

## 第 5 回 π 造形若手会に参加して

大阪大学 中野研究室 永海貴識

略歴

2016 年 3 月 大阪大学基礎工学部化学応用科学科 卒業

2018 年 3 月 大阪大学大学院基礎工学研究科

博士前期課程 修了

2018 年 4 月 同大学大学院同研究科 博士後期課程 入学

趣味：熱帯魚



私は普段量子化学計算を用いた理論研究をしている。そのため、構造有機化学分野の実験家が多い π 造形科学界隈において私の研究発表をすることは、研究手法の根本的な違いから少し気後れしてしまう。にも関わらず、私のボスの独断によって、今回の π 造形科学若手会において口頭での学生講演をすることが私への打診を経ずに決定されていた。

今回の講演内容は、「π 共役開殻分子の芳香族性に関する理論化学」として、実験家にも馴染み深い“芳香族性”に関する新奇な量子化学計算手法について発表することにした。聴衆のバックグラウンドを考慮し、理論研究が普段どのような作業仮説を経て遂行されているのか示しつつも、できる限り数式を排した上で、密度図などを多用した視覚的に理解しやすいスライド作りを心がけた。

当日の発表では、“分子軌道”“スピン”“分子開殻性”“磁場誘導電流”“奇電子”など、馴染みのない単語が出現する度に聴衆が置き去りになるのを感じた。しかし、講演後は意外にも多くの先生から基礎的かつ鋭い質問を頂き、特に「分子構造と開殻性との相関」「磁場誘導電流計算の実際の適用」「電子状態計算の手法選択」などに関して、非常に有意義な議論を交わすことができた。π 造形科学界隈の実験家先生達の研究フットワークの軽さに脱帽するとともに、素早くかつ鋭い洞察に驚嘆するばかりであった。また、理論畑の人間としても、これらの議論やポスターセッションを通して、新たに実験的エッセンスを加えた研究上のインスピレーションを付与されたと実感している。今後も、π 造形科学界隈の実験と理論の協奏が益々発展することが期待されるとともに、私自身も両者の架け橋たる存在でありたいと思った。