令和元年7月1日発行（毎月1回1日発行） 通巻818号 昭和15年4月18日第3種郵便物認可 CODEN:KAKYAU ISSN 0451-1964

CHEMISTRY

化学

JULY
2019
Vol.74
7

研究物語 ● Research story

小豆の赤色はアントシアニンではない!?

インタビュー ● Interview

新・化学を創ってゆく人びと

前田 理 教授に聞く

解説 ● Research article

新たな原子構造をもつ第四の固体物質

●インタビュー●

新・化学を創ってゆく人びと⑪

失敗を恐れずに大きな目標に向かって全力でぶつかろう

北海道大学大学院理学研究院 前田 理 教授に聞く

研究者にとって，研究成果・発表論文を完成後のパズルとすれば，人物像や研究への思い，フィロソフィーはそのピース一つひとつといえるのではないだろうか．個々には見えないが，確実にそのパズルを構成し，一つでも欠けては完成しない．今回は量子化学計算による化学反応設計の手法である反応経路自動探索法「AFIR」を開発し，実践的な応用へ進めておられる前田 理先生の「ピース」を知るべく，お話を伺った．（『化学』編集部）

―― 2019 年 4 月から前田先生が化学の拠点長を務められる世界トップレベル研究拠点プログラム〔北海道大学化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）〕がスタートしましたが，若くして拠点長に就任されておられますね．

前田　一応，僕のテーマを一つの柱として構想を立てて，僕が拠点長という体裁をとっていますが，いかんせん若く経験値もあまりないので，北大のみならず，他大学も含めて，多くの先輩方に支えていただいています．思うに，僕の研究人生って運に助けられているところが結構あるんです．WPI を申請する際も，以前は上司だった武次徹也先生が「前田さんは人一倍運がいいから，前田さんでだしたら WPI も通るかも」と仰っていたのですが，無事に採択されたので(笑)．

――そのあたりもいろいろお聞きできればと思います．

●第 1 志望は化学ではなく物理●

――化学の研究者のなかには，ご家族の影響で化学の道に進んだという方もおられますが，前田先生はいかがですか．

前田　僕はまったく違うタイプですね．父親が数学の教員だったので，昔から数学は得意だったのは今につながっているかもしれません．実際に理系へ興味をもったのは，小学生のときに見た NHK スペシャルのアインシュタインの特集がきっかけです．そのなかで，原子はこの世界を構成する最小単位である，という説明をされていたのを聞いて，「原子を組み立てれば何でもつくれるはずだから，いつか原子を制御して，何でもつくれるようにする！」と思っていました．実際の化学の世界は複雑なのでそんな簡単にはいかないのですが，当時はできると信じていました．だからこのころは物理学の教授が将来の夢でした．しかし，中学・高校生のころは部活の剣道にのめり込んで，勉強は二の次にしていましたね．団体では県大会で 3 位入賞するほどの強豪校だったのですが，僕自身はそこまで強くなかったです．

――大学は東北大学理学部化学科に入学されていますが，大学受験の際は化学を志望されたのですか？

前田　いえ，第 1 志望は物理学科で，第 2 志望を化学科にして東北大学を受験しました．結果は化学科で合格．物理を学びたかったので，どうしたものかと高校の化学の先生に相談したのですが，「化学に行っても物理っぽいこともできる」といわれ，化学科に入学することにしました．この時点では動機がネガティブですが，化学科に進学したことで小学生のころにやりたかったことが今実際にできているので，「人間万事塞翁が馬」だと思います．

――研究室配属前はどんな学生生活を送っていましたか？

前田　化学科に入学したものの，物理化学以外はあまり面白いと感じなくて，当時はわりと落ちこぼれていたんです．や

PROFILE

前田 理 まえだ・さとし
北海道大学大学院理学研究院教授，
北海道大学化学反応創成研究拠点
（WPI-ICReDD）拠点長

1979年長野県生まれ．2002年東北大学理学部化学科卒業，2007年東北大学大学院理学研究科博士後期課程修了（ともに大野公一教授）．同年4月～2010年3月まで日本学術振興会特別研究員PD．その間，東北大学（大野公一教授），アメリカ・エモリー大学（諸熊奎治教授），豊田理化学研究所（大野公一教授）で研究を行う．2010年4月より京都大学次世代研究者育成センター・特定助教（白眉プロジェクト）に着任．2012年2月より北海道大学大学院理学研究院（武次徹也教授）にて助教，准教授を務め，2017年より教授（現職）に就任．2018年よりWPI-ICReDD拠点長．

はり，原子・分子の段階から理解を積み重ねていくスタイルじゃないと納得がいかなかった．なので，有機化学は講義で説明をきいても「これとこれを混ぜたらこれができる」というパターンの暗記に思えてしまって納得できませんでした．講義は一応全部受けて淡々と単位を取っていましたが，やっぱり化学の面白さがわからなくて，成績は悪いし，修士卒で公務員にでもなろう，と考えていました．

●大野研でアカデミックへの道を決める●

――東北大で大野公一先生[*1]の研究室に入られていますが，最初から大野研を希望されたのですか？

前田　これも変な経緯なのですが，大野研を最初は希望していませんでした．東北大理学部化学科の研究室配属は3年生の秋にありますが，まず，先にお話しした理由から，研究室は物理化学系じゃないとダメだと思っていたんです．物理化学の研究室は四つあったのですが，僕の配属の年は物理化学が人気で，定員5人の四つの研究室に志望者が20人ちょうど．そのなかで大野研だけ志望者が4人．一方，僕の希望研究室は1人定員オーバーの状況でした．しかも，当時の研究室配属は成績順とかではなくてじゃんけんで決めていたんです．そうなると，じゃんけんに負けたら最後，物理化学以外の分野の研究室に入ることになってしまいます．そこで考えたんです．「今大野研に移れば，物理化学の研究室に絶対行ける」と．すばやく大野研に希望を移して無事に配属され，今，自分がやりたかった研究ができています．あのときの自分の判断はよかった．後々もでてきますが，僕の研究人生はこういうところで運が味方してくれていることが多いんです．

――大野研はどのような研究室だったのですか？

前田　大野研は物理化学の研究室だからか，有機化学の研究室などと雰囲気が全然違ってかなり自由だったんです．装置のマシンタイムの都合などもあって，コアタイムはなく，みんないろいろな時間にやってきて，終わったら帰る．研究についても，先生方や先輩方から頻繁に指示がでるわけではなくて，アイデアとゴールだけを受けて，自分自身で膨大な試行錯誤をしながらゴールへ向かって研究するというスタイルでした．

――その雰囲気が前田先生にはとても合っていたと．

前田　そうですね．とくに僕の手掛けていた「反応経路自動探索」の仕事は大野研の本流の研究テーマではなかったので，「こうやればいい」ということが本当になくて，自力で手探りするしかなかった．そういう意味で，大野研では自分で考えて研究をゴールまで進めていく能力を鍛えてもらったと思います．

もちろん，完全に自分だけの力で達成したわけではありません．大野先生は変な口だしはされませんが，ものの考え方がとても緻密で，要所要所で僕たちを導いてくださるのがすごくうまい方でした．このやり方は人を選ぶと思うので，善し悪しだと思いますが，僕にはこの自主性をうまく育てていく雰囲気がハマったのでしょうね．

――大野研で博士号を取得されていますが，アカデミックに進もうと思われたのはいつのタイミングですか？

前田　今も取り組んでいる「反応経路自動探索」に着手したときですね．M1のころのことです．当時開発していたのは，ADDF法というAFIR法とはまったく別の手法でしたが．

――「反応経路自動探索」については，本誌でも2013年にご寄稿いただいていますが[*2]，3，4年生では違うご研究をされていたのですか？

前田　4年生までは窒素分子に電子励起したヘリウム原子を当てて，そのときの原子と分子の相互作用をものすごく緻密に，理論も入れて解析するという研究をしていました．これが，僕が小学生のころから抱いていた興味とすごく合っていて面白いなって研究していたら，学部3年で日本化学会春季年会（年会）でポスター発表をさせてもらえたんです．それで，自分でも学会発表できるんだ，とまずは研究へのやる気が高まりました．

次に4年生の夏を迎えて，院試勉強しようと思って大野研に行ったら，ちょうど部屋にいた大野先生に呼ばれて，「原

＊1　大野公一（おおの・こういち）：NPO量子化学探索研究所・理事長（研究所長），東北大学名誉教授．
＊2　前田 理，化学，**68**（3），12（2013）．

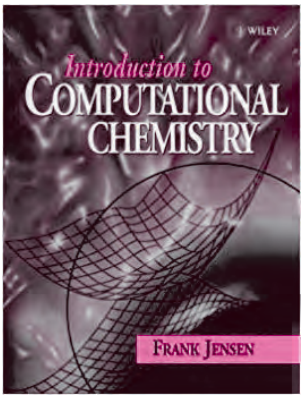
子と分子の相互作用をどう扱ったらいいか，アイデアがひらめきました」って1時間くらい熱心に僕に説明されたんです．それで院試後にプログラムを書いて実践したら，これがうまくいって，さらにそこに自分で考えたアイデアを加えてみたらとても面白い結果がでたんです．今考えると僕が自分でひらめいたように上手に誘導してくださったのだと思います．その「自分のアイデア」で研究が大きく進んだ経験が，アカデミックを意識したきっかけになったと思いますね．

――4年生の時に「自分のアイデア」で行った研究で面白い結果がでて，その後M1へ進学して「反応経路自動探索」の研究に着手されたと．

前田　M1になってすぐに手掛けたわけではありません．4年生に行ったテーマを違う系に応用する研究を手掛けていたのですが，この研究は一旦プログラムを書いてしまうとあとはそれをコンピュータが動かしているのをひたすら待っているだけ，という状況で，周囲からは暇そうに見えたらしいんです．それで大野先生に，Frank Jensenという方が書いた“Introduction to Computational Chemistry”という洋書を一緒に読みましょう，と声をかけられたんです．でも毎朝8時からだったので，結局参加したのは僕だけでした(笑)．

――それは輪講のようなものですか？

前田　事前の準備などはまったく要求されなくて，その場で僕が本を英語で全部音読して，大野先生とディスカッションするという形式でした．大野先生は僕に聞かせて教えるというより，ご自分もその本を理解しようと読んでいらっしゃる感じでしたね．「ここはこういうこと書いてあるのかな」とつぶやいていらっしゃるのを僕はただ「そうなんだ」って聞いていました．とはいえ，読破するのに朝8時から2時間，土曜日も入れてM1の4～8月までを費やしたので，正直辛かったです(笑)．



Frank Jensen, “Introduction to Computational Chemistry,” John Wiley & Sons, Hoboken (1998).

これが僕にとって転機になるんです．読み進んでいくなかで，「反応経路自動探索」というものが当時不可能に近いほど難しい課題であるということを知りました．そのときは，大野先生のほうから「こうやればいいんじゃないか」という，ADDF法とのちに呼ばれる方法のアイデアがでて終わりました．その後，数か月間はそのことをすっかり忘れていましたが，それを実際の分子に対してどうやって適用すればよいかのアイデアが湧き，こっそりとプログラムを書きはじめたんです．最初のプログラムが完成した段階で大野先生に報告したところ，非常に喜んでくれて，正式に反応経路自動探索の仕事を始めることになりました．この研究に取り組みはじめて，アカデミックへ進むことを決めましたね．

●反応経路自動探索法を武器に渡り歩く●

――反応経路自動探索の研究で博士号の学位を取得されたあと，アメリカ・エモリー大学の諸熊奎治先生[*3]の研究室へ

◆前田 理先生が選ぶ自身の代表論文◆

❶白眉助教時代　実用的かつ汎用的な反応経路自動探索法を着想

“Communication: A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions,” S. Maeda, K. Morokuma, *J. Chem. Phys.*, **132**, 241102 (2010).

反応経路自動探索には二つの重要な視点があります．一つ目は，実際の反応経路から外れたところの探索をできるだけ減らすこと，二つ目は，アルゴリズムがシンプルであることです．これら両方を兼ね備えたAFIR法を着想し，そのコンセプトを本論文にて公表しました．AFIR法により，有機合成反応や触媒反応などへの展開が一気に開けました．

❷修士学生時代　反応経路の登り口探索への初期技術

“A New Method for Constructing Multidimensional Potential Energy Surfaces by a Polar Coordinate Interpolation Technique,” S. Maeda, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, **381**, 177 (2003).

反応経路自動探索関連の第一報．論文中では明示していませんが，この論文で発表した極座標内挿法は，ADDF法による反応経路の登り口探索において利用されました．着想から論文執筆まで，すべてを自分自身で行った思い出の論文．人生初の第一著者論文だったので，初稿は大野先生の改訂によって跡形もなくなってしまいましたが．

❸最近　速度論を実装した反応経路自動探索技術を提案

“A Reaction Path Network for Wöhler’s Urea Synthesis,” Y. Sumiya, S. Maeda, *Chem. Lett.*, **48**, 47 (2019).

この論文で発表した速度論ナビゲーション技術により，反応経路自動探索を，単にたくさんの反応経路を見つけだすだけの技術から，オン・ザ・フライの化学反応シミュレータへとレベルアップさせることができました．第一著者の住谷陽輔君は，私が学部から博士まで，はじめて指導した学生です(現職は北大博士研究員)．

学振 PD として留学されていますね.

前田　実は，学位を取った時点で僕は諸熊先生とはまったく面識がなかったんです．ここまではほかの先生方もよくあることでしょうが，大野先生も諸熊先生ととくに懇意にしていたわけではありませんでした．研究内容については，お互いよく認識しあっていたと伺っていますが.

――それでなぜ大野研から諸熊研へ留学を？

前田　世間的には，大野研は実験系の研究室と認識されていて，僕は実験系の研究室からポッとでてきた理論研究者という立場だったんです．なので，「とにかく日本でも世界でも，トップの理論化学の研究室に 1 回行ってきなさい」ということで大野先生に諸熊先生のところに学振 PD をだすことを提案されたんです．諸熊先生は化学反応そのものを取り扱っていましたし，世界トップの研究者でしたから，俗っぽくいえば，「箔を付けてこい」ということだったのでしょう.

――そのとき前田先生はどう思われたのですか.

前田　ちょっと怖そうだなぁ，とも思ったのですが，世界トップの理論化学の研究室に行ってみたい，という気持ちが勝って諸熊研に留学することにしました.

――一方の諸熊先生のほうは，前田先生が学振 PD をだして，どのような反応をされたんですか.

前田　実は，僕が大学院で反応経路自動探索の仕事をやっていたころから，諸熊先生は結構期待してくださっていたみたいなんです．2017 年にご逝去されて，諸熊先生の居室の遺品の整理をしているときに，2005 年に開かれた理論化学の国際会議の要旨集がでてきたんです．当時，僕は大学院生でしたが，大野先生が僕の下にポスドクを付けてくださっていたんです．その方がその国際会議で僕の開発した方法を発表してくれたのですが，諸熊先生はその頁にいっぱい書き込みをされていました．ほかの頁はあまり書き込みがなかったので，あのころから僕の研究にすごくいい印象をもってくださっていたことを知りました．諸熊研へ留学したとき，最初に「期待してるよ」といってくださったのですが，そのときはどのくらい期待されているのかなんてわからないですから，その要旨集を見たときは嬉しかったですね.

――諸熊研ではどのようなご研究を.

前田　諸熊先生も，僕に対しては研究について細かく指示されることはなくて，とにかく僕の開発した ADDF 法を，電子励起状態が関与する光反応に応用したいということと，諸熊先生が開発された ONIOM 法[*4] とつなげたい，という二

＊3　諸熊奎治（もろくま・けいじ，1934-2017）：鹿児島県生まれ．1957 年京都大学工学部を卒業したのち，1962 年より京都大学工学部燃料化学科助手（福井謙一教授），1963 年同大学大学院工学研究科博士課程修了．分子科学研究所名誉教授，アメリカ・エモリー大学名誉教授，京都大学福井謙一記念研究センターシニアリサーチフェロー.

＊4　ONIOM（オニオム，our own N-layered integrated molecular orbital and molecular mechanics）法．1996 年に諸熊奎治らが発表した計算手法．巨大系や複雑系の計算に際して，系を最も重要な核心部分とそれを取り巻く二次元的三次元的な部分に分け，核心部分は高精度に，二次元三次元的なところは順次簡便で容易な方法に落として計算する.

■大野公一先生より前田先生へのコメント■

前田 理君は，私が十年前まで担任した研究室（東北大学理論化学研究室）に卒研生として配属されました．当時の研究室には，美斉津文典助教授（現 東北大学教授），山北佳宏助手（現 電気通信大学准教授），岸本直樹助手（現 東北大学准教授），上級生に大下慶次郎君（現 東北大学助教），角山寛規君（現 慶応義塾大学准教授），山崎優一君（現 東京工業大学准教授），堀尾琢哉君（現 九州大学准教授）らが在籍しており，新しい科学・技術を切り拓くプロジェクトが五つほど走っていました.

前田君は，「衝突イオン化反応の立体ダイナミクス」の研究グループに属し，「ペニングイオン化反応の古典トラジェクトリ計算におけるモデル相互作用ポテンシャルの最適化」に挑戦しました．伝統的ポテンシャル解析では多重極展開を用いますが，多原子分子のように非常に異方的な場合には適さないと考えて，相互作用を支配する HOMO や LUMO などの分子軌道を利用してポテンシャルを構築する方法を試みました．この試みは，のちに画期的成果につながるのですが，前田君が大学院に進学したときには，何万本ものトラジェクトリを走らせてポテンシャルの最適化を 1 度試すのに数か月も計算機を動かし続けて結果を待たなければならない状況になっていました.

そこで，私は前田君に国際的計算化学のテキストを一緒に読むことを提案し，朝 8 時前から約 2 時間，2 人だけの読書会を，前田君の M1 の最初から 8 月上旬まで日曜を除くほぼ毎日行いました．テキスト中の問題点とそれを改善・解決する方策を議論するなかで，ポテンシャルの非調和下方歪み（anharmonic downward distortion；ADD）を利用する反応経路自動探索法（global reaction route mapping；GRRM）の着想が生まれました.

前田君は GRRM のプログラム開発と改良，さらに人工力誘起反応（artificial force induced reaction；AFIR）法による新展開を推進し，今や GRRM は理論化学の比類なきツールとなっています．今後ますます，前田君を中心に，日本の理論化学が世界をリードしていくことを確信しております.

大野公一（量子化学探索研究所所長・東北大学名誉教授）

つのテーマを提示されました．

留学の半年ほど前，学士会館でお会いして，その際に光反応についていろいろお話されたんです．「光反応にはポテンシャルが交差しているコニカルインターセクション[*5]があって，それを見つけないと反応経路を議論できない．だからADDF法でそれをだせるようにしたらどうだ？」ということを熱く説明されました．そこで，留学するまでの半年間考えて，留学時にはコニカルインターセクションをだせるようにしていたんです．そのテスト計算の結果をお見せしたら，長年悩んでいた反応の機構がパッとわかったらしくて，諸熊先生はすごく喜んでくれました．それが僕にとってはとても励みになりましたね．

理論化学研究室（前田研）の集合写真

実際にエモリー大学にいたのは1年間で，その後半年間は京都大学の諸熊研に在籍していたのですが，諸熊研では有機合成や光反応の反応機構について，何が重要なのか，どう考えればよいのかということを学んだと思います．

――その後は京都大学白眉プロジェクトを経て，現在所属されている北海道大学の武次徹也先生の研究室へ助教として着任されていますが，ご自身で決めて公募にだしたのですか？

前田　もちろん最終的には自分で決めましたが，これも僕，結構運がよかったんです．白眉のときは，学振PDが2010年に終わってしまうというときに，諸熊先生から「白眉ってやつが始まるらしいよ」と教えてもらって，何だかよくわからないままに公募にだしたら採用されたんです．白眉では，5年間成果はゼロでもいいので，ブレークスルーの種を見つけなさい，といわれました．当時はADDF法に固執していましたが，白眉のおかげで成果主義から解放されて，まったく別の手法であるAFIR法を開発するモチベーションが生まれました．これが現在の有機合成や触媒化学などへの展開を生みだしました．

北大については，大野先生の強い勧めでした．僕は武次先生とはそんなに懇意にしていたわけではなかったのですが，大野先生と反応経路自動探索の研究を始めたころ，日本国内での発表より前に，ドイツのボンで開かれた理論化学の国際会議ではじめてポスター発表したんです[*6]．そのときに最初に話を聞きに来てくださったのが武次先生．それ以降，ずっと僕の研究に注目してくれていたそうで，大野先生が「武次研で公募がかかっているのなら，絶対だすべきだ」といわれるので，それでだして採用になりました．なので，先生方の勧めを疑うことなく，それに従っていたらここまでこられたという感じです．

――諸熊先生も武次先生も前田先生のご研究にずっと前から期待しておられたというのは，前田先生が実力で引き寄せた運のようですね．

●失敗の連続が「楽しい」●

――反応経路自動探索は1970年代から研究が行われていたものの，先掲の“Introduction to Computational Chemistry”でも記述があるようにかなり難しく，2000年代には多くの研究者が開発を諦めてしまったそうですが，このような困難なテーマに着手するにあたって，前田先生はどのようなモチベーションで取り組まれたのですか？

前田　反応経路自動探索の仕事を手掛けはじめたのは大学院生のときですが，このときは将来のことなどはまったく考えていなくて，「難しい」といわれても僕は「できる」としか思っていませんでした．開発は難しかったですが，できるとしか思っていなかった．とくに根拠とかはなかったんですけどね．

――研究がうまくいかず苦しいときや挫折などはなかった？

前田　そういう感情はあんまりなかったですね．もちろん大学院生のときなんて失敗の連続でした．毎日，今日はこの考

＊5　円錐交差ともいう．2枚の対称性の同じ二次元ポテンシャル曲面が1点（円錐の頂点）（0次元）で交差する場合を示す．

＊6　“A New Interpolation Technique for Multi-dimensional Anharmonic Potential Energy Surfaces; The Polar Coordinate Interpolation Technique,” S. Maeda, M. Yamazaki, K. Ohno, XIth International Congress of Quantum Chemistry 2003, Bonn, Germany, July (2003).

えを試して，失敗したから次は別のやり方を試して…ということを延々1年間繰り返して過ごしていましたが，僕はそれが楽しかったんです．

――失敗の連続が楽しかった!? それは驚きです．

前田　ただ単に何も考えていなかったんだと思います．頭のなかに常に10個くらい試したいアルゴリズムがあって，まず1個試して失敗する．でもまだあと9個あるから，次の日はこれを試して…という日々．そうこうしているうちに，試すべきことが少しずつ増えているので，やることが尽きなかった．だからやり続けたというだけなんです．

そうやって試していったなかで，やり方としてベストなものを拾い集めてきてプログラムを構築していきました．大野先生の方針で，完成していない段階でもとりあえずそのときの最新の成果を発表していたので，学会の要旨集と発表内容が違っていることもありましたね．学会で恥ずかしい発表をしたくない，ということもかなり強いモチベーションになっていて，そのおかげで研究が進んだと思います．

●反応経路自動探索法が拓く未来の化学●

――そのようにして前田先生が確立されてきた反応経路自動探索ですが，これを使った今後の目標は．

前田　反応経路自動探索のみでは解決できないと思われていることがいくつもあるのですが，最終的には反応経路自動探索で何でもできると今も楽観的に思っていて，そういった課題を一つひとつクリアしていきたいと考えています．

――何でもできる，とはどういうことですか．

前田　わかりやすい例をあげると，化学反応をコンピュータに提案させるということでしょうか．化学反応を提案するには，収率や選択性などを計算しなければなりません．それをするには，反応経路1本1本をいくら眺めてもうまくいかなくて，エントロピーなどに寄与する内部回転などの細かな運動もきちんと扱う必要があります．だとすると，反応経路自動探索だけではダメそうな気がしてきませんか？ でも，細かな運動に伴う構造変化一つひとつを反応経路と捉えて，反応全体を膨大な反応経路からなる反応経路ネットワークとして扱えば，これができてしまうことがわかりました．それで，複数の反応物の組から「何と何と何がどんな比率で得られるか」という予測や，「ほしい生成物を収率80 %で与える反応物の組はこれとこれとこれです」という提案ができるようになったんです．これはまさに僕が小学校のころに描いていた夢．つまり，「これをつくりたい」といったときに，それを組み立てるやり方を理論的に予測するということです．

――具体的にはこれからどのような研究を．

前田　現段階では，20～30程度の原子で記述できるようなすごく小さい系であれば，目指すところまで一応到達しています．それをより発展させて，最先端の有機化学で用いられる触媒や添加物なども含めて計算できるようにしたい．さらには生体分子にも適用可能にして，ゆくゆくは生体系の理解へもつなげていきたいです．もう「夢」ではなくて，着々と進めていく段階ですね．

さすがに学生のころと違って難しさもわかってきて，「これできるかな？」と思うこともあります．自分の研究者としての力量次第ですが，できるだけ複雑な系まで広げていきたいと考えています．

――WPIも始まって，他分野の研究者の方がたと研究を行うということも今後のアドバンテージになりそうですね．

前田　仰るとおりで，WPIのおかげで自分の視野や心もちが広がったと最近すごく感じます．これまでは理論の視点しかなかったのですが，WPIの発足によって実験系の人を巻き込んで，実際に新規物質を発見するところまでつなげるというモチベーションが生まれました．

これまで僕は理論しかやっていなかったので，研究に対して「机上の空論」という引け目を少なからず感じていました．自分が計算で予測したものは，はたして実験系の人に提案するに値するものなのか？ どこかでそういう葛藤がありました．今は実験系の人と一緒に研究を行う環境が整いつつあるので，本当の意味で実用的・実学的な視点がもてるようになりました．

そしてこれまで以上に期待しているのは，僕らが反応経路自動探索で提案した内容を，実験系の人に見て議論していただくこと．これにより，予測から実際に実現するところまで，迅速につなげていけるようにしたいと考えています．

――これまでは実験系の人からの反応は薄かったのですか？

前田　研究を始めたころも，新しい反応を提案するくらいのことをしてみよう，とCO_2からアミノ酸を合成する反応を提案したんです[*7]．それが2004年のこと．でも，あまりにも見向きされなかったので，僕は予測するというコンセプトでの研究はやめてしまったんです．それからは，人間が機構を頭で想像しにくいような反応を取り上げて，反応経路自動探索でしかできない解析をする，というスタイルで売ってきました．

＊7　“No activation barrier synthetic route of glycine from simple molecules (NH_3, CH_2, and CO_2) via carboxylation of ammonium ylide: a theoretical study by the scaled hypersphere search method,” S. Maeda, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, **398**, 240 (2004).

でも，2016年に北大薬学研究院の美多 剛先生（現WPI-ICReDD准教授）が，僕らが2004年に提案したアミノ酸合成とコンセプト的には同じ反応を見つけて報告されたんです[*8]．僕らの論文を参考にしたわけではないそうですが，僕らが反応経路自動探索で予測したものが実現したんです．これで僕は新たに自信をもてましたし，反応の予測は不可能ではなく，プリミティブなところではすでにできていることを主張することができました．

●多くの出会いと運に導かれた●

――前田先生の研究人生を語るうえで欠かせない，かけがえのない人や貴重な出会いを教えてください．

前田　やはりまずは大野先生です．大野先生に出会っていなければ，多分，アカデミックには来ていないでしょう．そして，“Introduction to Computational Chemistry”の本を大野先生と読み込んでいなければ反応経路自動探索とも出合わなかったと思います．すべてのきっかけを与えてくださったのは大野先生であり，僕の研究人生において最も重要な方です．

次に，鬼籍に入ってしまわれましたが諸熊先生．諸熊研へ留学して，気持ちがすごく変わったんです．それまではあまり応用を意識していなかったのですが，諸熊研で実際に実験系の人とガッツリ共同研究する，ということをちゃんと経験しました．常に2～3個は共同研究のテーマをもらって研究しましたね．諸熊先生は，有機化学や分光学などの実験系の人に寄り添って，ときにはケンカもしながら，一緒に考えていく方でした．そういうスタイルを諸熊研で経験したおかげで，今はいろいろな実験系の人から注目していただいているのだと思います．これは私の私見ですが，10年くらい前までは理論化学の研究者の興味は数式やアルゴリズムに向いていて，泥臭い応用研究への評価は比較的低かった印象があるんです．諸熊先生はそんな時代よりさらに前から，泥臭いところとも向き合って，実際の実験で役に立つことを目指して歩まれていました．そこで一緒に研究したことによって，泥臭いところとの相対し方も含めて学ぶことができたので，本当に感謝しています．

また，武次先生には本当に自由にやらせてもらいました．武次研はいろんな技術をもった人の集まりで，研究室全体としてさまざまな課題を一緒にクリアしていこう，という研究スタイルでした．なので，僕がそれまでに身に付けてきたことを武次研で伸ばすことができたと思います．

その後出会うのが山本 尚先生（中部大学教授）です．山本先生は僕の仕事をすごく評価してくださって，異例ではあるのですが，助教のポジションにいるときに，山本先生が領域代表をされているCREST[*9]の研究代表者にしていただきました．これがなかったら，おそらく今の北大のWPI-ICReDDにはつながっていなかったでしょう．この際，多額の研究資金をいただき，たくさんの共同研究者ができたおかげで，それまで以上にプログラムを発展させ，さらにたくさんの人に僕の研究を認知していただくことができました．

あとはWPIに際して，はじめに声をかけて僕を巻き込んでくださった小松崎民樹先生（電子科学研究所教授，WPI-ICReDD主任研究者）．内々での話し合いで，「拠点長は若手の人がいいんじゃないか」という話になって僕に白羽の矢が立ったそうです．また，同じく北大の伊藤 肇先生（理学研究院教授，WPI-ICReDD副拠点長）は，WPI関連などで，現在進行形で本当にお世話になっています．以前から少し共同研究をしていたのですが，WPIが本格化してからは，まだ経験もあまりない僕を一生懸命支えてくださっています．一応，僕が拠点長となってはいますが，伊藤先生をはじめ，多くの方がたと一緒につくりあげたWPIといえると思います．

こうやって思い返してみると，研究自体は自分自身で進めてきてはいますが，素晴らしい先生方にお引き立ていただいて，運も要所要所で味方して，僕の研究人生があるのだな，と感じますね．

――最後に，明日の日本のサイエンスを担う若い方にメッセージをよろしくお願いします．

前田　僕の研究理念の根底には大野研での経験があるので，すべての若い読者のみなさんにフィットするかわかりませんが，もし自分が成長したいと思うのであれば，若いうちにできるだけ大きな目標を掲げて，すぐにはできない難しいことに挑戦したほうが絶対いい．このスタイルが一番伸びると僕は考えています．ゴールが近いと，乗り越えたあとにどうしても1回休息を挟んでしまいますから．そういうアップダウンを繰り返すよりも，若いときにしかできないような難しいテーマを自分で設定して，そこを目掛けて考えうるすべてのことを実行してください．失敗してもめげずに，とにかく，考えうるすべてのことをやる．これが重要だと思います．みなさんの今後の活躍を期待しています．

――貴重なお話をありがとうございました．

（『化学』編集部）

＊8　“One-Pot Synthesis of α-Amino Acids through Carboxylation of Ammonium Ylides with CO_2 Followed by Alkyl Migration,” T. Mita, M. Sugawara, Y. Sato, *J. Org. Chem.*, **81**, 5236 (2016).

＊9　科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業．山本 尚先生が研究総括を務める研究領域は「新機能創出を目指した分子技術の構築」．