

触媒懇談会ニュース

触媒学会シニア懇談会

PC片手にキャタリシスの野原散策

ーシニアで始める計算化学の楽しみ方ー

外はいつせいに芽が吹き出し春たけなわとなった・・・

ナノマテリアルズ・新規先端材料の花盛りである、実はなるのか？あだ花ばかりではないか？群雀が喧しい。連雀いづくんど大鵬の志を知らんや・・・そんな言葉があったような、無かったような・・・。触媒屋はかねてから超機能を持つナノマテリアルズ、“賢者の石”、を相手にしてきた。何を今更の感もある、しかし次世代情報、バイオ、エネルギーと賑わっている、結構なことである、賑やかで盛んな場から新しい“こと”が起こり“もの”が生まれる。

ナノマテリアルズフロンティアの拡大を支えているのはコンピュータの発達をもたらした分析技術の高度化である。多彩な光を使う分光法、表面・界面分析法、画像処理可視化技術、そして理論計算・シミュレーション等々、ナノサイズ物質を直接扱うことが日常のことになった。

フロンティアが広がれば必ずニッチが出現する。フロントランナーとして未知を開拓するのは若者の特権である、スピード第一となる。しかし先を急ぐあまりの見落としも多い。ドライブ、サイクリング、散策ではものの見え方が違う。散策ならものを拾い上げることも容易である。玉石混淆の中から何を選ぶか、見極めのセンスが問われる、そこにシニアのチャンスが生まれる。

計算化学・シミュレーションを見てみよう。今や真空中・絶対零度の基底状態に限らずさまざまなよりリアルな状態についてシュレーディンガー方程式の精緻な解が得られる。コンピュータの能力（お金と時間）の問題はあるにしてもモデルの大きさ、計算精度、計算時間のいろいろなレベルを選ぶことができる。Gaussian, GAMESS等のパッケージソフトを使えばPC上で実験家が計算結果を手にすることも容易である。

さて、ところでキャタリシスは？ 計算は打出の小槌ではない、いかに精緻な計算であろうと反応機構が“ポン！”と出るわけではない。仮説の設定と計算の試行錯誤が始まる、実験化学と同じである。計算機実験の利点はPC中の作業故、爆発、火災、中毒といった危険の無いこと、“うまくすれば”結果が非常に短時間で得られることである。これまたシニア向きである。

分子軌道計算を行うと数字の洪水に見舞われる。仮説（モデル）はできるだけ簡単なものから始めるのがよい。計算結果に流され溺れる危険も少ないし、何より結果が速く得られる。計算機実験はスピードが無いと魅力が無い。モデルを小さなものから始めて次第に複雑化してゆく。ここがシニアの腕の見せ所である、シニアは触媒研究の実務の中でいろいろな作業仮説を蓄えている、その知識、経験、知恵が生かされる。

計算の道具をどうするか？ 算盤代わりはノート PC として、さて計算ソフトは？ 迷いだすと切りが無いのはゴルフ道具と一般である、ここはお任せいただいて LUMMOX とする。お手持ちの PC にインストールし、操作法、データの読み方を丁寧に説明する。ぜひお試しください。キャタリシスの野原で演じられる電子の軌道をまとった原子の振る舞いを目にするヴァーチャルとはいえ一寸した感動を覚える、きっと夢中になる・・・。

自由に書いたら広告文のようになってしまった、羊頭狗肉ではないはずである、お赦しの程を。本当かうそか試してやろうと言う方は乞うご一報。

(ルモックス技研 志賀昭信)

シニア懇談会事務局報告

懇談会名称

シニア懇談会の名称はこのまま触媒学会シニア懇談会と呼ぶことで3月30日の触媒討論会でのシニア懇談会で決定しました。議事録は追ってお送りします。

懇談会員調査

シニア懇談会の会員の皆様には個人のキャリアや専門、できることなどの調査を近々行います。

会計担当と活動資金

シニア懇談会の会計は出口隆元常務理事が引き受けてくださいました。今年度、触媒学会からのシニア懇談会へ活動資金として5万円頂きました。

シニア懇談会事務局

室井高城

連絡先 takashiro_muroi@yahoo.co.jp

FAX 029-873-8844