランダムに混じってきます（下の図の右側：白を上向き、黒を下向きとする）。このようなランダムな構造をもつ結晶を双晶と呼びます。結晶は X 線回折実験により構造決定することができますが、双晶は回折実験のデータはきれいに取ることができるのに単位格子のランダムな配向により構造決定が出来なくなります。このような構造解析では向きが揃うように分子に回転・反転操作を加える必要があり、数学的には 3×3 の行列をかけて分子の向きを揃えることになります（なぜか構造解析のソフトではこの操作入力ができず、自力でインプットファイルを書き換える必要がある）。



他にも、分子会合体を研究したときに会合モデルが存在しないので自分でプログラミングする必要がでたこともありました。こういうことは数年に一回程度しかないのですが、普段数式を扱っていないので非常に苦痛です。しかし、出来ないと研究がデッドエンドを迎えます（世の中には案外こんな理由で日の目を見ない研究はあるようだ）。自力で解決できなければ知ってる人

に聞けばよいとしても、最低限の理解が無いと何を聞いてよいかわからないでしょう。教養の教員らしいことを言うと、自分の専門以外の分野を教養として身に着けることが大事なのだということになるでしょうか。