

## ある数理化学者のつぶやき

## What a Mathematical Chemist is Thinking

細矢治夫<sup>a</sup>

Haruo Hosoya

Chemistry has grown up based on a huge pile of experimental evidence on chemical substances and guided by a number of empirical rules. In this modern age, by the aid of quantum and statistical mechanics and with relativistic theory many of experimental facts can be calculated and predicted to a considerable accuracy. However, a majority of chemists do not realize the essence and importance of basic theories and mathematics in chemistry, but rather they still attach to old fashioned empirical rules without knowing their logical proof or limitation. The present author points out the important role of mathematical chemistry which is not only unveiling these prevailing dogmas but also giving sound mathematical foundation to modern theories. He also warns of the present status of chemical education in Japan where mathematicsphobia and sciencephobia are prevailing.

**Keywords:** mathematical chemistry, quantum mechanics, empirical rule, theoretical calculation, mathematicsphobia

## 1. はじめに質問

この文章を読む分子科学会の会員諸氏は、わが国の物理化学の最先端の研究・教育に携わられている方々であると理解している。そこで以下の質問にお答え頂きたい。

解答のレベルとしては、化学系の学科の卒研生程度でよろしい。つまり、Schrödinger 方程式や簡単な分子軌道法を知っているとして良いのだから、実験系の人でもそれほど難しくはないはずである。

- 1) 水素の 1s 軌道の波動関数の最大値は  $r=0$  なのに、原子半径は何故  $0.5 \text{ \AA}$  付近にあるのか。(動径密度)
- 2) d 軌道は何故 5 種類あるのか。(球面調和関数)
- 3) 第 1, 2 族のように周期表の左側にある元素は何故金属的なのか。それに対して、右側にあるハロゲン等は何故分子的なのか。(オクテット)
- 4) 重い元素の中で何故水銀だけが液体なのか。(相対論的補正)
- 5) 同じ貴金属の密度を比べると、第 6 周期の金は何故第 5 周期の銀の 2 倍もあるのか。(同上)
- 6) 一酸化炭素の双極子モーメントの向きはどうなっているか。その説明は。(Lewis 構造, *ab initio* 法)
- 7) ベンゼンが安定なのに、シクロブタジエンは何故不安定なのか。(Hückel 則の数理的根源と適用範囲)
- 8) ベンゼン環が 1 列に連なっているポリアセンは、何故折れ曲がったり枝分かれが出る毎に安定になるのか。(有機化学の経験則)
- 9) アルカンの沸点は、直鎖のものが最高で、枝分かれする毎に下がるのは何故か。(有機化学の経験則)
- 10) ベンゼン 1 置換体のオルトパラ配向性の数学的根拠は何か。(有機電子論)

## 2. 数理化学とは.

変な質問にまごついた人もいるであろう。でも、括弧の中のヒントで大分答え易くなっていると思う。冒頭にこんな意地悪な質問をしたのは、数理化学的なものの考え方を良く分かってもらいたかったからである。筆者がこの 30 数年間、おかしな人だと多くの人々から思われながら、わが国ではまだマイナーな領域の数理化学的研究をしこしことやって来た訳を少しでも御理解頂けたら幸いである。この趣旨に賛同して数理化学的な研究をやりたいという同好の士の現れることを切望している。

ここに出した質問は、1), 3-5) のように数理化学のトリトリーからやや外れているものがいくつもあるが、議論の本題の外堀を埋めるために入れた。これらの質問を例に挙げて、筆者の関わって来た数理化学の目的を紹介し、合わせて、化学の研究、のみならず化学の教育の現状を巡る問題点についても議論を進めたい。

## 3. 化学の経験主義について

ここでちょっと化学の発展の歴史を辿ってみよう。化学物質についての膨大な実験データが蓄積され、それらからいろいろな経験則や経験式が帰納的に推論され、更にそれらを基に次の実験が行われ、新たな知見が積み重なる、というようにして化学という物質科学の大系が築き上げられて来た。少なくともフランス革命の真ただ中に命を削った Lavoigier の時代から 20 世紀の初頭までの百年間はそうだった。エッフェル塔はその前夜の 1989 年に作られたのだが、当時の化学者はもちろん、第一級の物理学者ですら、電子や原子の実体はおろか、その存在についての確証も知らなかったのである。そういう時代に作られたエッフェル塔でも、1930 年にできたエンパイアステートビルディングも、びくともせずそびえ続けている。化学のみな

<sup>a</sup>お茶の水女子大学 名誉教授  
連絡先 〒333-0854 川口市芝富士 1-8-23

らず、経験主義に基づく技術が科学を超えていたのである。原子を知らない技術者達も、こういう巨大建造物は作れたが、我々が現在日常的に使っている電子機器、医薬品、合成繊維、新素材等の化学製品は、現代化学の支えなしには絶対に作れない。

19世紀末から20世紀の初頭にかけて電子や原子の存在が明らかになることを受けて、1925年前後に Schrödinger の波動力学と Heisenberg の行列力学が誕生した。その量子力学によって、原子の電子配置、化学結合、原子価、物質の基本的な諸物性等の化学の基本的な概念が、第一原理のところから正しく理解されるようになり、更に化学者による精密な物理化学的測定や量子化学計算の積み上げによって、原子分子のミクロの世界の全貌が手にとるように明らかになりつつある、というのが21世紀初頭の化学の現在の姿である。

こうして見ると、錬金術の時代を切っ捨ててしまえば、化学という学問領域が完全に経験主義に導かれて生きていた時間と、量子力学等の論理的かつ数学的なよりどころを知ってから経過して来た時間はそんなに変わらないのである。

しかし、化学者集団のマジョリティを支配している指導原理は依然として百年以前のそれに近い。量子化学という新しい着物を表面的には羽織っているが、その実体を深く知ろうともせず、覚え易く都合の良いところだけをつまみ食いして使っているだけである。

もし、化学あるいは化学者集団が自分達だけの閉じた空間で仕事をしているのなら、化学が jargon (仲間内にはしか分からない符牒) やお呪いの飛び交う世界でも構わない。しかし現代の自然科学は、旧来の学問領域の壁をどんどん取り壊して発展せざるを得ないのだから、化学者だけにしか通じない符牒や論理を今までのように使っていたら、化学や化学者は、その中で蔑まれ孤立するだけである。経験主義や叩き上げの化学の時代はとっくに終わっている。しかし現実はそのようではない。

筆者の長年の数理化学的研究の主眼は、化学の経験則や化学者が指導原理として使いこなしている構造式の便利さや御利益の数学的な裏付けとその適用限界の見直しにある。先ず、質問7, 8)に関係するところから始めよう。

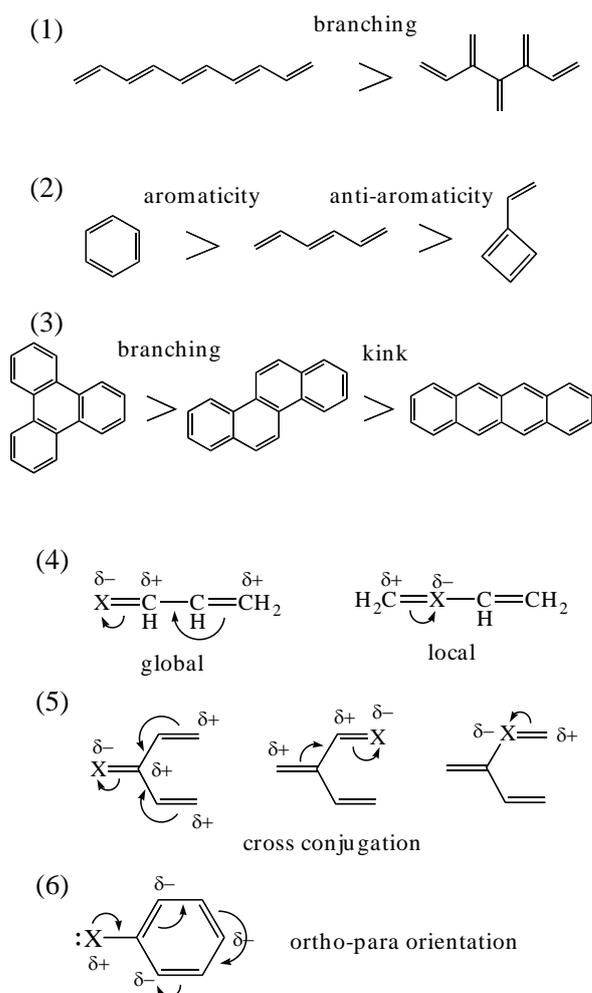
#### 4. 有機電子論の見直し<sup>1-7</sup>

図1には、不飽和共役系の安定性の経験則と有機電子論の基本的な図式を示した<sup>1</sup>。つまり、(1)ポリエンは直鎖が最も安定で、共役系に枝分かれが生じる毎に不安定になり、(2)環状 $(4n+2)\pi$ 電子系は芳香族的だが、 $4n\pi$ 電子系は反芳香族的であり(質問7)、(3)は質問8)そのものである。これらの傾向は、ab initio の分子軌道計算でも Hückel 法でも本質的には変わらないので、後者で考えてよろしい。それなのに、最も簡単な経験則(1)でさえ従来誰も一般則として

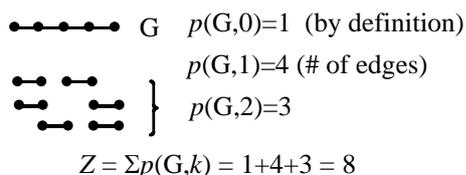
証明をすることはできなかったのである。

理論の詳細をここで紹介することはできないが、筆者の提出したグラフ理論的分子軌道法によって図1の(1)から(6)までの全てを数学的に証明することができる<sup>1-3</sup>。そのエッセンスは topological index Z の枝分かれ依存性にある。この Z は 1970 年の電子状態討論会(分子構造総合討論会の前身の一つ)で発表され、その翌年に BCSJ に印刷された<sup>4</sup>。トポロジカルインデックスという英語は筆者の考えた Japanese English だが、その後世界中の研究者から数百の topological index が提唱され、現在ではこれが一般名となってしまったので<sup>8</sup>、筆者の Z は Hosoya index と呼ばれており、Hosoya は topological index の godfather (名付け親)と言われている<sup>9</sup>。この 1971 年の論文は現在でも年間 40 報近く引用されており、BCSJ の歴代の論文の中で被引用論文数第2位にあるらしい。

なお、折角与えられた機会なのでもう一つ自慢話をさせて頂く。この数理化学の分野では、どういう訳か Hosoya item が沢山ある。Hosoya point, Hosoya triangle, Hosoya cube, Hosoya matrix, Hosoya polynomial, Hosoya operator, Hosoya conjecture 等々である。極め付きは Hosoya mystery だ。ど



**Figure 1.** Empirical rule of stability for unsaturated conjugated systems and organic electron theory.



**Figure 2.** Example of topological index  $Z$ .

れも欧米の研究仲間が、筆者の提案した数学的な概念や量だけでなく、その理論に関係のあるものにこういう名前をつけてくれたもので、皮肉や悪口は一つもない。数理化学の新しい本が出るたびに、Author index でなく、subject index で Hosoya item を探すのが楽しみである。

さて、炭化水素の構造式から H を除き、残りの C を点に置き換えてできるグラフを  $G$  とし、 $G$  から互いに隣り合わない  $k$  本の結合を選ぶ組合せの数を非隣接数  $p(G,k)$  と定義し、その総数を topological index  $Z$  と定義する。(図 2)

この  $Z$  は、Hückel MO を求める際の永年方程式と密接な関係をもっている<sup>5</sup>。MO 計算では、直ぐその永年方程式(行列式)の解  $\{x_n\}$  を数値的に求めてしまうが、そうする前に、その行列式を展開した  $x$  の多項式(特性多項式)を求める。その各項の係数は、炭素原子鎖の枝分かれや環状構造のトポロジーを忠実に反映している。次にその特性多項式を複素平面上に乗せると、解  $x_n$  の点が全て極になるので、後はそのまわりの Cauchy 積分を工夫してやれば、数値計算で出て来る HMO の諸量の大小関係のからくりが手にとるように見える訳である<sup>3,7</sup>。

特性多項式の各項の由来がつかめているのだから、図 1 の(1)–(3)のような異性体間の  $\pi$  電子エネルギーの構造依存性の数学的意味も明らかになる。どの教科書にも、6 員環と 4 員環の HMO の計算結果から両者の安定性の大きな違いが説明されている。でもその数学的な根拠については、これまで誰も指摘していなかった。

ある指数(index)を勝手に定義して、多くの具体例についてその指数と諸物性量との間の構造活性相関(QSAR 又は QSPR)を調べることは容易である。だが、その論理的数学的な根拠まで立ち入った例はほとんどなかった。グラフ理論的分子軌道法によって、その解析が可能になったのである。こうして、従来の化学の how を why に変えて行くのが筆者の数理化学的スタンスである<sup>1</sup>。

この原理に従って、不飽和共役系のグラフとそれから生じる部分グラフの  $Z$  を使い、各 CC 結合の topological bond order を定義することができる<sup>6,7</sup>。これによって、一つの不飽和共役炭化水素のそれぞれの結合の結合次数の大小を、簡単な目の子計算によって半定量的に見積もるだけでなく、その大小の由来を炭素原子の間の結合のネットワークから数学的に説明することもできる。

多数の永年方程式の数値解から導かれた Hückel 則やその他の経験則の秘密が解けただけでなく、index  $Z$  を求

めるのが極めて容易なので、紙と鉛筆だけの、いわゆる back-of-envelope 計算によって、縮合多環芳香族炭化水素も含めて、不飽和共役炭化水素の電子的諸量の相対的な大きさを知ることができる<sup>7</sup>。

これらの定理の証明に使った複素積分のヒントをくれたのが Hückel 法に摂動論と複素積分を噛み合わせた Coulson と Longuet-Higgins の大論文である<sup>10</sup>。また Baba は Fukui 等の提唱したフロンティア軌道理論の数学的な裏付けのためこの理論を援用しているが<sup>11</sup>、これ以外にこの理論の展開がほとんど見られないのは、理論化学者の怠慢である。

次に図 1 の(3)のような経験則も、 $Z$  と Kekulé 構造式の数を使ってかなり一般的に証明することができる。多数のベンゼン環から成る縮合多環芳香族炭化水素の構造と安定性の議論には、グラフ理論による美しい理論の世界が広がっているが、ここでは説明を省略する。

さて問題の有機電子論(4)–(6)である。このような素朴な構造式に曲線矢印を補い、いくつかの形式的な規則を付け加えると、N や O 原子の置換によって生じる分子内の電子移動が、局部的(local)に収まるか分子全体(global)に広がるかを、極めて容易に予測することができるのである。量子力学を知らない Robinson と Ingold がよくぞこんな便利な recipe を考え出したものだとか感心している。彼等の考えた有機電子論で出て来た  $\delta^+$  と  $\delta^-$  の場所と符号は、幸運にもグラフ理論的分子軌道法できれいに裏付けることができる。有機電子論では形式的にどこまでも伝わる電子移動の減衰の度合いも摂動論を使って計算で示すことができる。筆者は数年前に、有機電子論の recipe の(4)–(6)等の数学的妥当性とその適用限界の指摘をする論文を書くことができたが<sup>2</sup>、有機化学者はもちろん、一般の理論化学者の反応が極めて冷ややかなのは何故だろうか。

とりあえず有機化学の教育と研究の場の現状はこうだ。(5)のような枝分かれのある炭化水素の中の一つの C 原子にヘテロ原子を置換した時の影響が、こんなにドラマティックに置換位置で異なるという不思議さの根源を誰も探ろうとはしなかったし、しようもしないのである。学生には、「理屈はいいから、とにかくこの図式の書き方のレシピを覚えろ。要は、合えば良いのだ。」という教育が、百年近くもの間、世界中どここの国でも続いて来ているのだ。化学の外から見て、「私はあの亀の甲が苦手で、化学はどうも分からない。」と言う人の方がノーマルなのではないかと筆者は考えてしまう。

## 5. Lewis 構造式のお呪い

一方、米国において著しいのだが、最近の高校の化学や一般化学の教科書では、Lewis 式が大きく幅を利かせていることを御存知だろうか。元は米国化学者の愛国心から発

したことのようにだが、その影響は、欧米諸国からアジアまで広がりつつある。この教祖様 Lewis と Langmuir も量子力学以前の米国の化学者である。オクテットの安定性を受け入れれば、二原子分子  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$  の結合次数の違いがきれいに示される。しかし、 $O_2$  の常磁性は MO を使わなければ説明できない。ましてや、異種原子間の結合の微妙な違いは、共鳴構造式を多数もってきても定量的にはなかなか説明できない。少なくとも物理化学の世界では、これは常識的なことである。

ところが、一昨年台北で開かれた世界の高校生の競い合う国際化学オリンピックの一回に、「CO 分子の Lewis 式を描け。」という問題が出た。しかも、形式荷電の有無は得点に関係しない、という採点者側の内々の注釈も関係者に伝えられた。筆者は、その時メンターとして参加していたので、試験前夜のメンター会議で、「こんな悪い問題を出したら、化学オリンピックは世界中の理論化学者から馬鹿にされるから、出題を止めよ。」と強く主張したが、多勢に無勢で押し切られてしまった。当然 Lewis 式 (わが国では電子構造式と呼ばれている) に不慣れのわが国の高校生諸君の解答はメタメタであった。しかし結果的には、主催者側も筆者の猛反対に反省したためか、出題ミスを認めるかのような大甘の採点がなされていたのである。

でも、メンター会議の雰囲気には筆者は大変失望した。と同時に大きな危機感を感じた。そういうことがあったので、海外の教科書を点検して、先に述べたようなことに気がついた次第である。

第一線の研究を行っている分子科学者諸氏は、こういう中等教育における歪みに自分は無縁だと思わないで頂きたい。高校生の物理離れは、今や世界的な傾向である。化学に入って来る論理や数理の好きな学生数がどんどん減っているのである。そういう学生を教育している教師達のレベルの低さが、この傾向に更に拍車をかけているのが現実なのだ。

この項の終りにおまけ話を一つ。CO の Lewis 式では形式的に C にマイナス、O にプラスがつく。両原子の常識的な電気陰性度の違いとは逆である。ところが、CO 分子の双極子モーメントの値は小さいが、向きは Lewis 式通りに求まっている。これを *ab initio* 法で再現するためには、大きな *basis set* を使って注意深く計算しなければならない。化学教育に携わる世界中の先生達の中でどれだけの方がこういうことを知っているのだろうか。はなはだ疑わしい。

## 6. Schrödinger 方程式なら安心か

では、化学のどんな問題も Schrödinger 方程式の数値解を *ab initio* 法でしつこく追いかければそれで良いのかというと、そうではない。1)-3) のような簡単な質問に適切に説明ができない状態で、大学の量子化学の講義を担当してい

る人が国の内外に散見される、というのが、残念ながらの実情である。

d 軌道が何故 5 種類あるのかという質問 2) に対して、水素原子の Schrödinger 方程式を解けば Legendre の球面調和関数が答として自動的に出て来るというのでは落第である。われわれの住んでいる 3 次元の世界にこだわらず、1 次元から 4 次元、更にその先の次元の水素原子の Schrödinger 方程式の解を並べて眺めて見れば、その角度部分の解の数は簡単できれいな数理に従っていることが分かる。

筆者は謹厳実直な数学者ではないから、山勘というカンニングをして、帰納的にこの数理を発見することができた<sup>12-16</sup>。つまり、微分方程式をエッチラオッチラ解かずに厳密な解の全体像が見えて来るのである。表 1 を見て欲しい。3 次元の d 軌道が 5 種というのは、2 次元の H 原子の s を 1 種、p と d を 2 種ずつ引きずっているからである。

表 1 を支配している漸化式に気がつけば、4 次元の世界では s,p,d 等の種類が、1,4,9... という平方数になっていること等も分かって面白い。更にパスカルの三角形とも密接な関係にあることも分かる。これは、ある偶然のチャンスが幸いして化学の雑誌に論文が載り、その続報をいくつも書くことができたのだが、*n* 次元の世界についての論文は、現実世界しか認めないというやはり謹厳実直な化学者のレフェリーに拒絶される確率が極めて高いのである。それに引き換え、*American Journal of Physics* という雑誌には、数年に 1 報程度だが、*n* 次元の原子の真面目な論文を次々に見ることができる。なお、故 Lowdin 先生にこの論文をお見せした時には、「congratulations!」と言って頂いた。

水素原子の次は周期表、次は分子、その準備段階に混成軌道がある。このように議論を進めて行くと、3 次元の sp, sp<sup>2</sup>, sp<sup>3</sup>, 更には 4 次元の sp<sup>4</sup> が、また、sp, sp<sup>2</sup>d, sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>, 更には 4 次元の sp<sup>4</sup>d<sup>3</sup> が、*n* 次元世界の中でそれぞれきれいな関係にあることが見えて来る<sup>16,17</sup>。第 1 回分子科学会では、混成軌道関係の新しい発見について報告する。

なお、このように原子軌道を *n* 次元の世界の中で俯瞰することをすれば、水素原子の Schrödinger 方程式の厳密解についての単調な量子化学の講義に将来の見込みのある学生の眼を惹き付けることができるであろう。

量子化学計算の分野では、大きく、かつ精密な *ab initio* 計算で実験を凌駕するような分子の構造や反応についての良い結果がどんどん得られるようになって来ている。しかし、その計算結果について論理的な説明ができなければ、大きなマシンのボタン押しをしたのと同じことになってしまう。それでは技術の一つの進歩に過ぎず、サイエンスの成果ではない。

次に質問 4) と 5) について。これは数理化学の領域を超えてしまうが、相対論的な補正が、高校生でも知っている化学的事実の常識の理論的な解釈に欠かせないというこ

**Table 1.** Degeneracy of atomic orbital in *n*-dimensional world (attention to recursive relation).

		<i>I</i>	<i>s</i>		
		2	1	<i>p</i>	
	3	1	1	<i>d</i>	
	4	1	2		<i>f</i>
5	1	3	2		<i>g</i>
6	1	4	5	2	
	1	5	9	7	2

とを、わが国の無機化学の多くの先生方も知らないという事実をお伝えしたかったのである。もちろん、Einstein も終生自分の理論の御利益を知らなかったのではあるが<sup>18</sup>。

第4, 5, 6周期(米国流では第3, 4, 5周期)の元素の単体の密度というマクロな物性の数値をグラフ用紙にプロットすると、一見「なるほど、周期律はきれいに成り立っている。」という感想が出て来るのが普通である。しかし、定量的に見ると、第5, 6周期の違いは異常に大きいし、銀の反射光のスペクトルより金の方が可視部に寄っていること等、不思議なことが色々出て来る。

つまり、実験事実をただ how の眼で眺めていたのでは上のような疑問は出て来ないのである。常に why の眼で見なければいけない。残念なことに、数理化学だけではこの問題は解決できないが、問題点の指摘はできる。或いは、全く別な方向からのアプローチを探ることが可能かも知れない。

初めに化学の経験主義をくさすようなことをいろいろと書いて来たが、膨大な数の化学物質を扱う化学の宿命と、これまでの知識の集成などを考え合わせれば、化学者はその世界から抜け出すことはできないし、そこで責任を果たす義務がある。35年以上前に筆者がこの数理化学の世界に飛び込んだきっかけも、有機化学を中心に芽生えた多くの経験則の理由付けにあった。すなわち、飽和炭化水素の沸点の構造依存性、具体的には、直鎖のものの沸点が最も高く、枝分かれする毎に一定の下がり方をするというもので、炭素原子の骨格の枝分かれのモードを如何に数量化する所から始まった。詳細は原報を見て頂くことにするが、その時ヒントとなったのが HMO 計算である<sup>14</sup>。ガソリンのオクタン価で、何故枝分かれの大きいイソオクタンが100、直鎖の *n*-ヘプタンが0ということの化学的な解釈も最近論文に書いたが、こんな簡単なこともこれまで誰もきちんと解析していなかったようである<sup>19</sup>。

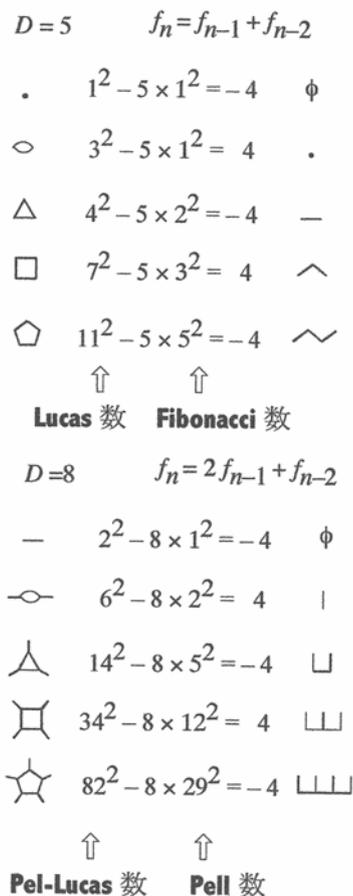
**7. 化学から数学へ**

筆者の数理化学的研究はこの *Z* から始まり、その対象も飽和炭化水素から不飽和共役系へと広がって行ったのだが、今その思わぬ方向への展開についてひどく興奮している。既にこの研究の初期段階から *Z* が Fibonacci 数や

Lucas 数、更には Pascal の三角形などの初等数学と深い関係にあることは気がついていたのだが、最近 Pell 数 (1,2,5,12,29...という漸化式が  $f_n=2f_{n-1}+f_{n-2}$  という数列) や Pell 方程式 ( $x^2-Dy^2=1$  を満たす整数解を求める不定方程式)、更には Pythagoras の三角形 (3辺が整数の直角三角形) や Heron の三角形 (3辺と面積が共に整数の三角形) 等とも密接な関係にあることが次々に分かって来たのである<sup>20-24</sup>。このテーマに関連して昨年1年間で5報も論文を書いてしまった。そのほとんどは、化学と関係のない数学である。

筆者は数学は好きだが、もともと化学で育った人間だから、学会での発表や論文の審査の仕方等で、数学や数学者とのカルチャーの違いに色々戸惑いを感じているが、道場破りの積もりで一生懸命自己主張を続けている。でも、少しずつ数学の壁を破る快感にひたっている。これは決して自己陶酔なんてものではない。客観的な立場からも、*Z* という指数が数理化学の枠を超えたただ者ではないということが分かって来たのである。

残念ながら、決められた紙数がこれで尽きてしまったので概略だけを記すに止める。先ほどの Pell 方程式は、Pythagoras 以来、Fermat, Euler, Lagrange, Gauss, Galoi 等の



**Figure 3.** Example that solution of Pell equation  $x^2-Dy^2=\pm 4$  is in agreement with the topological index for fundamental series of graph.

大数学者が挑んで来た、簡単だが奥の深い不定方程式である。その仲間の  $x^2 - Dy^2 = \pm 4$  の  $D=5$  と 8 の場合の  $x$  と  $y$  の値は図 3 のように有名な数列になる。それが何とその両側に描かれたグラフの  $Z$  に一致するのである。

$Z$  は元の Pell 方程式の解とも密接な関係にあるし、この代数の問題を考える際にそのグラフ理論的な性質を使うと、理論の見通しが格段に良くなる、というメリットがある。更に、この Pell 方程式の解法のアルゴリズムは従来 Lagrange の方法が最もすっきりとして最速であったのだが、筆者はそれを超越するアルゴリズムを発見した。文献調査をしっかりとやった結果、高木貞治や Knuth 達も、我が理論のニアミスの所をさまよっていたことがわかり、にやにやしている。これは、連分数を使った平方根の有理数近似等にも関係があるが、これらの結果はグラフ理論の手法を使って初めて導かれた。実はグラフ理論の本家本元の数学者の世界ではグラフ理論はマイナーな領域なのである。現在数学者達にギャフンと言わせる論文を執筆中なので乞う御期待。

科学や数理学の中で、化学や数理化学をもっともっと太い柱にしたいというのが筆者の夢である。それを実現するための協力者を切に求めている。

#### 引用文献

- (1) Hosoya, H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2003**, 76, 2233-2252.
- (2) Hosoya, H. *THEOCHEM* **1999**, 461-472, 473-482
- (3) Hosoya, H.; Hosoi K.; Gutman, I. *Theor. Chim. Acta.* **1975**, 38, 37-47.
- (4) Hosoya, H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1971**, 44, 2332-2339.
- (5) Hosoya, H. *Theor. Chim. Acta.* **1972**, 25, 215-222.
- (6) Hosoya, H.; Murakami, M. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1975**, 48, 3512-3517.
- (7) Hosoya, H.; Hosoi, K. *J. Chem. Phys.* **1976**, 64, 1065-1073.
- (8) 第 2 版 標準 化学用語辞典; 日本化学会 編; 丸善, 2005, p. 475.
- (9) Balaban, A. T.; Ivanciuc, O. In *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*; Devillers J.; Balaban, A. T., Eds.; Gordon and Breach: Amsterdam, 1999; pp. 21-57.
- (10) Coulson, C. A.; Longuet-Higgins, H. C. *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **1947**, 191, 39-60.
- (11) Baba, H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1957**, 30, 147-154.
- (12) Hosoya, H. *J. Mol. Struct.* **1995**, 352/353, 561-565
- (13) Hosoya, H. *J. Phys. Chem. A* **1997**, 101, 418-421.
- (14) Hosoya, H. *Internat. J. Quant. Chem.* **1997**, 64, 35-42.
- (15) Hosoya, H. *J. Math. Chem.* **1998**, 23, 169-178.
- (16) Hosoya, H.; Kido F.; Tokita S. In *The Mathematics of the Periodic Table*; Rouvray, D. H.; King, R. B., Eds.; Nova Sci.: New York, 2006, pp. 59-74.
- (17) Hosoya, H. *Croat. Chem. Acta* **2007**, 80, in press.
- (18) 細矢治夫, 化学 **2005**, 60 (12), 32-35.
- (19) Hosoya, H. *Croat. Chem. Acta.* **2002**, 75, 433-445.
- (20) Hosoya, H.; Asamoto, N. *Natural Sci. Rept. Ochanomizu Univ.* **2006**, 57(1), 57-83.
- (21) Hosoya, H. *Natural Sci. Rept. Ochanomizu Univ.* **2006**, 57(2), 19-33.
- (22) Hosoya, H. *Natural Sci. Rept. Ochanomizu Univ.* **2006**, 57(2), 35-55.
- (23) Hosoya, H. *Croat. Chem. Acta* **2007**, 80, in press.
- (24) Hosoya, H. *J. Chem. Inf. Modelling* **2007**, 47, in press.

(受理日 2007年5月11日)

---

細矢治夫 (ほそやはるお)

所属：お茶の水女子大学 名誉教授

1964年東京大学大学院化学系研究科博士課程修了，博士（理学）。64-04年理化学研究所研究員，69-04年お茶の水女子大学理学部助教授，84-08年同大学理学部教授，92-04年同学部情報科学科へ移籍 02-03年定年退職。

専門分野：数理化学，情報化学，連絡先：〒333-0854 埼玉県川口市芝富士 1-8-23

電子メール：hosoya@is.ocha.ac.jp，趣味：ナンバーコレクション，パズル（パズル懇話会会長），多面体グッズ等の収集

---