



物理学における常識の誤りを指摘した東北大学教授
かわぞえ よしゆき
川添 良幸さん

物理学では様々な実験結果を説明するために理論モデルがつくられ、それに基いた計算が行われる。しかし、実験の解釈ができるからといって、それが本当に正しいものであるかどうかはわからない。川添さんは厳密な計算によって、長年信じられてきた解釈とモデル計算が全くの思い違いであったと指摘する。

「1965年、フントは原子スペクトルの解析から『同一電子配置に属す全軌道角運動量および全スピン角運動量Sで指定されるS状態の中心で、スピン多重度Sの最大状態が最低エネルギーを示す』という経験則を発見しました。そして20年に『スピン多重度状態と多重度のより少ない状態間のエネルギー差は、主要項である原子核電子間引力エネルギーおよび運動エネルギーについて両状態に共通しているの、パウリの排他原理による電子間斥力エネルギーの低下、すなわち交換エネルギーの利得に原因する』という振動的考えに基づいてフント則を解釈しました。今日でも、ほとんどすべての教科書や参考書はこの『伝統的解釈』を踏襲しています。ところが、この解釈は全くの間違ったのです」

局所密度近似という範囲で行っていたバンド計算が成り立たなくなっ

物質安定性の根源 電子と原子核力の相互作用

従来のモデル計算は誤り

て、電子と電子が強く相互作用しているとする「強相関系」が登場、現在脚光を浴びているが、どれくらい強いのかを厳

密に計算した例はなく、同様の計算を行えば、原子核と電子の引力が物質の安定状態に最も大きく寄与していることになる

「最も簡単な水素分子を例に説明しましょう。水素分子がどのように形成されるかについては、27年にハイトラーとロン



ドンの分子軌道のモデルを提唱、分子軌道は原子軌道の重ね合わせで表現できるということになっています。しかし、それが本当なのかを厳密に計算してみた人はいませんでした。水素分子がバラバラの水素原子2個より安定になり得るのは、分子になるとバラバラの2つの原子の場合より原子核の周りに電子がもっと近づいて引力のエネルギーを稼いでいるというのが真実の姿だったのです。電子どうしが何か「いたずら」しあって安定化しているわけではなかったのです。

現在、水素分子などよりずっと大きい系に対して、電子の軌道から分子の軌道ができていくというところに誰もが疑いを抱

たずに大規模計算していますが、そのレベルでは全く記述できないレベルで原子核の近くに電子が寄って安定化するというのが、厳密に計算した結果です。電子が原子核に近づく運動エネルギーが上がってしまいます

が、ポテンシャルの方がもっと得をして系全体のエネルギーを下げ、安定化できるのです(クーロン系に対してはヒリアル定理、 $2T+V=0$ が成立)。原子核と電子が近づくとエネルギーが近づくことによるエネルギーの利得、これがフント則を含めすべての物質の

従来の定説の根幹を切って捨てた川添さん、学会での報告や発表論文が引き起こした波紋は大きいという。

「今や、伝統的なモデルから脱却し、系を記述する量子力学方程式と原子核と電子の相互作用であるクーロン力から出発する本来の多体論に基づいて、パソコンの処理能力をフルに活用して系の安定性と物性を詳細に説明すべき段階に達しており、それによってのみ、新物質の理論設計が可能になるのです」と結んだ。47年仙台生まれ。75年東北大理学研究科博士課程修了。同教養部助手、同情報処理教育センター助教を経て、現在、同金属材料研究所教授。実験によらずに新物質を設計することを目標に独自の理論構築と第1原理シミュレーションプログラム開発を行い、これまでにシリコンフラーレン等の予言に成功している。