

# 私なりの分子科学研究の楽しさと 分子科学研究所への期待

榊 茂好 京都大学触媒・電池元素戦略ユニット 特任教授



巻頭言を書く機会を頂き大変光栄であるが、多少緊張しながら書き始めている。分子科学研究所は1975年に設立されたから、設立以来もうじき半世紀である。人間なら油の乗り切った壮年期と言える。私事で恐縮であるが、当時、助手になりたての私は研究生活を始めてから「分子科学」と言う言葉に接して新鮮な印象を感じたものである。不勉強で「分子科学」と言う言葉を知らなかった私は分子を化学や物理という分野で見るのではなく自然科学全体の中で捉えることの意義、自然科学の視点から研究することの重要性に今更ながら気がつき、以来、「分子科学」と言う言葉が常に頭のどこかにあったような気がする。

私は電子状態理論に基づく理論化学・計算化学分野の研究をして来たので、視点が限定的になりがちなことをお許し頂き、当時を振り返ってみたい。分子研が設立された頃から80年代の理論化学では理論開発と共に計算化学研究が始まっていたが、研究対象は数原子から数十原子程度の孤立分子が中心であった。モデル系の計算が多かったが、分子の微視的理解が得られ、また、想像するしか無かった遷移状態構造が理論計算から求められ (potential 面の鞍部でしかないが)、モデル系で

あったにしても分子と化学反応の理解に貢献できたと考えている。最近の化学ではフラレン、カーボンナノチューブなどのナノスケール分子と共に、光合成系、超分子、多孔性配位高分子錯体、金属微粒子や半導体などの複合系・大規模系が新しい研究対象として登場している。応用的な側面の強い研究対象も多いが、いずれも新しい分子科学的理解が必要とされる化学事象が数多く含まれている。例えば、燃料電池は実用化と普及を目指して研究が活発に行われているが、重要な過程の一つ、「電位存在下、電極と溶液の界面で起きるプロトン移動とカップルした電子移動」は分子科学的理解も理論的解明もなされていない。これらは分子科学と物性物理、固体電子論などの境界領域の研究対象でもあり、分子科学は周辺分野との一層の融合・共同研究が必要とされていると言える。個人的には固体電子論が研究対象としてきた物質の研究に分子科学的な立場からのアプローチが必要ではないか、と感じている。いずれにせよ、新しい魅力的に見える研究対象が次々に誕生し、また、応用を目指して様々な物質群が研究の対象となっているが、それらの分子科学研究には尽きせぬ楽しさがある。分子科学研究所にも本質に直

結する化学事象の基礎的・基盤的な理解と普遍的な法則性を見出す研究を今後も一層進められることを期待している。

最後に、分子科学研究所のもう一つの忘れてはならない使命に触れたい。分子研が誕生したところから十数年間、共同研究が盛んで、分子構造総合討論会 (現在の分子科学討論会の前身) での研究発表の相当件数が分子研との共同研究であった。私自身も助手、助教授時代、分子研が無かったら研究が困難であった。昨今は基礎化学分野でポストが減少し、研究環境も劣化しているが、その中で活動している研究者を共同研究機関として支えるようなことも分子研に期待したい。分子研がわが国はもとより世界の分子科学研究者にとり無くてはならない存在であり続け、その重要性が一層大きくなることを期待している。

---

さかき・しげよし  
京都大学工学研究科燃料化学専攻出身 (1974年工博)。1975年から熊本大学工学部工業化学科助手、助教授、教授を経て、2002年から京都大学工学研究科分子工学専攻教授、2010年に定年退職し、同福井謙一記念研究センターリサーチフェローなどを経て、2020年から同触媒・電池元素戦略ユニットにお世話になっています。遷移金属元素を含む複合電子系の構造、電子状態、反応過程に興味を持ち、その理論化学研究を行って来ました。

---