

報告

量子化学で何を教えるか： 「アトキンス物理化学」の教材研究

金崎英二

徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部 ライフシステム部門

(キーワード：量子化学、学部教育、アトキンス物理化学、教材研究)

On the Teaching of Quantum Chemistry in Undergraduate Course: A Teaching Materials Study of Atkins' Physical Chemistry

Eiji KANEZAKI

Institute for Technology and Science, The University of Tokushima

(Key words: Quantum chemistry, undergraduate course, an attempt of teaching materials study)

1. 何が問題か

「教材研究」とは小中学校や高等学校の先生方と会話する際に聞く言葉である。一定の地域内で同一科目を教える人々が参加して、定期的に研修会を催すことで「教材研究」を実施する場合が多いとのことである。「教材」とは「教授及び学習の材料」(広辞苑)であるから、「教材研究」とは「教える材料(教科書等)について深く理解するため調査・研究すること」と定義できよう。しかし、大学では、「教材研究」はあまり耳にしない言葉である。大学で教える科目は、学生に配布する授業概要(シラバス)や大学の規則に記載される。つまり、経過は少し異なるが、科目名等は予め決まっているということは小中学校や高等学校と同様である。しかし、一つの科目で何をどのように教えるかについては、一定の常識的な縛りはあるものの、大学で教えている人々(「大学人」と呼ぶ)の裁量範囲は大きい。

筆者も大学人の一人であるが、新しく科目を担当する際には、「教材研究」に相当する作業を実施したし、現在も定期的に繰り返し改訂している。他の大学人もおそらく同様であろう。しかし、この作業の内容が、どこかで公開されたということは寡聞にして知らない。この非公開性のために、大学人の「教材研究」は、時間的・空間的に他に伝播せず、教育文化として継承・蓄積されない。このことは、いくつかの問題点を含む様に思われる。第一に、非公開の個人的判断に依存するので、

急速に進歩する学問や激しく変化する社会に対応できない危険を孕む。次に、同じ科目を担当している多くの大学人(殆どは他大学の人々)間での意思の疎通を欠く結果、科目名は同じでも、内容が大きく異なる等の意図しない不都合も起きやすい。もっとも、同じ科目でもその内容に担当者独自の選択があるのは、先に述べた裁量の範囲だと考える。

新制大学発足後、既に半世紀が経過し、多くの若者が大学教育を受ける現在、その教育内容が、非公開の作業に依存する現状はいかがなものであろうか。更に、国立大学の多くが大学院を中心とした組織に変わった今日の学部教育の内容は、先端的知識を与える従来型から、より基礎的な「専門基礎」と呼ばれる知識の伝授に変わりつつある。そのため、教科書を用いて講義することが多くなった。そうであれば、意味するところは少し異なるが、初等・中等教育の場合と同じく「教材研究」を公開で実施する意義があるのではないか。そうは言っても、筆者の力で現状を変えることはできそうにない。そこで、せめて誰かが「教材研究」を自主的に公開すれば、少しは事態が改善するのではないか。このように考えるに至り、「まず隗より始めよ」の故事に習い、本稿では、筆者が担当している「量子化学」の自己流の「教材研究」の概要を公開する。内容・方法等についてのご批判を賜れば幸いである。

2. 「量子化学」の教材研究

徳島大学工学部化学応用工学科（以下「本学科」とする）では、昼間コース3年生の選択科目として、「量子化学」（2単位）を前期に開講しており、平成22年度現在は筆者が担当している。この「量子化学」の「教材研究」を、①教育目的設定②教育内容の吟味③教科書の内容選択④成績評価の順で述べる。

①教育目的設定 シラバス¹⁾記載の「目的」は「系を微視的に記述する方法を学ぶ。特に、原子や分子の電子構造を記述するための基礎的方法を理解する。シュレディンガー波動方程式以降の量子論の基礎概念を、系を拡張しながら順次段階的に理解する」である。量子化学の教育目的を語るには、物理化学史に注目しなければならない。

物理化学が学問として認識されたのは18世紀の熱機関の発明に端を発する熱力学（物理化学では「熱力学及び化学熱力学」と呼ぶ場合が多い）である。その後の物理化学の発展は巨視的議論から微視的議論に移り、20世紀初頭に化学統計熱力学、少し遅れて量子化学が生まれた。化学統計熱力学では、多数の要素が作る集合の巨視的なエネルギーを、個々の要素の微視的エネルギーと関係付ける議論がなされた。一方、量子化学では、分子軌道という概念を用いて分子のエネルギーを計算によって求められることが明らかにされた。熱力学及び化学熱力学、化学統計熱力学及び量子化学等を総称して物理化学と呼ぶ。大学での講義科目も概ねこの分類に従う。

現代化学では、「個々の物質の個性をできるだけ精細に解明し新しい物質現象を見い出すとともに、その基礎にある共通な概念や法則を追求し、物質現象の体系的理解と新しい物質の設計・合成を可能にすることを目的としている。そのためには、物質の個性の発現単位としての分子を中心にして原子、電子、原子核等の微視的粒子の実体と挙動を精細に解明することが重要である」²⁾とされる。原子という単語は、今日、科学や技術の多くの分野で用いられる。その概念自体は遠い昔から知られていたとされるが、その存在や規則性が、周知の事実として確実なものとされるのは19世紀末の「元素の周期律」の提案以降である。その後、

原子についての議論は原子物理学として発展した。特に1920年代の電子の波動方程式（シュレディンガー波動方程式）の提案以降、電子運動を記述する原子軌道を解析的に表現し、そのエネルギーを計算により求めることが可能になった。これ以後、学問としての量子力学が始まり、今日興隆を極めているのは周知の通りである。その発展の経緯に關係してか、分子は原子から構成されるにもかかわらず、化学を専門とする学科において、「核化学」や「放射化学」等少数の科目はあるものの、原子や原子核についての講義は少ない。

今日の物理化学は、「分子という概念を用いて物質の構造・反応・物性を議論する」学問といえるであろう。例えばDNA等の巨大分子は、既に認識可能な実体であるが、多くの分子は直接認識できない。そこで、分子が単に原子の不規則な集団ではなく、はっきりと定義できる化学結合によって形成されることをエネルギー収支の立場から明確にすることが必要である。その重要性は、分子の概念が今日に比べ少し不明瞭だった量子化学の黎明期のみならず、今日も変わらない。

大学での専門科目である「量子化学」では、このエネルギー収支とともに、化学結合の種類と特異性（空間異方性、結合距離等）が分子の属性を決定していることを簡単に述べる。つまり「量子化学」では、分子生成の根源である化学結合の基礎について述べることが主な目的である。實際には、いきなり原子から分子へと進むのは飛躍が大きいために、その間を埋める目的で、幾つかの工夫をするが、この点は次節で述べる。

ここで、高等学校や大学共通教育との連続性を検討する。本学科に入学する多くの学生が、高等学校で履修する化学の科目は、「化学I」と「化学II」である。手許の教科書³⁾によれば、「化学I」では原子やイオンについての記述が主であり、「化学II」では気体や溶液での束一的性質とともに、化学結合の分類が述べられている。従って、化学結合について大学で詳しく学ぶ素地は、高等学校での化学の教育において既に準備されていると考えてよい。また、分子軌道を数学的に取り扱うための簡単な微分・積分法は高等学校の数学に含まれるため、特段の準備は必要ない。分子軌道法

（「MO法」とする）を議論する際に用いられる線形代数の基礎知識は、大学の共通教育の数学に含まれる内容である。これらのことから、大学3年生で量子化学を学習する準備は完了していると考えてよい。

②教育内容の吟味 「量子化学」の内容が原子の取扱いから始まることは前述したとおりである。一方、「量子化学」と関連する科目として、本学科では、「量子化学」に先んじて「量子力学」（2年前期、必修）が開講される。そこで、「量子力学」を担当される工学部基礎講座の先生方と相談し、「量子力学」では「水素原子の原子軌道とエネルギー」迄の説明をお願いしている。したがって、「量子化学」では、「量子力学」に含まれる範囲を既習として、水素類似原子、多電子原子と講義を進めることができる。水素類似原子の原子軌道とその軌道エネルギーは、厳密解を説明する。その際、極座標表示による変数分離型の動径波動関数と球面調和関数とを紹介する。一方、多電子原子の原子軌道は近似解を用いる。近似解としてはハートリーの方法が直感的に理解しやすいのでこれを説明する。その後、パウリの原理やスピン相關と進む。多電子原子の軌道エネルギーの説明では、軌道角運動量とスピン角運動量及び全軌道角運動量等について述べ、スピン軌道相互作用を説明する。NaのD線が登場するのはこの辺りである。筆者の学部学生時代には、電子スピンの説明は量子化学には含まれなかつたと記憶する。しかし、電子スピンを導入しないと、多電子原子の軌道エネルギーが説明できない。これは時代の変化である。電子スピンが関係した摂動は他にもあるが、スピン軌道相互作用のみを取り上げるのは軽元素でも摂動エネルギーが大きいからである。一方、核スピンは、摂動エネルギーが桁違いに小さいので量子化学では説明しない。多電子原子の説明で原子についての講義は終了する。原子の発光スペクトルの説明は、原子の説明の最初でも述べるが、最後にも簡単な選択則の説明とともに再度述べる。発光スペクトルとの対応は、前期量子論発展の歴史的経過の故に、量子化学における原子の取扱いの全体を貫く基調である。

その後、分子の記述に進む。原子における原子

軌道と同様に、分子でも分子軌道を用いて結合電子の運動を記述する。多くの分子中に存在する共有結合は「原子間での電子対の共有による」という認識の下、結合電子の分子軌道とそのエネルギーをMO法により求める。原子価結合法については、その概要が高等学校の教科書に既に記載されているので、混成軌道を簡単に説明するに留める。原子軌道の概念は既習なので、MO法での分子軌道の説明は、原子軌道と比較しながら進めることができる。MO法では、まず、ボルン・オッペンハイマーの原理により核運動と電子運動との分離を説明する。MO法の詳細は、変分原理の説明から始まる。その後、最も簡単なヒュッケル法によるMO法を紹介する。ヒュッケル法では種々の分子積分が現われる。この積分値の評価には実際の計算例を示すのが早道である。そこで、分子の例を挙げながら、エタンの σ 電子（ σ 軌道）、エチレンの π 電子（ π 軌道）、ブタジエンやベンゼンの共役 π 電子（共役 π 軌道）と進む。フロンティア軌道や非局在化エネルギーについてもこの辺りで説明する。石油化学におけるエチレンの重要性等も同様である。ベンゼンでは 6×6 の行列式の計算を含むので、時間を要するのが悩ましい。これに限らず、「量子化学」では数式の展開や数式を用いた計算が多い。その際、結果を示すだけでは問題点の把握が十分ではない。だからといって全部の展開・計算過程を説明するには時間が足りない。この点の解消する工夫を**④成績評価**の記述で触れる。MO法の応用例としては、固体のバンド構造の説明をする。半導体や金属導体の説明は、高等学校で履修済なので応用例として適切だと考えているが今後工夫の余地はあるだろう。ここ迄が、15回の講義に含める主な内容である。分子の対称性（群論）、電子遷移の選択則やバイブロニックな問題等の詳細も講義に含めようと計画するが、概ね計画倒れに終わる。

③教科書の内容選択 「量子化学」の教科書は「アトキンソンの物理化学」⁴⁾を使用している。この教科書を選んだ理由は、概略以下の通りである
 ①国際的にも国内でも評価が高い
 ②記述範囲が物理化学全般に及ぶので、講義範囲外であっても関連する箇所を参照できる
 ③色刷りの挿絵や表が多

く、初学者の理解を助ける④多くの例題、練習問題及び章末問題等が記載され、初学者の理解を助ける⑤概ね4年毎に改訂が繰り返され、内容の適時化が図られている⑥英文原書なので、一般に翻訳書に散見される誤訳により学生が戸惑う怖がない等である。選定理由の詳細は既に述べた⁵⁾ので本稿ではこれ以上述べない。

上述の内容で講義する際、この教科書で、関係する部分は次の各章である。

基礎的事項 (pp. 1–16)、

第7章 量子理論：入門と原理 (pp. 247–287)

第8章 量子理論：技法と応用 (pp. 288–323)

第9章 原子構造と原子スペクトル (pp. 324–370)

第10章 分子構造 (pp. 371–416)

第11章 分子の対称性 (pp. 417–444)

第12章 分子分光学1：回転スペクトルと振動スペクトル (pp. 445–488)

第13章 分子分光学2：電子遷移 (pp. 489–517)

第14章 分子分光学3：磁気共鳴 (pp. 520–561)

第19章 物質2：固体 (pp. 719–724)

これら全部を二単位の量子化学で取り扱うことは時間的に不可能である。そこで、割愛を考える。

第12章から第14章迄の分子分光学は、量子化学の応用に含まれるので、極一部は簡単に「量子化学」で述べるもの、大方は大学院博士前期課程の「量子化学特論」で触れる。また、第7章と第8章は先に述べたように、「量子力学」の内容である。「量子化学」では、第9章の水素類似原子から講義を開始できる。電子運動を記述するシュレディンガー方程式の解を得るために数学的処理の全てを量子化学から除外することができる。結局、教科書の第9章から第11章迄が「量子化学」の内容である。しかし①で述べたMO法の議論には、第11章全体は少し迂遠である。この章は分子の対称性を、点群を用いて説明するのだが、MO法の議論には、点群の説明の全体は必要ではない。簡単な分子のみを例とするので、群論の助けなしでも殆どが説明できる。②で述べた様に、MO法の応用例として固体のバンド構造を説明するので、第19章を含める。結局、「量子化学」の内容は、「第9章+第10章+第11章の一部+第19章の一部+その他の参考箇所」である。教科書のページ数に

して100ページ程度を15回の講義で説明することになる。

ここで、教科書選定に際して、選定を検討した他の本について述べる。量子化学の教科書として、名著とされる一冊に、「アイリングの量子化学」⁶⁾がある。この教科書は既に絶版であるが、今日でも、依然多くの教科書が参照している。「アイリングの量子化学」は量子化学のみの記述なので、量子化学に関する記述は詳しい。数式の展開も同様である。特に原子構造や共有結合の記述は特記すべきである。著者の一人は反応速度論の大家なので、その記述も含まれるが、これは「量子化学」の範囲外である。「アトキンスの物理化学」で不足する数式の展開を補う目的では、「アイリングの量子化学」は貴重である。しかし、前述の理由で教科書としては用いることができない。「レバインの量子化学」⁷⁾は、現在入手できる教科書として優れた一冊である。特に二原子分子の分子軌道の記述は詳細である。惜しむらくは図表が少なく、学部学生用の教科書としての判りやすさは「アトキンスの物理化学」に譲る。「ローエ・ペターソンの量子化学」⁸⁾も入手可能な本の中では有力である。しかし、量子力学の記述が多く、原子構造の記述は充実しているが分子構造の記述が少ない。「量子化学」では、分子に力点を置きたいので、この点で「アトキンスの物理化学」が優勢である。他にも考慮した本はあるが、委細は省略する。

④成績評価 「量子化学」の成績評価は、シラバス¹⁾にはレポート（宿題）等の平常点が40%、期末試験が60%と記載している。まずレポートについて述べる。レポートは課題を出した次の講義開始時が提出期限である。レポートには2種類ある。第一は教科書中の問題を解くことである。教科書中には答えのみが記された自習問題が多数あるので、その解答を得る過程をレポートするよう求める。解答の正誤は、レポート提出前に自ら検討できるので、講義の内容を理解したか否かの自己評価をすることが狙いである。無論、理解しなかった場合は自ら対策を講じることを期待している。第二は、教科書中の図表を、パソコンソフトを使って作成し、図表を印刷し、解説を加えて提出するものである。「アトキンスの物理化学」は、

この点が優れていて、本文中で導いた式を図表にした例が多い。そこで、この図表化を宿題とすれば、式の変形を講義中に逐一追わなくてもよい。その答えも教科書中に示されているのであるから、学生自ら理解度を評価できる。何より、自ら作図することで、教科書中の重要な数式の意味が把握できることは大きな意義をもつ。筆者の学生時代は、数式の作図は、手回し計算機（後に電卓）を用いた大変時間がかかる手作業だったが、今日では瞬時に終わる作業である。現代はパソコンの時代であることを実感する。その上、講義後に筆者を訪ねる学生の用件の殆どは、この点に関する質問である。のことからも、講義の理解度を上げるというレポートを課す目的が果たされていると自画自賛している。これは講義の復習を兼ねた宿題である。復習時に、数式を図表化し「可視化」することで、学生の数式に対する拒否反応を少しでも緩和したいと考えた。次に、期末試験について述べる。期末試験は講義終了後、概ね翌週に筆記により行う。期末試験の後、再試験を一回実施する（9月初旬）。期末試験と再試験の間には、期末試験で不合格になった学生を掲示により呼び出し、面談することにしている。

3. 急速に進歩する学問・激しく変化する社会に対応しているか

教材研究を公にすべき理由として、先に、「急速に進歩する学問・激しく変化する社会に対応できなくなる」からと述べた。最初に「急速に進歩する学問」への対応である。「急速に進歩する学問」として、最近十年間のノーベル賞の受賞理由を挙げる。この間の日本人化学者の活躍は顕著で、日本人として大変誇らしい。そのうち、化学賞について、量子化学との関連が大きいと推測される受賞理由が二件ある。一件は「導電性高分子の発見と開発（2000年、受賞者は白川英樹、アラン・ヒーガー、アラン・マクダイアミッドの各氏）」と「緑色蛍光タンパク質の発見とその応用（2008年、受賞者は下村脩、マーチン・チャルフィー、ロジャー・チェンの各氏）」である。「量子化学」の講義の最後に、MO法の応用として、固体のバンド構造に触れるのは、「導電性高分子の発見と開発」を

意識している。一方で、「緑色蛍光タンパク質の発見とその応用」については、内容は電子遷移による分子分光学に含まれるので、学部の講義である「量子化学」の内容ではなく、大学院の「量子化学特論」で触れる。

次に「激しく変化する社会」への対応である。「激しく変化する社会」として、「パソコンが急速に普及した社会」を挙げる。パソコンの32ビット機が出現して四半世紀が経過しつつある現在、これはやや旧聞に過ぎる観はある。しかし、教育も含めた人間の営みのあらゆる局面に、パソコンがこれほど迄に浸透したのはそんなに昔ではない。筆者の印象では、これ以外に「激しく変化する社会」は見当たらない。学校教育にパソコンをどう活用するかという命題に解を得ようとする試みは、新聞紙上で時折見かけるが、未だ定着していないと思われる。しかし、計算機としてパソコンが誕生した経緯を思い起こせば、数式を多用する「量子化学」のような科目には、活用の途は広いと期待している。今日では、計算結果を様々な図表に「加工」するためのソフトウェアも充実している。無償のソフトウェアもあると聞く。これを講義に利用しない手はない。具体的には、2.④で述べた様に、学生へのレポートとして、教科書中の数式をグラフ化する宿題を課している。このことは、実は別のもくろみがある。それは、上級クラスに進学すると必修科目として課される卒業研究をまとめる際に役立つということである。筆者の研究室に所属する学生の言葉によれば、卒業研究を履修する場合には必須とのことである。「激しく変化する社会」への対応については今後共、試行を続けるつもりである。

4.まとめ

「量子化学」の目的、内容等について「教材研究」の概略を述べた。本稿を契機として、講義科目のみならず、演習や実験科目の「教材研究」が公開され、担当者間での活発な議論が大学の枠を超えて実施されることを希望する。巷間、大学生の知識水準の低下が指摘されているが、こうした議論が、その防止の一助になることを期待している。多忙な大学人にこれ以上の負担増を強いるの

は極力避けたいので、時間をかけずに実施する工夫も必要である。最後に指摘したいことは、この教材研究が存在意義を持つのは、現行の大学教育が前提である。最近、見聞きする中には、この前提が少し怪しいと思える事柄があるようだ。しかし、それについて述べることは本稿の主題から逸れるので別の機会に譲る。

謝辞

本稿作成に当たり、貴重なご意見を頂いた James B. Metson 教授 (The University of Auckland, NZ) に感謝します。彼の地でも「アトキンスの物理化学」を教科書としている旨を聞き、教科書選定に少し確信がもてました。個々のお名前は挙げないが、意見を頂戴した多くの先生方、更に、本稿執筆を精神的に支援して下さった方々に深く感謝します。

参照文献

- 1) 平成 22 年度授業概要(専門科目シラバス), 119,
徳島大学.
- 2) 長倉：化学と量子論（岩波講座現代化学第 1
卷（長倉、中島編）），岩波書店，1979.
- 3) 文部省検定済教科書「化学 I」及び「化学 II」
高等学校理科用，大日本図書，2003.
- 4) P. Atkins & J. Paula, Atkins' Physical Chemistry, 9th
ed., Oxford University Press, Oxford, 2010.
- 5) 金崎：履修困難学生のための再チャレンジプロ
グラム，大学教育研究ジャーナル，第 7 号，
147–151, 2010.
- 6) H. Eyring, J. Walter and G. E. Kimball, QUANTUM
CHMISTRY, JHON WILEY & SONS, Inc. NY,
1944.
- 7) I. N. Levine, QUANTUM CHMISTRY, 6th ed.,
Pearson Education Inc., NJ, 2009.
- 8) J. P. Lowe & K. A. Peterson, QUANTUM
CHMISTRY, 3rd ed., ELSEVIER ACADEMIC
PRESS, San Diego, 2006.