

私の分子科学50年

My Fifty Years of Molecular Science

諸熊奎治^a

Keiji Morokuma

1. はじめに

このたび分子科学の研究者が結集して分子科学会を創立されたことは大変喜ばしい。この世紀に入って、持続性のある世界を築いて行くために分子科学の果たさねばならない役割はますます大きなものになる。分子科学会の今後の活躍を期待している。

分子科学会誌の創刊号に書く機会を与えて頂いたのは大変光栄である。周りを見渡すと、この歳でまだ現役を続けられている人は少なく、この幸運にも感謝したい。

私自身のことでいえば、1957年に大学院の1年生で初めて量子力学の勉強をし始めてから今年でちょうど50年になる。分子科学という言葉すらなかった昔のことを知っている人もだんだん少なくなってきた。これから機会があればそんな時代のことも残していきたいと思う、本稿では私の経験した50年間の分子科学の変化を理論化学を中心に紙数の許す範囲で振り返り、今後への希望も述べたい。

2. 大学院、助手時代(1957-1964)

修士課程の途中で有機化学の研究室から福井謙一先生の研究室に移り、本格的に理論の研究をすることになった。先生から最初に言われたことは「理論屋になったら職はないものと思え」で、早速教員免許を取ったことが思い出される。当時は1953年に発表されたフロンティア理論の根拠付けの時、手回し計算機を使って朝から晩までヒュッケル法の永年方程式を解いた。手回しの計算速度を推定してみたら、熟練しても今のパソコンの 10^{-12} 以下だということがわかり、この50年の変化に驚いている。その頃研究室では摂動論を使って分子内2中心と原子との相互エネルギーが2中心の分子軌道の係数の“和の2乗”に比例するという予想外の結果が出て何ヶ月も議論した。その結果、反応性がフロンティア軌道の対称性に依存するという理論を福井先生らがまとめられた時の興奮は今でも鮮やかに思い出される。

1961年に国産計算機が初めて開発され大学に導入された。当時はコンパイラもなく機械語のプログラムを紙テープにタイプして走らせたが、それまで何日も掛かって

いた永年方程式の解が数分で出来るようになり、あふれるように出てきた結果をどう整理していいのか戸惑うこともあった。そのあと、IBMが輸入した国産機の100倍以上の速度のスーパーコンピュータの時間のごく一部が大学関係者に無償で提供されることになり、フォートランで拡張ヒュッケルプログラムを書いた。初めてパイ電子以外の電子も扱えることに感動した。

3. 博士研究員時代(1964-1967)

アメリカに行った1964年はまだ1ドル360円、日本の給料がアメリカの数分の一、外国の研究者と議論したこともほとんど無しという時代だったから、全てがカルチャーショックであった。計算機では世界最速のIBM7090を毎週末24時間は独占して使えるという環境に恵まれた。当時の主研究課題は古典反応動力学研究であったが、それ以外に初めて開発されたab initioプログラムPolyatomを使って世界初の水分子2量体の計算もした。今ではパソコンを使って数秒で完成する最小基底ハートリーフォック法での構造最適化に、スーパーコンピュータを数百時間も使った。予測した2量体の構造が数年後マイクロ波分光により確認されたことは感動深い。私個人の経歴に一番大きな影響を与えたのは1965年1月に開かれたサニーベル国際量子化学会議で、Löwdin, Mulliken, Popleたちの熱い討論に触れてこの国でしばらく頑張りたいと決心し、1年のつもりが13年の長期滞在となった。

4. ロチェスター大学時代(1967-1977)

つたない英語ながらアメリカ人と競争して初めて独立の助教授として採用してもらった感激は忘れられない。最近助教授の採用に際して大きな研究費がついたり(米国)、すぐグラントがもらえたりする(日米とも)ようになったが、当時は大学のくれる研究費も少なく、グラントを取るにも何年もかかった。若い間に大変な試練を与え個人をしっかり評価するテニユアー制度は、日本で主に行われているグループ評価とは違う意味で、多に意義があると思う。

この時代はab initio法がGaussianプログラムなどによりやっと理論屋に使えるようになった時で、分子の平衡構造や簡単な化学反応の遷移状態を決めたり、分子間相互作用

^a京都大学 福井謙一記念研究センター; Department of Chemistry, Emory University

連絡先 〒606-8103 京都市左京区高野西開町 34-3
電子メール morokuma@fukui.kyoto-u.ac.jp

の本質を探ったりした。当時花形の実験は分子線やマイクロ波分光などで、理論計算が実験結果を説明したり予測したりする例は急速に増えていったが、理論計算の評価が確立されるにはまだ時間があった。

5. 分子研時代(1976-1992)

創設間もない分子研に理論研究系と電子計算機センターを発足させるためにお呼びいただき帰国し、センターの設立に関わった。この時期はちょうど日本の計算機が世界の第一線に踊り出した時であり、立派なスーパーコンピュータを導入することができた。国内で大型計算が出来るのは分子研しかなく、センターは日本の理論計算化学の確立、理論研究者の育成に貢献した。もちろんネットワークなどなかったので、分子研は泊まりがけで計算に来る日本中の理論研究者であふれた。

分子研発足当時の日本では理論で分子の構造や振動が計算できるということを実験屋になかなか信じてもらえなくて、学会等でもよく熱い議論をしたことが思い出される。計算が実験の解釈や設計に不可欠になり、実験屋の多くも計算も手がけるようになった現在を見ると今昔の感が深い。

この頃の研究の花形の一つはレーザー分光で、比較的小さな分子の構造、動力学、反応など新しい知見がどんどん得られるようになった。この頃の我々の理論研究も小さな分子の反応のポテンシャル面や動力学が中心であった。また、遷移金属錯体の構造や反応性の研究も始め、触媒サイクルの計算などに精力を注いだ。この分野でも実験屋の理解を得るのは容易でなかったが、幸いにも日本の有機金属の分野の先生方の協力と励ましを受けて世界にさきがけた研究が出来たと思う。

6. エモリー大学時代(1993-2006)

私の経歴の中で一番長く勤めた分子研での停年(60才)を3-4年前にしているのと考えた末、エモリー大学に移った。アメリカに移った主な理由は、日本では停年後研究を続けることは、ごく幸運な少数の方々を除いて、ほぼ不可能に近いという事実の認識であった。渡米後14年経っても状況はほとんど変わっていない。海の向こうから見ると、停年直前まで世界的活躍をしていた研究者の研究を突然ゼロにしてしまう日本のやり方は巨大な損失をしているように見える。アメリカでは、年齢を理由に停年等不利な扱いをすることは法律で禁止されている。年齢と関係なく、出来るかどうか、やる気があるかが問われる。日本でも停年後の研究者の“軟着陸”あるいは“再利用”を真剣に考える時ではないか？

エモリー大学では、エマーソンセンターという小さな学内センターを運営しながら、当時花形であったワークステーションを導入して研究を進めた。1995年ごろパソコン

が速くなったので理論計算に使えないかと、20台位を棚に並べて初めてのクラスターを作った。結果は大成功で、その後250CPUを持つラックマウント型のクラスターを研究室やエマーソンセンターに導入した。

アメリカで日本と一番違ったことは研究時間の多さだった。日本の教授は会議が多くしかもそれぞれが長時間に及ぶので多忙を極める。アメリカの会議は数も少なく1時間以上続くことはあまり無い。分子研時代の研究2割が、こんどは研究8割になった感じで院生やポストドクとの楽しい議論の時は沢山あった。

小さな分子の光化学反応やイオン-分子反応に関して、励起電子状態のポテンシャル面と動力学研究がエモリーでの主テーマの一つとなった。この研究のほぼ全てが実験屋との共同研究で、メールを通して頻りに送られて来る実験結果を眺めながら研究方針を立てたり、また計算の結果を送って別の実験を示唆したりして研究を進めた。遷移金属錯体の反応も主テーマで、重合、窒素活性化、酸化など各種反応の触媒機構や設計の仕事をした。この分野でもようやく理論計算を信用するようになった実験屋との共同研究が主になった。またフラーレンやカーボンナノチューブ生成機構の理論シミュレーションにも力を注いだ。

均一系触媒の設計に理論計算を使うという技術は企業にも大いに取り入れられるようになり、このテーマでアメリカで試みられた産学協同研究にも参加した。残念なことに企業側の研究総括を弁護士がするということになりマイルストーンの達成を至上目的としたため、研究の発展性が損なわれたのは苦い経験である。

アメリカでも基礎研究のグラントが少なくなり、いろいろなタイトルのついたグラントが多くなってきている。往々にしてこのようなグラントは継続性が無くしかもゴールに縛られ自由な発想が妨げられることが多い。

7. 新たなスタート(2006-)

2006年9月から福井センターで研究活性化のお手伝いをさせて頂くことになった。さらにおかげさまで、CRESTのマルチレベル、マルチフィジックスシミュレーションのプロジェクトからも研究費が頂け、研究体制も整いつつある。主な研究テーマは複雑系の複合理論によるシミュレーションである。

8. 将来への希望

今後持続性のある世界を築いて行くために、化学、特に合成化学と分子科学の果たさねばならない役割はますます大きなものになると思われる。分子科学は多彩な物理化学的測定法と理論的方法を擁しており、このような役割を十分に背負える実力と可能性を持っている。

分子科学が化学の主要な問題の解決に寄与するためには触媒、新材料、生体物質等複雑な分子系の解明が必要で

ある。そのためには、理論としてはフェムト秒からミリ秒まで、オングストロームからマイクロンまでを対象に、電子状態理論、量子および古典動力学理論、統計力学理論、コースグレイン法、有限要素法など問題解決に必要な方法をいろいろ組み合わせて使う必要がある。従来のように一つの方法論だけで解決できる問題は少なくなるので、若い研究者はいろいろな方法を身につけてほしい。さらに、これらの理論的手法に基づいて、勇敢に新しい予測と実験屋へ提言を行ってほしい。おたがいに相補的な知見を得ることが出来る理論屋と実験屋の共同研究が問題解決に今後不可欠である。実験についても、複雑系の問題解決にはいろいろな実験手法を同時に使って得られた結果を総合して

判断することが求められる。実験の場合は1人でいろいろな手法を使うことは難しいかもしれないので、実験屋同士の共同研究も大いに重要である。

一方、分子科学は物事の本質を研究する学問でもある。そのためには基礎の研究を更に発展させて行くことも必要である。新しい方法論の開発も極めて重要だし、また比較的簡単な分子にもまだ新しいことがいっぱい詰まっている。最近応用の重要性を強調するあまり、基礎がないがしろにされる傾向が見える。改めて基礎を大事にしよう。分子科学の一層の発展のために、乾杯！

(受理日 2007年4月12日)



諸熊奎治（もろくまけいじ）

所属：京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー

1963年京都大学大学院博士課程修了，博士（工学）。62-66年京都大学工学部助手。64-66年コロンビア大学客員研究助教授，66-67年ハーバード大学博士研究員，67-69年ロチェスター大学助教授，69-71年準教授，71-77年教授，76-92年分子科学研究所教授，93-06年エモリー大学ウィリアム H エマーソン教授，06年9月より名誉教授，06年9月より現職。

専門分野：理論化学，計算化学，連絡先：〒606-8103 京都市左京区高野西開町 34-4

電子メール：morokuma@fukui.kyoto-u.ac.jp，URL：http://euch4m.chem.emory.edu，趣味：テニス