

触媒懇談会ニュース

触媒学会シニア懇談会

久しぶりの触媒討論会とイノベーション支援の Catalysis

(一社) アイリック代表理事

東北大学名誉教授

宮本 明

1. はじめに：久しぶりに参加した触媒討論会

2025年9月17日、18日、19日の3日間にわたり、東北大学青葉山新キャンパスで開催された第136回触媒討論会に久しぶりに参加した。55年前の触媒討論会に東北大学修士1年生として初参加、討論会でのB講演で発表し、触媒討論会の楽しさを味わってからは、東北大学大学院生、名古屋大学助手、京都大学助教授、東北大学教授時代はもとより、外部資金による教授・プロジェクトリーダーも定年となった8年前まではよく参加していたが、その後、シニアリサーチフェロー・学術研究員時代以降は全く参加していなかった。プログラムを眺めると、討論中心のB講演は無くなっていたが、「光触媒」、「工業触媒」、「水素の製造と利用のための触媒技術とプロセス」、「環境触媒」、「先端放射光」、「ファインケミカルズ合成触媒」、「ファインケミカルズ合成触媒」、「界面分子変換の機構と制御」、「固体酸塩基触媒」、「コンピュータ利用」、「二酸化炭素変換」、「規則性多孔体の合成と機能」、「選択酸化」、「ナノ構造触媒」、「有機資源循環」、「燃料電池触媒」、「天然ガス転換」、「有機金属・分子触媒」、「生体関連触

媒」など多くのセッションに加え、特別企画研究会横断若手シンポジウムに特別講演、受賞講演があり、しかも自分が現役時代に若手として活躍していた方々がリーダーとなるなど興味を掻き立てられた。

その中で、赤間 弘さんのご講演を拝聴する機会もあり、ご講演後の挨拶の中で、日産自動車を経て、静岡大学福原研究室で准教授としてご活躍されていることを知るとともに、シニア懇談会の世話人代表も室井高城さんから引き継いでいらっしゃることも伺いした。さらに、懇談会ニュースの原稿依頼もされたので、大変お世話になった出口さん、室井さんにお声掛け頂いた前々回[1]、前回[2]と同様に、お引受けすることにした。

2. 活発な討論の伝統が続く触媒討論会

会場に着くと東北大学富重研の中川義直先生が運営のために尽力され、富重研を中心に東北大学の多くの研究室の学生の方々が受付等、お世話下さっていた。自分も巧く名札などを受取った。事前にメールを頂いていた飯塚泰雄先生から少しご到着が遅れるとのご連絡があり、その間、一階のフロアで待っていると、久しぶりにお目にかかる

方々でご挨拶をした。大阪大学の奥村光隆先生とはロンドンでの国際会議以来の再会で、様々な話題について語り合った。その後、飯塚泰雄先生にも無事お目にかかることが出来、「2050年カーボンニュートラル実現に向けてのバイオマス貢献」に関する資料も頂き、議論させて頂いた。さらに記念写真を撮ったりしたら、秋鹿研一先生、尾中 篤先生、上田 渉先生、福岡 淳先生にご挨拶、展示をされていたダイキンの釜谷功さん、堀場製作所の花木保成さんとも語り合い記念写真を撮るなど討論会会場に着く前はかなり楽しい時間をもった。

どの会場も結構賑わっていた。プログラムを見て、いくつか教室を回った。質問も多く出て、それに対する答えもスムーズで、活発な発表・討論が続き、修士一年生の時に感じた触媒討論会の伝統が現在も続いていることを実感、嬉しい気持ちになった。

3. 新分野・新課題・新手法を活用する様々な魅力的な発表

触媒討論会のセッションは自分が参加していた頃と余り変わっていなかったのですが、久しぶりの参加により、各分野での研究手法、具体的なターゲットの変化、進化についての理解には便利であった。会場となっている東北大学青葉山新キャンパスには、「ナノテラス」が稼働し注目されているが、それも含む放射光の利用は、「先端放射光」セッションだけでなく多くのセッションでの発表でも見られ、固体触媒系の構造解析が、オペランド計測も含め着実に進んでいることを実感した。同様に、コンピュータ化学の利用も「コンピュータの利用」セッションだけでなく、多くのセッションでの発表で見ら

れ、今では必要があれば誰でも使用する日常的な手法にまで進化していることも実感した。それを受けて、本家の「コンピュータ利用セッション」では最新の機械学習、ニューラルネットポテンシャルを用いる研究、最先端スーパーコンピュータを利用する大規模計算なども発表され、しっかりと発展し、期待を強くした。

発表件数では、「光触媒」セッションが3日間の全てで講演があり、高い関心が寄せられていることを実感した。メカニズムの面では、様々な励起プロセスが関係するだけに興味深く思うとともに、自分自身、コンピュータ化学の様々な分野への応用の中で、プラズマディスプレイ、半導体プロセスでの様々な励起状態の関与、電子、ホール移動などを扱った時のことも思い出し、興味が広がった。その中で、受賞講演、吉田寿雄「光触媒を用いた物質変換反応の開拓」では、1時間の講演時間があつたこともあり、光触媒での新反応を開拓するという研究の狙いがよく分かり、流石、多くのノーベル賞を輩出した京都大学工学部石油化学科の卒業生の発表との印象を感じたが、10月になって、同じ石油化学科卒業の北川 進先生のノーベル化学賞受賞発表を受けて、改めてその思いを強くした。

4. 盛大な懇親会・交流会と自分自身の新しい活動の紹介

「若手交流会2025ー学生・若手・企業研究者の垣根を超えた交流会ー」、「企業研究者と学生の交流会」が自分の学生時代に触媒討論会の中ではなかったかと思うので、発展を感じた。全体の懇親会、研究会ごとの交流会には長年参加し、楽しみにしていた

ので、今回も全体の懇親会とコンピュータ利用研究会の交流会に参加した。

コンピュータ利用研究会の懇親会は、初日の夜に市内で開催された。世話人代表のパナソニックの小野寺真里さんを中心に、事務局の久保百司先生、特別講演の名古屋大・旭 良司先生、依頼講演の奈良先端大・高山大鑑先生、講演者、司会の方々も多く参加して賑やかな懇親会となった。久しぶりの参加であったので、コンピュータ利用研究会3代目の代表として紹介を受けるとともに、最先端で活躍するメンバーの皆さんと楽しく交流した。

翌日には、全体の懇親会が、川内キャンパス・川内の杜ダイニングで開催された。会場に入ると既に多くの方が参加されていたが、久しぶりに薩摩 篤先生と会って、挨拶をした。名古屋大学村上研時代には学生であったのに、もう少しで定年になると伺った。様々なご活躍を考えると当然ではあるが、時の流れの速さも実感させられた。富重圭一先生、野村琴広会長などの挨拶のあと、村松淳司先生の乾杯の音頭で、盛大な懇親会が開始された。アンモニア利用技術に注目が集まる中、現在も大活躍されている秋鹿研一先生、機械学習ポテンシャルを活用する触媒研究で特別講演をされた旭 良司先生とは懇親会の折に近くにいらっしゃったこともあり、詳しく議論させて頂き、町田正人先生、片田直伸先生、佐藤智司先生、野村琴広先生とも短時間ではあったが、交流させて頂き、貴重な機会となった。

懇親会や久しぶりの挨拶の中では、お相手のご近況、ご活躍をお伺いするだけでなく、自分の方も自己紹介もすることになる。シニア懇談会ニュースをご覧になられる方

もこれまで大変お世話になった方が多くいらっしゃるのでは、この機会に近況をお伝え出来ればと思う。最近では、定年後も様々な形で働かれる方が増えているが、私も現役時代に多くの産学連携研究、プロジェクトを進めていたこともあり、外部資金による教授・プロジェクトリーダーを東北大学の産学連携研究の拠点である未来科学技術共同研究センターで続けていたが、70歳になった時点で、教授・プロジェクトリーダーは定年、学術研究員として働くことになった。それを機に、研究室でのリーダーシップも若い教員に任せ、自分は支援的な立場になることとした。3年前からは、東北大学から退職し、東北大学と東北大学工学系財団の支援で、新たな法人を設立することになった。若手イノベーション支援が目的とする一般社団法人、アイリックの代表理事を務めていること、英語では、Aoba Institute for Research Innovation Catalysis(AIRIC)で、化学分野ではなく、イノベーション分野ではあるが今も Catalysis に取組んでいることも強調させて頂いた。化学分野の触媒と同様に、イノベーションは若手自身が進めることであるが、新しい手法の導入、新しい分野への応用、新しい解析方法を加えることにより、これまでにない新しい研究の発展が起こるので、それを自然に楽しみながら進めるようにしたいという願いを込めて、Catalysisを採用した。触媒作用についてもっと深く理解したいという希望もあった。

5. 最新のコンピュータ科学の進展と久しぶりの Keynote 講演「コンピュータ化学草創期の挑戦」

自分自身が最新の学問の発展に貢献する

ことが期待される教授・プロジェクトリーダーから支援的な役割になると、相手の関心、興味により考える対象、分野も広がるので、歴史的な視点も不可欠となる。その中で、東北大学青葉山キャンパスでの触媒討論会を終えたあと、自分自身が取り組んだコンピュータ化学の草創期の発展について考える機会を得た。若い世代の研究者等と議論するときには、それらの方のご研究内容、方針等について伺い、自分の意見を述べるのが普通かも知れないが、自分が若い時の挑戦についても紹介してそれについての若手などの意見を伺うことももう一つの方法である。ところが、当時の細かいことは忘れてしまっていることも多かったが、触媒討論会の後に、それらを思い出し、整理し講演する機会を与えて頂いた。Material Studio 25周年記念シンポジウムである。現在は、生成AIをはじめコンピュータ技術は非常に発展し、シンポジウムを企画したBIOVIA社でも実デバイスのリアルタイムデジタルレプリカを特徴とするデジタルツインが目標となっているが、それだけに「コンピュータ化学草創期の挑戦」を説明し、今後の歴史的な発展についても考えて頂くことを期待した。

整理のために、関連分野の歴史を振り返ってみたい。触媒学会会員にとって重要なアンモニア合成は、1906年で、応用として重要なガソリン自動車(1886年)よりは後であるが、Heisenbergによる量子力学(1925年)、世界初のコンピュータENIAC(1946年)、福井謙一先生のフロンティア軌道理論(1952年)、1980年代に始まり1990年代に広く普及したコンピュータグラフィックス(CG)、

SPRING8(1997年)の遥かに前である。それだけに、実験的な試行錯誤を中心にしつつ、様々な実験的、理論的な解析手法の導入により進化、発展してきた触媒分野の歴史も理解できる。

図1は、講演終了後に壇上で主催者から花束を受取り、記念撮影した時の写真であるが、広い会場で多くのエキスパートの皆様は講演を聞いて頂いた。若い現役世代の方は、35-40年も前の草創期のことを聞くのは初めての方も多くいらっしやったようで、歴史の流れを感じて頂けたようであった。



図1 講演終了後の主催者との記念写真

コンピュータ化学スタート時の挑戦

1987-1992(京都大学石油化学科)
MOGLI(Evans&Sutherland)/PS390
Chem-X/DEC MicroVAX II(概算要求で設置)
非常に魅力的なCG像のもつインパクト

1992-2007頃(東北大学)
Insight II(Biosym) Silicon Graphics IRIS-4D/25TG,
CERIU2(MSI)
DMOL
Materials Studio(Accelrys(BIOVIA))
多彩なソフトウェア、方法論の開発
東北大学の実学尊重の学風も多彩な産学連携研究、
強力な研究体制の構築を支援

図2 京都大学時代、東北大学時代の挑戦

図2は、講演内容の全体像で、前半は京都大

学時代、後半は東北大学時代の初期で、それぞれの特徴を説明した。先述のように、量子化学などの計算は化学反応についても既に行われ、福井謙一先生の前線軌道理論は1952年に始まり1981年の時点で既にノーベル化学賞を受賞されていたが、コンピュータグラフィックス(CG)は1980年頃に始まり、さらに後述する3次元CGの利用は1980年代後半になっていた。そのため京都大学からの概算要求の形で設置となる程、目新しく高価なものであったことも強調させて頂いた。それだけに、図3に示したゼオライトの細孔構造と分子ふるい効果のCG像は、既に以前から常識化したような内容であるが、魅力的なCG像により大きなインパクトを与えた。人間は、五感の中で、情報の80-90%を視覚から得ると考えられているので、CG像が様々な既存情報も統合した深い理解と新しい発想に繋がるのではとの気持ちを強めた。

CGで見るゼオライトの細孔構造と分子ふるい効果⁸

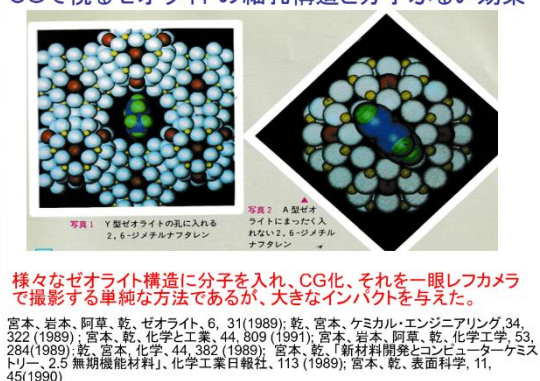
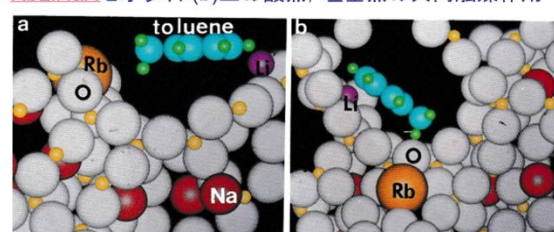


図3 CGで見る分子ふるい効果

次のステップとして、名古屋大学村上研時代に先生、学生、研究員の方々と様々な実験手法、量子化学計算等で研究した対象にCGを適用した。図4はイオン交換ゼオライト

ト触媒上でのトルエンの側鎖アルキル化反応での酸点・塩基点の共同触媒作用モデルにCG視覚化を適用したもので、イオン交換サイトの少ないY型(a)ではトルエンのベンゼン環と側鎖メチル基が酸点・塩基点の共同作用が立体的に困難であるが、イオン交換サイトの多いX型(b)ではそれが可能となり、実験結果をうまく説明している。この発表は、酸塩基触媒で有名な田部浩三先生主催の国際会議で発表したが、田部先生が最前列で注目して下さった姿を今でも鮮やかに思い出す。

RbLiNaXゼオライト(b)上の酸点・塩基点の共同触媒作用⁹

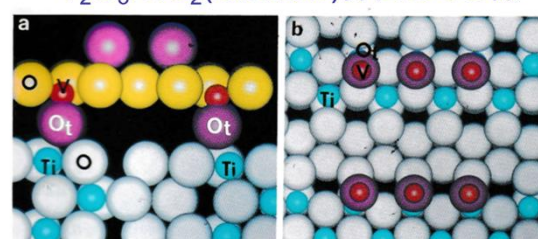


イオン交換サイトの少ないY型(a)ではトルエンのベンゼン環と側鎖メチル基が酸点・塩基点の共同作用が立体的に困難。イオン交換サイトの多いX型(b)では可能となり高い側鎖アルキル化活性

A.Miyamoto, S. Iwamoto, K. Agusa, T.Inui, Proc. Int. Symp. Acid-Base Catal, 4.9 (1988);

図4 CGで見る酸点・塩基点共同作用

V₂O₅/TiO₂(anatase)界面のCG像¹¹



火力発電所からの排ガス中のNOxのNH3による選択浄化反応($\text{NO} + \text{NH}_3 + 1/4\text{O}_2 \rightarrow \text{N}_2 + 3/2\text{H}_2\text{O}$ 等)用触媒等として優れた性能を示すので、多くの実験的、理論的な研究が進められたが、界面のCG像からTiO₂(anatase)の担体効果が構造面から明らかになった。

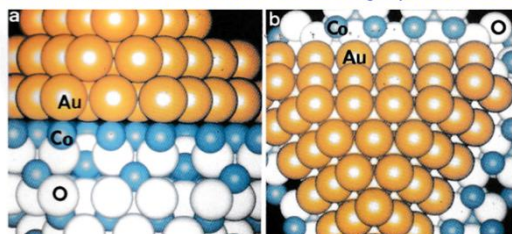
A.Miyamoto, S. Iwamoto, K. Agusa, T.Inui, MRS. Int. Mtg.on Adv. Mats. Vol.2, p.381(1989).

図5 CGで見るV₂O₅/TiO₂(anatase)界面

図5は $\text{V}_2\text{O}_5/\text{TiO}_2(\text{anatase})$ 界面の CG 像であるが、 V_2O_5 に対する $\text{TiO}_2(\text{anatase})$ の優れた担体効果を構造面から明らかにしている。

このように CG の魅力が明らかになると、注目も高まり、3次元 CG 手法を活用する様々な共同研究も始まった。代表的なものを述べる。図6に示した春田正毅らによる金超微粒子触媒の研究はご存命中にはノーベル化学賞候補にもなり非常に有名であるが、図6の CG 像は、飯島澄夫らによる電子顕微鏡像とも合致し、界面での美しい原子配置の適合を示した。図7の中の説明にも記したように、当時は高温超電導ブームで沸き上がっていて、CG への期待も高まり、鯉沼秀臣教授グループと協力して、様々な基板上でのエピタキシャル成長過程の視覚化を進めた。

金超微粒子触媒を実現する $\text{Au}/\text{Co}_3\text{O}_4$ 界面の CG 像¹²



金は化学的な高い安定性もあり触媒として注目されなかったが、春田らは、 Co_3O_4 など担体上で金超微粒子を形成することにより低温での CO 酸化などの特徴的な触媒反応を見出し (M. Haruta, S. Iijima et al., Proc. 9th Int. Cong. Catal. 3, 1206 (1988) など) 世界的に注目された。CG により界面での原子配置の適合性が示された。

A. Miyamoto, M. Haruta, T. Inui, Catalytic Science and Technology, Vol. 1, p.497 (1991).

図6 CG で見る $\text{Au}/\text{Co}_3\text{O}_4$ 界面

再度、図2をご覧になって頂くと、京都大学石油化学科助教授時代は、主には CG だけを利用したが、魅力的な3次元 CG 像によりこれまでに実験的・理論的に関与した系だけでなく、共同研究を通して多彩な分野へのインパクトが得られることを確信する機会にもなった。図2の後半に示したよう

高温超電導薄膜のエピタキシャル成長

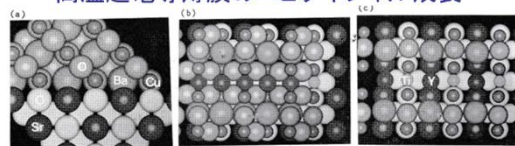


Fig. 4 Crystallographic fit of the (110) plane of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$ with the (110) plane of SrTiO_3 . (a) view from the [010] direction of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$; (b) view from the [110] direction of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$; (c) monolayer of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$ on SrTiO_3 . Cu^{2+} : small red sphere, Ba^{2+} : large purple sphere, Y^{3+} : blue sphere, Ti^{4+} : small cyan sphere, Sr^{2+} : large green sphere, O^{2-} of $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$: large yellow sphere, O^{2-} of SrTiO_3 : large white sphere.

Bednorz-Mullerが1986年に高温超電導酸化物を発表した直後で、高温超電導ブームが沸き上がっていた。CGへの期待も高まり、様々な基板上でのエピタキシャル成長過程の界面の視覚化を進めた。実験面でのリーダーであった当時東工大の鯉沼秀臣教授グループとの協力も進み、高速網羅的スクリーニングへの期待、その後のコンビナトリアル計算化学への展開にも繋がった。

A. Miyamoto, S. Iwamoto, K. Agusa, T. Inui, Proc. 32nd Japan Cong. Mater. Res., p.145 (1989); A. Miyamoto, S. Iwamoto, K. Agusa, T. Inui, 表面科学, 10, 481 (1989).

図7 CG で見る $\text{Ba}_2\text{YCu}_{27-x}/\text{SrTiO}_3$ 界面

に、1992 年からの東北大学教授時代は、InsightII, CeriusII, DMOL, Materials Studio など市販ソフトウェアを活用するとともに、教員、学生メンバー等が、図8に示したコンピュータ化学の方法に係わる多彩なソフトウェア、方法論も開発した。

コンピュータ化学の方法(2007頃)

- 1 電子論: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 古典原子論: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 化学反応ダイナミクス: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 メソ・マクロモデリング: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 インフォマティクス: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 可視化(Human Interface): コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 実験融合コンピュータ化学(本物シミュレーション)

図8 東北大学時代に利用した手法

東北大学で新しい研究室を開設した時は、先に紹介したように[1]、卒論生中心の小研究室であったが、新分野にかける気持ちからそれぞれ大学院生、教員並の大活躍であった。東北大学と言えば、今は、最初の「国際卓越研究大学」として有名であるが、当時は、全国の大学の中で学生運動の影響が残り、産学連携反対の考えも支配的であったが、東北大学では「産業は学問の道場なり」

という本多光太郎先生の言葉で表される伝統をもとに、未来科学技術共同研究センターを中心に、産学連携に対する先進的な挑戦が始まっていた。その結果、事務局も外部資金による教員、研究員、技術補佐員の採用などご支援を頂き、図9に示したように、元々の学部の研究室に加え、未来科学技術共同研究センターでの研究室、寄附講座での研究室を合わせて200人を超えるメンバーで研究を進めることが出来た。今では、産学連携研究は当たり前のこととして全国の大学に広がっているが、重要な歴史的局面で、新しい大学造りに貢献する東北大学の伝統を若い世代の方々に知って頂いたことにも感謝の気持ちを強くした。



図9 東北大学時代(2007年頃)のメンバー

6. 若手人材育成における Catalysis: 触媒作用への新しい挑戦

触媒が頻繁に取り上げられ注目されるようになり、元々の化学の概念に止まらず、人間社会や日常会話の中でも触媒という言葉が広がっている。自分自身は必ずしも中心にいらなくても、他者や出来事の変化を引き起こす存在として使われている。まさに、(一社)アイリックの代表理事としての自分の役割にぴったりの言葉であるし、後期

高齢者になっても触媒と身近に過すことが出来ることは有難いことである。今流行の ChatGPT に尋ねても、インド独立運動に貢献したガンジー、幕末の日本に貢献した坂本龍馬の役割も触媒と考えられているようである

化学分野における触媒研究では、反応が進む、進まないという現象的なことだけでなく、様々な計測技術、理論化学、コンピュータ化学によりもっと微細な原子レベル、量子レベルでのメカニズムも明らかにされてきているが、人間社会における変化にも脳科学などの最新の成果が適用され、Catalysis のメカニズムの解明への方法論も進んでいる。出来るだけイノベーションに繋がるよう試行錯誤を進める中で、折角、長期にわたり実験的に、理論的に、またコンピュータ化学により取り組んできた課題であるので、イノベーションにおける触媒作用についても出来るだけ科学的に検討出来ればと考えている。現時点では感覚的ではあるが、意外に分子も人の触媒作用も根本原理は共通しているのではないかと考えている。

折しも東北大学では最初の国際卓越研究大学に関連して、様々な新しい活動、挑戦が進められ、大いに盛り上がり、その関連でも貢献への期待を感じている。具体的には、永年東北大学未来科学技術共同研究センターの客員教授等としてご指導頂いた産学官のシニア世代の方々と学生、留学生、若手教員、若手教授など多方面の産学官現役世代との打合せ、交流の機会をもち、グリーンクロスステック研究、SDG 対応エネルギー研究、インドネシア大学との国際連携新環境技術研究、二酸化炭素有効利用技術、次

世代シミュレーション活用研究、未来型原子力関連研究、有機高分子・バイオ分野研究、環境資源循環研究、文系における国際連携研究、バイオ生命工学、極限デバイス分野、オーストラリア Curtin 大学との学術交流、高専編入生の多彩な活躍方法、花の色の科学、国際交流によるイノベーション推進、有機・バイオナノ材料の新展開など現役世代それぞれのニーズ、課題を理解し、各人・各課題に相応しい支援活動を進めている。

7. むすび

久しぶりの触媒討論会への参加を機に、改めて触媒について考え、同時に自分が触媒研究の中で進めたコンピュータ化学の発展について再考する機会も得て、現在、(一社) アイリックの代表理事として取り組んでいる若手イノベーション支援について考えを深める機会を得た。人間社会の中での触媒作用の考え方についても fNIRS, EEG などのウェアラブル脳計測技術と AI 活用等により急速に理解が深まっているので、様々な試行錯誤の中にもこれら脳科学関連の最新成果も加えながら、Catalysis を活用し、若手イノベーション支援に貢献出来ればと期待している。

引用文献

- 1) 宮本 明、「触媒学会・触媒研究の思い出」、触媒懇談会ニュース、No.99 (2017).
- 2) 宮本 明、「進化する社会と学問:触媒・コンピュータ化学研究の50余年を通して」、触媒懇談会ニュース、No.153 (2021).