

分子軌道理論の人の集団に内在する性質への投影の試み†

中村 彰*

秋田大学教育学部

社会的集団の行動や性質は興味ある学問領域の対象である。その形態は複雑であるが、特殊な場合によっては、その行動形態が原子の集団である分子の挙動や性質を議論するための分子軌道論的な解釈が可能と考えられる。分子は原子の線形結合によって表される種々の分子軌道と電子の占有方法で示されるが、その挙動は関係する分子軌道の「位相」の重なりにより定性的に議論することが可能である。特殊な社会的集団においても分子の取り扱いに類似した解釈が可能であるように思える。その問題点について考察を行う。

キーワード：分子軌道理論，社会的集団，位相の重なり，熱力学，統計的性質，状態量

序

人の集団を考えると、その集団の理念と目的を考える必要がある。また、同時に、集団を構成する個人をも知る必要がある。前者はある特殊な場合を想定すれば、その人の集団の形象としての振る舞いを説明することの可能性を持っている。後者においては、個人を正確に記述することが非常に困難であると認識されている。

一方、集団の振る舞いについての考察が広く受け入れられている領域がある。原子と原子の集団としての分子の場合である。この場合、厳密に解ける水素原子の模型から類推される他の近似的原子の個々の記述が正しいものとして、それらによって構成されている集団である分子の性質を論じようとするものである。この手法の中で分子軌道法と呼ばれているものがある。この手法は、分子を構成する原子の集団の幾何学的配置に従って、分子の性質が決定されるという視点に立つものである。一般には、分子を構成する原子の線形結合によって、分子の記述を近似しようとする。

人間の社会における集団と個人の関係を思うとき、分子と原子の関係がある特別な環境の下では、その形象を説明する上で類似する方法論的考え方が幾つか存在することが指摘できる。

両者において、集団を構成する要素は、個人と原子である。いうまでもなく、個人を完全に記述することは不可能に近いが、集団としての目標・目的を実現する様な合目的な行動を伴うような場合には、記述する範囲を限定することにより可能性が残される。

個人と原子の特殊な状況下での類似性のいくつかを指摘できるように思われる。原子には、様々なエネルギー状態が存在しており、個々のエネルギー状態に対応する1つあるいは複数の原子軌道関数が存在する。この状況を個人に置き換えると、何か目的を遂行しようとする個人において、個人の目的の遂行のための意志の状態を反映する尺度的な（相対的であってもよい）ものが存在すると考えられる。例えば、ある集団競技に臨む集団では、個々の選手の実力が重要であり、様々な実力の程度を指定できるような段階が存在する。その程度は、その個人がなし得る目的を遂行する能力の可能性としての状態を推し量る一つの尺度として位置づけられる。そして、この状態を表す何らかの数値が存在しうる。例えば、選手の無酸素運動能力や有酸素運動能力などの評価の数値もそうであろう。一方、2人の選手からなる集団の評価がおなじであっても、2人の選手の能力

1996年1月22日受理

† Some Considerations on the Applicability of the Concept of Molecular Orbital Theory to the Characteristics related with Human Group

* Akira NAKAMURA, College of Education, Akita University, Akita

の可能性を表す記述が同じであるとは限らない。従って、同じ状態の評価には、独立な複数の記述方法が存在し得る。

こうした集団のある目的を遂行するための可能性としての指標は、物理現象におけるエネルギーに対応づけることが可能である。以下に、こうした視点から論考する。

1. 原子の集団である分子と社会の集団の形象との類似

1-1. 2分子反応と社会的集団の相互作用

政治的集団（政党）の離合集散は古くからある極当たり前の社会的集団の変化の形態である。歴史的な離合集散の過程は、多数の個人の行動をも含めて詳細に研究されているところであろうが、ここでは、ある集団 A と集団 B が自然発生的に合体して新しい集団 C を形成するような現象を視野に入れつつ整理をする。この様子は、丁度、化学反応において、化合物 X と化合物 Y が協奏的な化学反応によって、新しい化合物 Z を作り得るかどうかという問題に現象論的には通じるところがある。

福井謙一が提唱する分子軌道論の 2 体相互作用の説明に依れば、この現象は化合物 X と化合物 Y の個々の分子軌道において、各々の分子軌道の最高被占軌道と最低空軌道の位相が最大の重なりとなるような形で化学反応が進行しうると説明できる⁹⁾。反応が実際に進行するか否かは、これだけでは判断できなくて、構成する系としてのエネルギー状態の情報が必要である。絶対零度の下では化学反応が進行しないことを考えれば理解できる。

換言すると、化合物の分子軌道の位相の重なりが反応が起こり得るか否かを判定する必要条件であり、反応系が存在している環境についての条件が十分条件ということになる。

この化学反応の理論に従って、2 分子が協奏的に付加体を生じうると判断される例を説明してみよう。ブタジエンとエチレンは 2 つの分子が協奏的に付加反応を行い、シクロヘキセン分子が生成することが知られている（図 1）。

この様子を最も簡単な分子軌道法により、模式的に概観する。最も簡単にとり上げた化合物の化学的挙動を代表させる方法においてである。厳密な分子軌道法の考え方は、これら 2 種類の反応に関与する化合物を構成する原子（炭素原子 6 個と

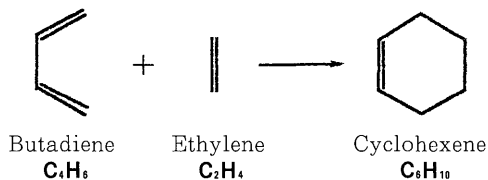


図 1 ブタジエンとエチレンから協奏的にシクロヘキセンが生成する反応

水素原子 10 個) について差し当たって化学反応の記述に必要な合計 40 個 (for C: 1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z; for H: 1s) の原子軌道进行评估する必要があるが、最も簡単な定性的評価には、反応に積極的に関与すると考えられる炭素原子の 6 個の原子軌道 (2p_z) を考えるだけでも充分である。この場合、それぞれの反応物質を、炭素原子の反応に寄与する特有の性質を記述するある関数 (ϕ) の線形結合で近似的に表されるとする。

ブタジエン分子：

$$\Psi_{\text{butadiene}} = c_{b1} \phi_{b1} + c_{b2} \phi_{b2} + c_{b3} \phi_{b3} + c_{b4} \phi_{b4}$$

エチレン分子：

$$\Psi_{\text{ethylene}} = c_{e1} \phi_{e1} + c_{e2} \phi_{e2}$$

ここに、 ϕ_{b1} や ϕ_{e1} などは、これらの分子の構成要素（反応に関与する原子の性質の表現）を個々に区別して記述するものであり、添字の b, e あるいは 1, 2 などは、分子の名称やそれを形成する構成要素に番号を付けて区別する為のものである。実際には、これらは各々の分子の構成要素である炭素原子の性質の中で、特徴的な事柄を代表させて記述したものであり、全て同等な表現で示される。また、 c_{bi} や c_{ei} ($i = 1, 2, \dots$) は各々ブタジエンとエチレンを表す構成要素の線形結合の係数を表す係数である。

分子軌道法の教えるところに従うと、これらの分子は、線形結合の符号と大きさに従って、次のような位相を伴ったエネルギー準位に対応づけられる分子軌道から成り立っていることが示される（図 2）。ブタジエンでは、4 つの炭素原子が化学結合（相互作用）をして分子を形成することにより、4 つのエネルギー準位をもつ状態が構成され、4 つの分子軌道が生じるとされる。化学反応で問題となるのは、全て同等な炭素原子の表現からなる線形結合の係数である。図 2 では、係数の大きさを円の半径の大き

さで、また、係数の符号については、正のものを網掛けで、負のものを白で示してある。エネルギー準位の直ぐあとに示してある数値は、線形結合表現に対応するエネルギー準位の相対的な位置関係を表している。即ち、ブタジエンは4つの炭素原子の線形結合で表されるが、もし、4つの炭素原子が分子という原子の集合を作らないで、個々の炭素原子の持つエネルギーの4つの合計を基準にして、分子という集団を作ることにより、どの程度安定した原子の集合系になりうるかを符号を含めて相対的に示したものである。

例えば、ブタジエンにおける準位1の分子軌道(原子軌道の線形結合)では、全ての炭素原子の線形結合の係数は、大きさの異なる正の係数で表現されている。この状態は、調和的に4つの炭素原子が集散して形成される状態と考えられる。そして、各4つの炭素原子が分子を形成せずにバラバラに存在

した状態よりも、1.618の尺度(適当な尺度を規定することができる)だけエネルギー的に安定な状態である。また、準位4では、集散の程度は準位1と同様であるが、各炭素原子の係数の符号が異なるために非調和的に集散した様子を表しており、4つの炭素原子がバラバラに存在する状態よりも、かえって1.618の尺度だけ不安定化(負の値, -1.618 の安定化)したものであることを示している。

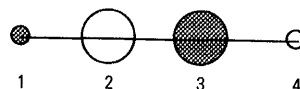
この様子は、エチレン分子についても同様である。こうした分子の軌道の計数の符号と大小の関係は、両端が固定された長さ a の弦の定常波の振動の様子に似ている。両端においては、 n 番目の定常波の振幅 ϕ_n は0である。また、両端を除く任意の座標 x においては、 $\phi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(np(x/a))$ を満足する。

分子軌道法から演繹される結論は、原子の集団としての分子には、幾つかのエネルギー準位とそれに

[ブタジエン分子の分子軌道]

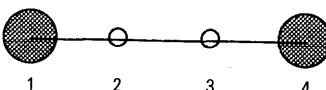
エネルギー準位 4 -1.618 (反結合性分子軌道)

$$\Psi_{\text{butadiene}(4)} = 0.372 \phi_{b1} - 0.602 \phi_{b2} + 0.602 \phi_{b3} - 0.372 \phi_{b4}$$



エネルギー準位 3 -0.618 (反結合性分子軌道)

$$\Psi_{\text{butadiene}(3)} = 0.602 \phi_{b1} - 0.372 \phi_{b2} - 0.372 \phi_{b3} + 0.602 \phi_{b4}$$

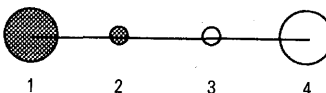


4つの炭素原子がバラバラの時の仮想的エネルギー準位

0.000 (4 x) [基準値] (非結合状態)

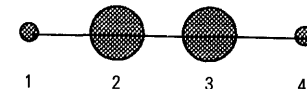
エネルギー準位 2 $+0.618$ (結合性分子軌道)

$$\Psi_{\text{butadiene}(2)} = 0.602 \phi_{b1} + 0.372 \phi_{b2} - 0.372 \phi_{b3} - 0.602 \phi_{b4}$$



エネルギー準位 1 $+1.618$ (結合性分子軌道)

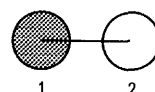
$$\Psi_{\text{butadiene}(1)} = 0.372 \phi_{b1} + 0.602 \phi_{b2} + 0.602 \phi_{b3} + 0.372 \phi_{b4}$$



[エチレンの分子軌道]

エネルギー準位 2 -1.000 (反結合性分子軌道)

$$\Psi_{\text{ethylene}(2)} = 0.707 \phi_{e1} - 0.707 \phi_{e2}$$



エネルギー準位 1 $+1.000$ (結合性分子軌道)

$$\Psi_{\text{ethylene}(1)} = 0.707 \phi_{e1} + 0.707 \phi_{e2}$$

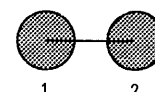


図2 ブタジエンとエチレンの分子軌道

対応する分子軌道が存在するというのである。さて、ブタジエンにおいては、4つのエネルギー準位が生じることが判明した。残る問題は、これらの4つのエネルギー準位にどのような実体が占有し、分子全体としてのエネルギーは如何程と見積もれるかという判断を行う必要がある。このエネルギー準位を占有するものは、化学反応の場合は電子である。それは、化学反応では異なる原子が互いに電子を共有する事により結合を生成すると考えるからである。とり上げた単純化したこの例では、4つの炭素原子が各々1つの電子を有している。従って、ブタジエンでは4つの電子が、4つのエネルギーの配座に占めることになる。

ところで、電子はPauliの排他律に従い、各エネルギー準位にSpinを逆にして最大2個までが1つの準位に占有できる²⁾。この時最も安定な準位の占め方は、準位1に2個、準位2に2個の電子が配置されたときである。この状態を基底状態の配座という。同様に、エチレン分子では、2個の電子がエチレン分子の準位1に占められているときが基底状態である。

ブタジエンの1と4の炭素がエチレンの1と2の炭素と結合したシクロヘキセンが生成する実験事実は、ブタジエンのエネルギー準位2（最高被占軌道）の位相とエチレンのエネルギー準位2（最低空軌道）の位相との重なり、或いは、ブタジエンのエネルギー準位3（最低空軌道）の位相とエチレンのエネルギー準位1（最高被占軌道）の位相の重なりが、最も効果の大きい重なりになることで説明される（図3）。具体的にはこの効果の大きさは、摂動理論による安定化の寄与の程度で示されるものである。定性的に

は、2つの波の重ねあわせの原理に従って、2つの化合物の分子軌道同士の波の重なり合いの程度を調べればよい。図2において、各分子軌道の原子の番号に対応する符号（黒丸か白丸）と係数の大きさ（円の大きさ）とを比べて、同じ符号同士で係数の絶対値の大きいもの同士が強い相互作用をして結合に至る。図では、この条件に合うのは、ブタジエンの1と4がエチレンの1と2の原子の間で相互作用が大きく、結合を形成するのである。

以上は、定性的な議論であるが、実際の化学反応を説明するにはもう少し複雑な議論が必要である。ブタジエンやエチレン分子が、他と孤立して存在している場合には、上に示した基底状態のような1つの定常的エネルギー状態に属している。ところが、この状態に、外部から何らかのエネルギーの注入が行われると、初めの状態に他の状態が混ざってくる。初めの状態が基底状態であれば、外部からの作用により、よりエネルギーの高い状態（励起状態）がもとの基底状態に加わって来るのである。この励起状態の形態は様々である。ブタジエンとエチレンが互いに接近してくると、2つの分子の間に相互作用が生じる。こうした他からの作用により、ブタジエンとエチレンの元のエネルギー状態に対して、図4に示すように、よりエネルギーの不安定な状態が混ざってくる。

2分子が近づいて相互作用を始めて、元の状態によりエネルギーの高い状態が混ざってくる様子を、配置間相互作用が生じると表現し、この状態での各分子は、これらの2次的なエネルギー状態と元の状態との更なる線形結合で表すことができる。最終的には2段階目の線形結合を考えて（配置間相互作用

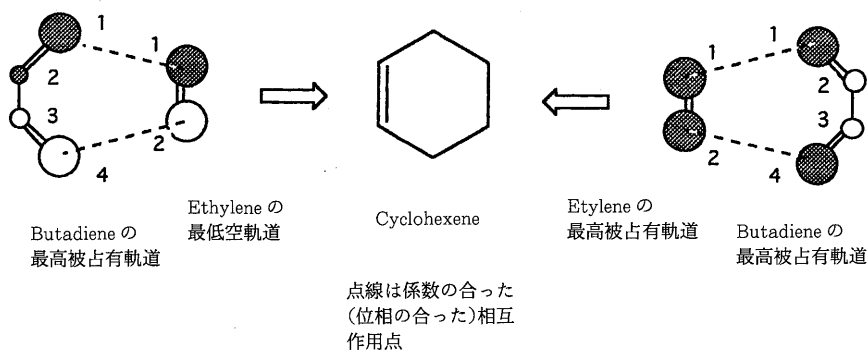


図3 ブタジエンとエチレンの各分子軌道の位相の重なりと結合の形成

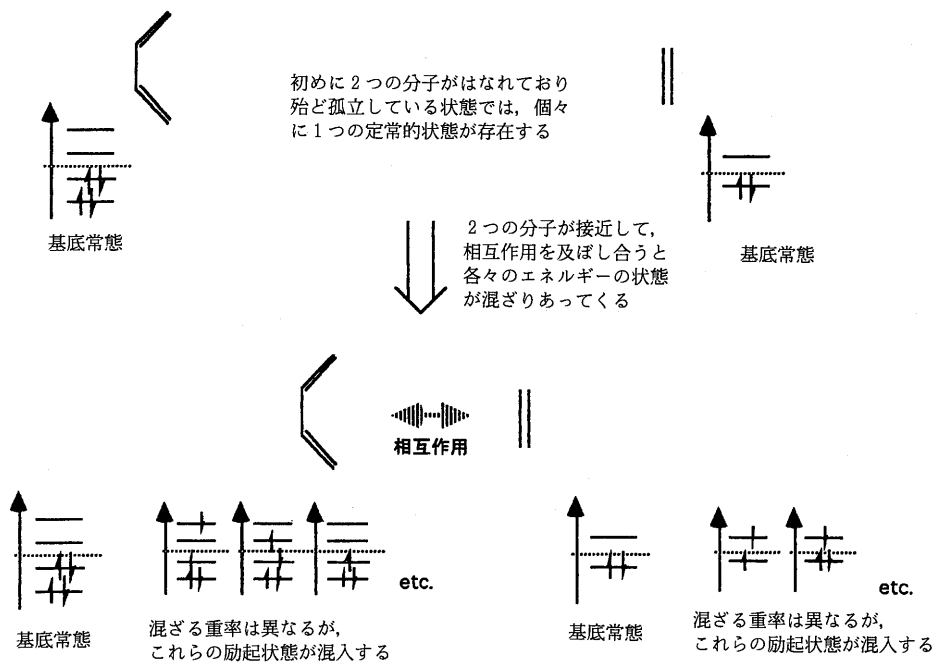


図4 電子の占有の仕方での相互作用の過程における他の分子軌道の混合（配置間相互作用）

を考慮して)最終生成物が予測される。非常に荒い定性的な議論では、こうした電子の配置を考慮した相互作用(配置間相互作用)を考えなくとも、一般に重率の高い基底常態の配置だけで化学反応の結果を類推して十分である。

さて、この様子を人の集合に適応させることを、幾つかの段階に分けて試みる。人の集団を考察するとき、その集団を構成する個人の線形結合で集団を近似的に表現することの可能性は、原子の集団である分子の場合に従って類推できる[段階1]。ここで簡単に指摘しておきたいことは、2つの集団が自然に合体して新しい集団を形成するための作用素に、エネルギー論的な解釈が成り立ちうるのではないかという考えである。多くの自然科学的現象の変化の方向は、平衡論的エネルギー論によって解釈される。即ち、種々の形象の変化の方向は、実現できる確率の高い、もとより安定な方向に変化するというものである。上でとり上げた化学反応が自然に起きるのは、ブタジエンとエチレンという2つの分子が独立して存在しているよりも、合体(付加反応; Diels-Alder 反応)してシクロヘキセンを形成する方が、エネルギー的に安定な常態であるからである。そし

て、その反応の過程では、2つの分子が独立に存在しているときの各1つずつある定常状態(2つの基底状態)に、よりエネルギーの高い状態(励起状態)が混ざって、多くの配置間相互作用が生じてくる。

新しい政党が2つの旧来の政党から生まれるときの様子もこうした化学反応に類似するところが多い。2つの旧来の政党が独立して存在しているときは、各々の政党は1つの定常的な状態が存在し、ある場合には、エネルギー状態が許される範囲の中だけで内的変化が起こっている。ここでいうエネルギーとは、政党がもつ目的を実現させる為の行動の可能性の尺度といったものである。許される(考えられる)政党のエネルギー状態(実現の可能性の尺度)は、決して無限ではなく、個々の政党を構成する党員の資質によって決定される。政党を表現する方法として、近似的に構成党員の資質の線形結合で表されると考えてよい。もし、線形結合の係数を決定する為の合理的な手がかりが得られれば、結果として、政党のエネルギー状態を表す幾つかの状態とそれに対応する線形結合の表現が演繹される[段階2]。これらのエネルギー状態に構成する党員を占有させる方法が判明すれば、政党全体としてのエネルギーの

状態が求められ、定常的な状態についても知ることができる [段階 3]。独立して存在している政党は、こうした定常的な1つの状態として存在するが、2つの政党間に相互作用（エネルギーの授受関係）が生じると、これらの元の状態に、よりエネルギーの高い状態が混ざってくる [段階 4]。個々の政党のこの時点での状態は、元の安定なエネルギー状態とよりエネルギーの高い可能な複数の状態との線形結合を、もう一度採用して近似的に表現できる。ついには、化学反応での配置間相互作用に相当する議論を含めて、線形結合の係数の符号と大きさを評価して新しい政党の間に生じる相互作用の部位や大きさが判明し、最終的な変化の方向が演繹される [段階 5]。

1-2. 2つの政党の合党過程における2体相互作用模型の例

2つの政党の合党の過程を、具体的に状況を想定しながら、分子軌道理論の考え方との類推の過程を辿ってみる。

政党は多数の党員で構成されるのが普通である。呼びかけ人がおり結成の実働部隊で活動する人もいれば資金や理念・目的を立案する人もいる。こうして出来上がった政党は、幾つかの中心的な役割を演じる党員がその政党を牽引する。従って、ある政党を近似的に表現するとき、政党を構成する全ての党員の線形結合で表現する必要はない。政党の状況を表現するのに合理的な要素（人や派閥）だけを考えてもよい。この様子は、分子式が C_6H_6 のブタジエンをその構成要素の全てで表さず、炭素原子の特定の4つの原子軌道の線形結合で表現するのと同じである [段階 1]。また、この政党が掲げている目的や理念を実現するためには、政党を牽引する個人や派閥が、政党という集団を作らないで個々独立に行動する状態よりも、実現の可能性が高いから政党を結成するのである。実現の可能性が高いということは、そうした状態が元の状態より、目的などを実現する可能性の尺度としてのエネルギーが安定な状態であるからである。

結成された政党には、幾つかの実現の可能性の尺度を示す状態が存在する。その尺度の程度を表す個々の状態は、政党を代表して表現する人や派閥の影響力（線形結合の係数の値）の大きさの異なる線形表現の1つが対応する。最も安定な状態は、ある政策

に対して、政党を牽引する人や派閥の意志が完全に合致している（係数の符号が全て同じ）状態（微視的状态）である（ブタジエンの状態1に対応）。次に安定な微視的状态は、掲げる政策に対して対立点が1つ存在する状態である。この状態では、政党の牽引集団が政策という目的を実現する可能性としての尺度が小さく、政策実現のために結成した政党としては少し不安定な状況である。例えば、ブタジエンの状態2に対応する。あるいは、牽引する人や派閥の間で全て意志が異なっている状態も政党には存在しうる（ブタジエンの状態4）。この様に、政党としての目的実現の可能性の尺度を表す微視的状态とそれに対応する線形結合の表現式が存在している。ブタジエンで例示されるような状態では、政党を結成しないで、中心となる人や派閥が独立に行動した方が安定な状態でもある [段階 2]。

こうして生じうる政党の可能性としての状態を表す様々な線形結合表現に対応する微視的状态に、政党を構成する人や派閥の数に相当する「意志」が占有する事になる。可能性としての状態（微視的状态）に意志が占有されて初めて政党全体の目的実現の可能性を示す全体としての尺度が規定される。人や派閥の意志がこうした可能性の状態のどこかに占有される定常的（時間が経過しても全体としての変化がない）な政党としての巨視的状态が1つ存在する [段階 3]。

異なる政党の理念や目的は、政治的時間経過の過程で相互に影響し合う場合も存在する。こうしたとき、2つの政党の間には相互作用が生じる。この相互作用には、人や派閥に付随する意志の交流もあれば、政党内での様々な微視的状态への意志の占有の仕方の変更もあり得る。この様な政党間の相互作用が存在する状態では、独立した政党の全体としての定常的な1つの巨視的状态に、政党内での微視的状态への意志の占有の変更や政党を越えた微視的状态への意志の移動といった、より不安定な巨視的状态が混ざってくる [段階 4]。こうした相互作用状態での政党を表現する方法は、政党を党員の線形結合で表現するのと同様の、巨視的な状態の線形結合として近似的に表現できる。この状態をより正確に評価するには、こうした微視的段階の線形結合の議論を経た巨視的状态の線形結合の重率を考慮する必要があるが、単純な場合には、相互作用以前の政党の定常的な1つの巨視的状态を比較検討すれば、その

変化の方向を演繹することができる [段階 5].

この様に、原子の集団としての分子と、人や派閥の集団としての政党を考えると、その内在する性質には、現象論的に類似性のあることが指摘できる。

1-3. 他の幾つかの類似点—組織構成と微視的状態への占有方法に関して

ところで、政党としての構成様式の在り方も様々である。例えば、政党の組織図の幾何学的な在り方や、人や派閥の社会的空間配置によっても、政党の掲げる目的の実現の可能性の尺度は変わりうる。分子の場合でも同様である。先に示したブタジエンは、その性質を特徴的に構成する4つの炭素原子の線形結合によって、

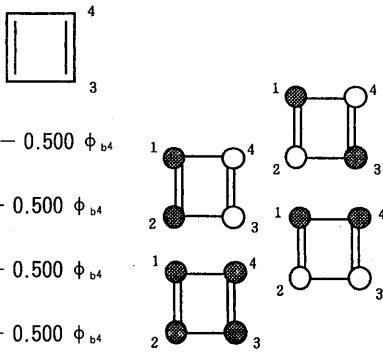
$$\Psi_{\text{butadiene}} = C_{b1} \phi_{b1} + C_{b2} \phi_{b2} + C_{b3} \phi_{b3} + C_{b4} \phi_{b4}$$

と表現できると近似した。同じく4つの炭素原子の線形結合で同様に表される、シクロブタジエンという別の分子が存在する (図5)。シクロという接頭

語は、「環状の」という意味で、先のブタジエンが折れ線状の幾何学的配置を取っているのに対し、1つの輪を構成する配置を取っている。

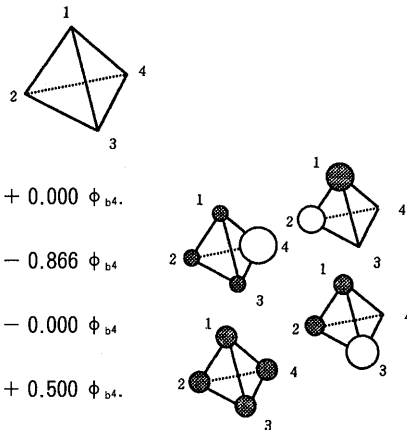
この分子を先と同様の荒い方法で分子軌道計算を行うと、図5のような分子軌道のエネルギーと対応する線形結合の表現式が得られ、明らかに集団を構成する配置の方法によって異なった結果を与えることが示される。この結果からは、状態2と状態3では、そのエネルギーの状態を表す尺度の値が共に0.000と同じであるが、表現される線形結合各原子の係数の値が異なっている。この様な状態のことを、エネルギーの縮重した状態という。

もう一つ架空の分子の例を計算してみよう。それは、同様に4つの炭素原子の原子軌道で表現されるテトラヘドラン (正四面体の配置を取った集団) である。この場合は、状態2から4までは、3重に縮重した状態である (図6)。



状態4 -2.000
 $\Psi_{\text{cyclobutadiene}(4)} = 0.500 \phi_{b1} - 0.500 \phi_{b2} + 0.500 \phi_{b3} - 0.500 \phi_{b4}$
 状態3 0.000
 $\Psi_{\text{cyclobutadiene}(3)} = 0.500 \phi_{b1} + 0.500 \phi_{b2} - 0.500 \phi_{b3} - 0.500 \phi_{b4}$
 状態2 0.000
 $\Psi_{\text{cyclobutadiene}(2)} = 0.500 \phi_{b1} - 0.500 \phi_{b2} - 0.500 \phi_{b3} + 0.500 \phi_{b4}$
 状態1 +2.000
 $\Psi_{\text{cyclobutadiene}(1)} = 0.500 \phi_{b1} + 0.500 \phi_{b2} + 0.500 \phi_{b3} + 0.500 \phi_{b4}$

図5 シクロブタジエンの構造と分子軌道



状態4 -1.000
 $\Psi_{\text{tetrahedron}(4)} = 0.707 \phi_{b1} - 0.707 \phi_{b2} + 0.000 \phi_{b3} + 0.000 \phi_{b4}$
 状態3 -1.000
 $\Psi_{\text{tetrahedron}(3)} = 0.289 \phi_{b1} + 0.289 \phi_{b2} + 0.289 \phi_{b3} - 0.866 \phi_{b4}$
 状態2 -1.000
 $\Psi_{\text{tetrahedron}(2)} = 0.408 \phi_{b1} + 0.408 \phi_{b2} - 0.816 \phi_{b3} - 0.000 \phi_{b4}$
 状態1 +3.000
 $\Psi_{\text{tetrahedron}(1)} = 0.500 \phi_{b1} + 0.500 \phi_{b2} + 0.500 \phi_{b3} + 0.500 \phi_{b4}$

図6 テトラヘドランの構造と分子軌道

構成では、4者が全て同等に交渉の絆を持っているのに対応している。この場合、政党を牽引する4つの構成要素において、要素1の人あるいは派閥と要素2の人あるいは派閥の意志が対立し、この対立には他の残る構成要素の3と4が関与していない状態が状態4である。状態3では、構成要素4が強い指導力を持っているが、他の3つの構成要素とは意志が対立している場合である。状態2では、構成要素の中の3つの要素の間に意志の対立があり、残る要素4はその対立には関与していないと考えられる。状態1では、4つの構成要素が調和的に意志の合意を持っている場合である。

上の線形結合で示した以外の状態、例えば、テトラヘドランにおいて図7の左辺に示すような線形結合の表現があるとするれば、これら4つの微視的状态の適当な線形結合（微視的状态の配置の問題）で表すことができる。ここまでの分子軌道法の教えるところである。

次の問題は、政党のような社会的集団に置き換えるとき、微視的な様々な状態への占有の仕方についてである。分子軌道法では、個々の分子軌道に占有する実体は電子であり、電子の統計的性質から、占有の仕方が決まっている（Fermi-Dirac統計）。社会的集団では個々の微視的状态に占有する実体も様々であるし、その統計的性質も多様である。例えば、政党のような場合、選ばれた党員で構成されるなら、占有する実体は党員が掲げる政策の意思・思想が占有実体として考えられる。その時のこうした意志の統計的性質は、ある状態に重複を許して占有することができると考えられるので、数学的には Bose-Einstein 統計乃至は Boltzman 統計に従うと考えられる。これらの統計的性質は社会的集団の個々の例によって異なることも指摘できる²⁾。

1-4. 多分子間の相互作用と社会的集団への適応の問題点

化学反応は分子が自発的にそれ自身が反応（1分子反応）する場合と、分子同士が衝突して反応（2分子あるいは多分子反応）が起こる場合とがある。前者については、いわば、複数の分子から新しい分子が生成する場合の逆反応と考えられる分解反応と、分子の形状を変化させる反応（転位反応あるいは異性化反応）がある。これらの反応と対応する社会学的集団の行動とを比較検討することも可能である。基本的には、2分子反応の例でとり上げたものと類似するところが多い。後者の多分子反応において少し指摘しておく。化学反応では、10の23乗程度の多数の分子を想定しているが、それでも、3つ以上の分子が同時に衝突する確率は極めて少ない。それでも、3分子が同時に衝突して反応が起こる場合も想定すると、次のようにまとめることができる。基本は、最高被占軌道（HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital）と最低空軌道（LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital）の位相（線形結合の係数）の重なり程度を判断して、起こりうる反応を摂動論的に演繹する手法であることは、これまでの議論と変わりはない。

ところで、3つの分子が同時に衝突する形には2種類が考えられる。即ち、A、B、Cという分子が次のような空間的配置で衝突することが可能である（図8）。この時、摂動論的な考察から、HOMOとLUMOの3つの分子の分子軌道関数の位相の重なり程度を評価して、反応の生じる条件を求めることができる（多体相互作用）。

結論だけを述べると、次のようにまとめられる。ここで、受容体あるいは供与体というのは、分子軌道に占有する実体（化学反応では電子）を受け入れることのできる分子のことを受容体と呼び、占有実体を抛出することのできる分子を供与体と呼んでいる。

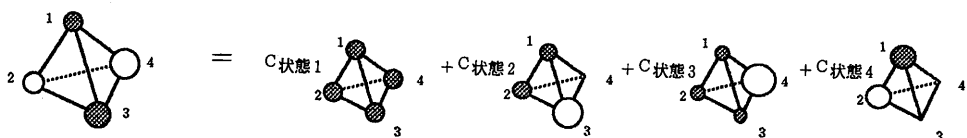


図7 左辺の特別な巨視的状态とそれを表す微視的状态の線形結合



図8 3分子反応の2つの可能性の各分子の幾何学的配置

直線型3分子衝突:

- (1) A B 受容体 C
 (分子BのHOMO)と(分子CのLUMO)の有効的位相の重なり,
 (分子AのHOMO)と(分子BのHOMO)の有効的位相の重なり,
 の2条件が満足している時に反応する.
- (2) A B 供与体 C
 (分子BのLUMO)と(分子CのHOMO)の有効的位相の重なり,
 (分子AのLUMO)と(分子BのLUMO)の有効的位相の重なり,
 の2条件が満足している時に反応する.

3分子同等型衝突:

- (1) 供与体 A 供与体 B
 受容体 C
 (分子AのHOMO)と(分子BのHOMO)の有効的位相の重なり,
 (分子BのHOMO)と(分子CのLUMO)の有効的位相の重なり,
 (分子CのLUMO)と(分子AのHOMO)の有効的位相の重なり,
 の3条件が満足している時に反応する.
- (2) 受容体 A 受容体 B
 供与体 C
 (分子AのLUMO)と(分子BのLUMO)の有効的位相の重なり,
 (分子BのLUMO)と(分子CのHOMO)の有効的位相の重なり,
 (分子CのHOMO)と(分子AのLUMO)の有効的位相の重なり,
 の3条件が満足している時に反応する.

分子の反応の場合、多体相互作用の議論まで合理的に行うことができるが、直ちに社会学的問題に対応させることはできない。それは、相互作用の程度

を見積もる方法が確立していないからである。

2. 社会的集団と熱的現象

2-1. 熱と温度

熱力学は4つの法則から成り立っており、「人類の創出した等身大の最も美しい学問である」といわれる。それは、産業革命で人類が「熱」の高度利用を開始したときに始まるが、学問が完成した時点では、当初の工業的な目的のためにはなんらの貢献もなさなかったことで純粋に学問的である⁹⁾。

物体の熱と物体からの輻射熱は全く異なる独立した概念である。「熱」という概念は、我々人間の感覚で知覚される概念であるが、物理的な意味は感覚概念から独立したとき発生する。熱的平衡条件として知られる第0法則で規定される。仕事の可能性としての概念であるエネルギーと熱が同じ次元であることに気づいたとき、古典力学的な解釈と結びつき発展した。力学的エネルギー保存則を視野に入れた第1法則で、熱と仕事と内部エネルギーの保存関係が示される。熱に対する概念は、S. Carnotにおいても「塗れた布を絞ると水が滴る」という経験的事実に基づく解釈上の誤解があった程に、経験的な感覚だけに頼ることは危険である。事実、熱的現象と力学や電磁気学の現象との決定的な相違を説明するためには、歴史的に多大な時間と多くの人による実験(実証)と哲学を必要とした。即ち、熱現象の独自性といわれている時間軸に対しての非対称性の説明が、従来の力学などでは説明が困難であったのである。完全な熱理論は、エネルギー原理だけでは不十分で、第2法則を付加させて行いうる。第2法則は、機械的現象や電磁氣的現象とは独立な熱現象の性質を規定する。力学的・電気力学的法則が適応される物理的形象では、外部に対して完全に閉じている系のエネルギーが一定であるような場合、現象は決して「終局」に達することはなく、その特性をいつまでも持続する。このような場合、一度存在した状態は、いくらでも近似的に、何度でも再現されることが証明され、時間変化の符号が何の意味も持たない。一方、熱が関与する現象では、過程は漸次的にせよ、遂には定まった「終局」に近づき、形象は概念的な意味において終止した状態、即ち、熱平衡状態に向かって推移する。従って、第2法則は、自然界に起こる変化の方向に対して数量的な判定法を与える可能性についても触れている。

2-2. 状態量とエントロピー

第2法則が定式化されるまでは、温度という概念が経験的な概念で理解されていた。物質の熱状態を感覚を通して不十分ではあるが啓示を与えるので、これを数量的に取り扱うことが始まる。こうした温度測定手法の科学的な理由付けは、熱力学の第0法則によって合理性を付与される。即ち、2つあるいは多くの物質が熱的交渉を続ける際に、機械的あるいは電気的交渉の場合と異なり、最終的に必ず熱的平衡状態に達し、見かけ上全ての変化が停止する。このとき、「物体は互いに熱平衡にある」という⁴⁾。

その後、基準となる温度の尺度が定義されて行く⁵⁾。第2法則は、数学的には、エントロピー関数の存在を主張している。このことから、エントロピーとともに、絶対温度が定義され温度についての必然性が示される第3法則は、絶対0度におけるエントロピーに関する法則で、Nernstの熱定理とも呼ばれる。これは、多数の実験からの帰結として、同一物質の異なる相の間の転移が一定温度で起こるとき、そのエントロピーの変化 ΔS は、絶対温度 $T \rightarrow 0$ の極限で $\Delta S \rightarrow 0$ になることを主張した(Nernst)。Planck は、さらに進んで、熱平衡状態にある物質や場からなる系のエントロピー S の値は、 $T = 0$ において常に0となると仮定するが、もっと正確な議論をするためには、統計力学の解釈が必要である。

熱力学の成立過程で様々な形象の状態を表す量として「状態量」がある。これは、変化の経路に関係せず、変化の初めと終わりの状態だけで定まる性質を持った量である。エネルギーやエントロピーは代表的な状態量である。熱に関しては、ある特殊な条件下では状態量となりうるが、一般的には状態量ではない。エントロピーとエネルギーで定義される温度は状態量である。ある形象が変化するとき、実現される可能性の大なる方向に進行すると解釈されるが、その背景には、定常的な形象において、状態量の等しい複数の状態の実現の重率は等しいという「等重率の原理」が暗黙の了解の下に仮定されている。平衡系でのエントロピーはよく知られた $S = k \ln W$ で示されるから、エネルギーの表現がなされれば温度やその他の状態量についても定めることが可能である。但し、対象とする系の統計的性質についての情報も重要である⁶⁾。

3. 結語—残る問題

社会的集団の性質を議論することを、原子の集団である分子の議論に対比させて共通する類似性を指摘してきた。分子と分子の相互作用の大きさの定性的な尺度として、分子軌道間の位相の重なりが重要である。この考え方を社会的集団の相互作用の程度の見積もりに対しても適応しうる可能性があることを、幾つかの具体例を援用しつつ指摘してきた。問題となるのは、分子の間の相互作用は力学的にその程度が定式化されるのに対して、社会的集団では定量的にどの様に見積もれるかが一般に不定であることである。或いは、集団のエネルギーをどの様に見積もるかが不定であると言い換えてもよい。ただし、合目的な集団においては、実現すべき目標が存在しているはずなので、その目標の達成前と達成後の状態を何らかの形で比較することが可能であると考えられる。エネルギーは、状態量であり、初めと終わりの状態だけで決めることができるからである。何らかの方法で集団の目標の達成前後の状態を見積もれるなら、集団のエネルギー状態を規定することができるはずである。状態量には大きく2種類のあることが知られている。一つは量的概念を指定するもので「量性 (Extensive property)」状態量であり、体積や長さあるいはエネルギーなどが相当する。これは、全体の量が各部分の総和で表されるような性質を持つ。もう一つは強度の概念を伴い、各部分で一定で全体の量には無関係であるもので、圧力や温度といった「示強性 (Intensive property)」状態量である。エネルギーが保存されるような保存力場においては、エネルギー (E) と力 (F) と距離 (r) の関係が、 $F = dE/dr$ といった簡単な関係が成り立つことが知られているが、社会的集団においては明瞭なものはない。しかしながら、Granovetterが述べるような社会的人脈の紐帯の強度の概念の定式化の試みや社会的距離の概念の解釈など、一般に困難とされている数量化的解釈の試みが成果を上げつつある現状を考慮すると、集団のエネルギーを見積り定式化することも全く根拠のないことではない⁷⁾。取り扱いが比較的単純であると考えられる合目的な社会的集団においても、介入する相互作用を見積もる単純な思考模型は、その集団の性質(合目性)によっても変わりうることは想像に難くないところである。

参考文献と脚注

- 1) 福井謙一, 昭和51年, 「化学反応と電子の軌道」, 丸善株式会社
- 2) 粒子の集合に対して, i というエネルギー e_i の状態が g_i 重に宿重しており, 全体に n_i 個の粒子が分布しているとき: (ここに, α は定数, β は $\beta = 1/kT$ である)
- (電子, 中性子, 陽子, スピンが半整数の粒子の場合)
- $$W_{\text{Fermi-Dirac}} = \Pi [g_i! / ((g_i - n_i)! n_i!)]$$
- このとき, 熱平衡状態のエネルギー e_i を占める粒子の数 n_i は,
- $$n_i = g_i / ((\exp(\alpha + \beta e_i) + 1))$$
- (光子, フォノン, スピンが偶数の粒子の場合)
- $$W_{\text{Bose-Einstein}} = \Pi [(g_i + n_i - 1)! / ((g_i - 1)! n_i!)]$$
- 熱平衡状態のエネルギー e_i を占める粒子の数 n_i は,
- $$n_i = g_i / ((\exp(\alpha + \beta e_i) - 1))$$
- (粒子の密度が小さくて, $g_i \gg n_i$ が満足されている場合)
- $$W_{\text{Boltzman}} = \Pi [g_i^{n_i} / n_i!]$$
- 熱平衡状態のエネルギー e_i を占める粒子の数 n_i は,
- $$n_i = g_i \exp[-(\alpha + \beta e_i)]$$
- この場合は, 古典力学に従う粒子に対して当てはまる。
- 3a) M. Plank 著, 寺澤寛一, 小谷正雄 共訳, 昭和15年, 「理論物理学汎論」, 第5巻, 「理論熱学」, 裳華房
- 3b) 小泉正夫 (1957), 「化学平衡」(共立全書124), 共立出版
- 4) この定理が「自明」でないことは, 例えば, 「電気平衡」の場合に適用してみれば理解される。希硫酸と電気平衡にある銅の棒を同じ希硫酸と電気平衡にある亜鉛の棒に接触させると接触点では平衡が成立せず銅から亜鉛へ電気が流れる。
- 5) 温度計 (Thermometer) の歴史的概観を以下に掲げておく。熱的平衡概念が定まるのは後のことである。
- 1592年, Galileo が初期の温度計を作成した。これは気体の体積変化を指標にしていた (1612年に Sanctorius Sanctorius がこのことについて活字で記載している)。

- 1643年, Evangelista Torricelli が Galileo Galilei の子供 Vincenzo Galileo の啓示を受けて, 水銀を用いた最初の気圧計を發明している (Torricelli の真空)。
- 1654年, The Grand Duke of Tuscany である Ferdinand II が液体を封入した温度計を發明している。
- 1709年, Poland (Gdansk) の Gabriel Daniel Fahrenheit がアルコールを用いた実用的温度計を發明した。
- 1724年, Fahrenheit が華氏温度目盛りを提唱。
- 1742年, 1738年の Belnouile 「気体分子運動論」の提唱をうけて, Celsius が摂氏温度目盛りを提唱 (1730年には, Rene de Reaumur が氷点を0, 沸点を80として規格化したアルコール温度計を作成している)。
- 6) この時点で, 温度 (T : 絶対温度) がエントロピーをエネルギーで微分したものの逆数であることが明瞭に定義される。 $T = (\partial S / \partial E)^{-1}$
- 7a) M.S. Granovetter, (1973), "The Strength of Weak Tie", Amer. J. Sociology, 78, pp.1360-1380
- 7b) 平松 闕 編著, (1990), 「社会ネットワーク」, 福村出版

Summary

Any sociological phenomenon of a group consisted of human cluster is an challengeous target of interdisciplinary field to study. The complexity of human society is well recognized. However, for a particular case, the molecular orbital theory which was established to understand the characters or behaviors of a molecule might possibly give an opportunity for the deterministic discussion on characteristics of human groups. In this report, some basic considerations on this subject are presented, providing the importance of overlapping of the individual "phase" of molecular orbitals in determining the molecular properties such as chemical reaction. Referencing the five steps in a process of concerted chemical reaction, the present author carried out a concrete discussion based on the energetical point of view about a possible amalgamation of two political parties.

Keyword : Molecular Orbital Theory, Social Cluster, Phase Overlapping, Thermodynamics, Statistical Property, Quantity of State

(Received January 22, 1996)