



化学遺産の第 14 回認定 1

認定化学遺産 第 061 号

アジア初のノーベル化学賞： 福井謙一関係資料

田中一義 Kazuyoshi TANAKA

福井謙一博士は 1981 年にノーベル化学賞を受賞されたが、これは日本初だけではなくアジア初の受賞であった。福井博士はフロンティア軌道理論の創始者として知られるが、その関係資料が化学遺産第 061 号に認定された。これらの内容を知ることが、同博士の研究全般について異なる角度からの視点を提供するものと考えられる。

はじめに

1981 年に福井謙一博士 (写真 1) はアジアで初のノーベル化学賞を受賞された。これは R. Hoffmann 氏 (米国) との共同受賞である。ノーベル物理学賞については、ラマン散乱分光法の基礎を与えた C. Raman 氏 (インド) が 1930 年にアジアで初めて受賞されている。福井博士は高校時代



写真 1 福井謙一博士
(京都大学福井謙一記念研究センター所蔵)

(旧制大阪高等学校) には数学がとても好きな少年であったが、思うところがあって大学では表 1 の略年譜に示すように工学部化学系の学科に入られた。学部時代には化学の勉強に加えて、理学部物理学科の講義も聴講され、その図書室にも通って量子力学を独学で勉強された。そして工業化学科を 1941 年に卒業された。

1951 年に 32 歳で京都大学教授に就任され、その翌年の 1952 年にフロンティア軌道理論の第 1 報となる論文をアメリカの化学物理学の学術雑誌である *Journal of Chemical Physics* に発表された。この論文は当時まだ新

たなか・かずよし

京都大学名誉教授、京都大学福井謙一記念研究センター 研究員、同 元センター長

〔経歴〕1978 年京都大学大学院工学研究科博士課程修了。学部 4 年生から一貫して福井研究室に所属。日本学術振興会奨励研究員、米国エナジー・コンバージョン・デバイス社リサーチケミスト、京都大学工学部助手・助教授・教授を経て現在に至る。〔趣味〕1960 年代アメリカンポップス。



表 1 福井謙一博士略年譜

1918 年	奈良県に生まれる
1938 年	京都帝国大学工学部工業化学科入学
1941 年	同上卒業、同大学大学院進学ならびに陸軍燃料廠配属
1948 年	「化学工業装置の温度分布に関する理論的研究」で学位取得
1951 年	京都大学教授
1952 年	「フロンティア軌道理論」の第 1 報発表
1962 年	日本学士院賞 (恩賜賞) 受賞
1981 年	ノーベル化学賞受賞 (化学反応の理論的解明)
1982 年	京都大学停年退官、京都大学名誉教授
1998 年	逝去

しい学問であった量子化学を用いた理論的なものである。これに基づく多様な「化学反応の理論的解明」によって、ノーベル化学賞を 1981 年に受賞された。

認定化学遺産の内訳

今回化学遺産に認定された資料は表 2 に示したとおりである。これらのうちで、後述の写真 5 に示した機械式のタイガー計算機が京都大学大学文書館に所蔵されていることを除けば、すべてが京都大学福井謙一記念研究センターに所蔵され、一部は展示されている。なお、上記のタイガー計算機は現在京都大学の百周年時計台記念館の歴史展示室に展示されている。以下では遺産に認定された資料について、それらの持つ意義を含めた説明を行う。

表 2 認定化学遺産

1	卒業研究関連資料
2	博士学位論文
3	計算尺 (1 点) および計算機 (2 点)
4	化学式が書かれた黒板
5	研究関連メモ (書簡も入ると 858 点)
6	ノーベル賞メダル、ノーベル賞賞状 (レプリカ)

遺産内容の説明

写真2は1940~41年頃の学部3年生時代に行われた卒業研究の資料である。具体的には五塩化アンチモンとパラフィン系炭化水素の化学反応についてのもので、中段はその反応についての文献調査の結果や実験結果が記入されている。下段は福井博士が当時所属された喜多源逸研究室の雑誌会で用いられた幻燈用紙に書かれた研究内容の紹介で、おそらく当時の学部卒業生の卒業研究発表のためのものと考えられる。この研究は福井博士の有機化学における興味の始まりが炭化水素であったことを示すものである。

福井博士は学部卒業後大学院に進まれると同時に、当時の陸軍燃料廠（燃料研究所）との兼務の形をとられた。ここでは良質の航空燃料の開発が要求され、イソオクタン（2,2,4-トリメチルペンタン）のようにオクタン価の高いガソリンとなる炭化水素の合成研究をされた。この研究は成功したが、実際の工業的生産に入る前に終戦となった。1952年の発表に始まったフロンティア軌道理論でも、当初は芳香族炭化水素の反応性についての研究展開がなされた。

写真3は1948年に提出された博士学位論文で化学工学的な内容を持つものであり、化学反応を行わせる反応塔の温度分布を理論的に解析したものであった。

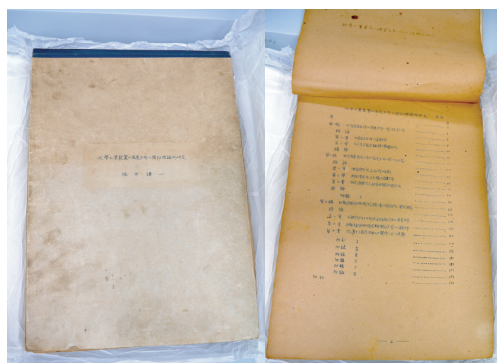


写真3 博士学位論文（表紙と目次）

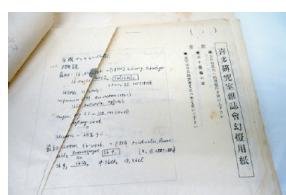
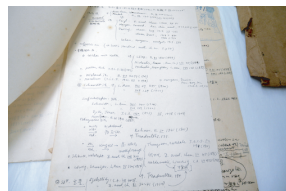


写真2 卒業研究関連資料

これは工学部化学系における初めての理論的な学位論文であった。この頃の紙は戦後すぐでもあったためにほとんど入手できない状態で、京大工学部の製紙専門の先生から頒けてもらわれたそうである。写真4は福井博士自身が使っておられた竹製のヘンミ計算尺で、昔ながらの計算ツールである。厳密な定量性には欠けるが、簡単に素早く計算できるために、福井博士は愛用しておられた。写真5はもう少し進歩した手回しの機械式のタイガー計算機で、1950年代の福井研究室のスタッフや大学院生によって用いられたものである。これらは言うなればフロンティア軌道理論の数値エビデンスを出すための、当時の裏方のような計算ツールであった。こういうツールのあと、1960年代に入ると徐々にコンピューター（メインフレーム）に移行していった。

写真6は現在の福井謙一記念研究センターの一室に残されている黒板で、福井博士がこのセンターの前身である財団法人基礎化学研究所の所長時代にスタッフと discussion をされるために、化学式や数式を1996年頃に書かれたものである。誤って消してしまわぬよう、現在ではプラスチックケースの中に収納されている。

写真7の研究メモの左側には走り書きに近い



写真4 ヘンミ計算尺（竹製）



写真5 計算機（機械式タイガー計算機）

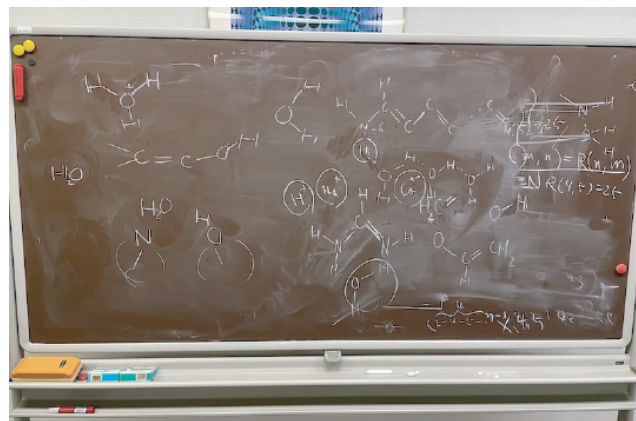


写真6 化学式が書かれた黒板

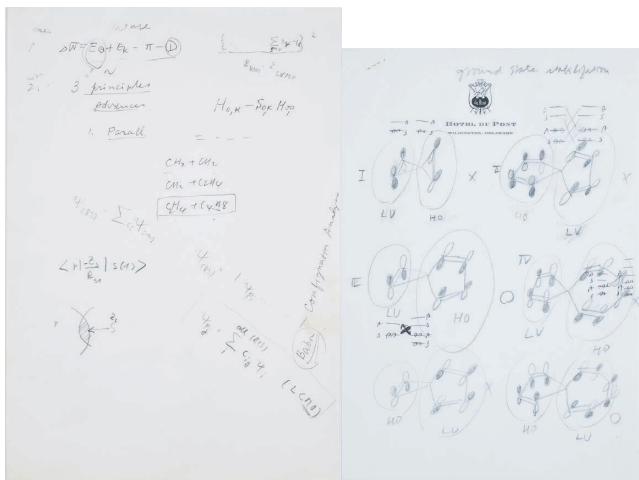


写真7 研究関連メモ

が、少し数式が書かれている。フロンティア軌道理論は、1952年の第1報ではどちらかと言えば直観的に導き出されたものであったのに対して、その後、量子力学の枠内の摂動理論という形式で、より論理的に導出することを目指した研究の端緒となるメモである。右側の分子軌道が描いてあるメモは、アメリカでの滞在ホテルのロゴ入りの便箋に書かれたもので、ビシクロ系分子の基底状態と励起状態のエネルギー安定性を考えたものである。福井博士はバイオ方面への造詣も深かったが、量子化学やフロンティア軌道理論を用いて発がん機構の解明を行ったがんの研究者でもあった。これはがんを含めたバイオ現象も化学、特に理論化学を用いて考えようとされたことによる。このアプローチは福井博士の興味深い一面を示すものである。

写真8の上段は発がんおよび制がん機構を考察する総説のメモであり、下段はDNA構造中の核酸塩基対、すなわちA-T、G-C対における水素原子の位置によって水素結合の安定性が変わること調べるための量子化学計算の準備メモで、1950年代後半から1960年代にかけてのものと思われる。

福井博士は1998年の正月明けにがん

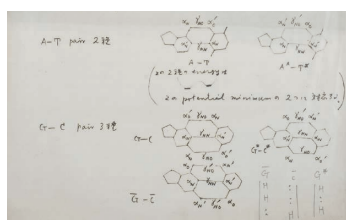
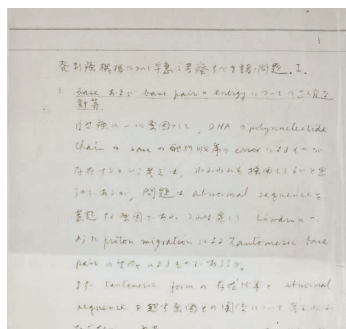


写真8 研究関連メモ

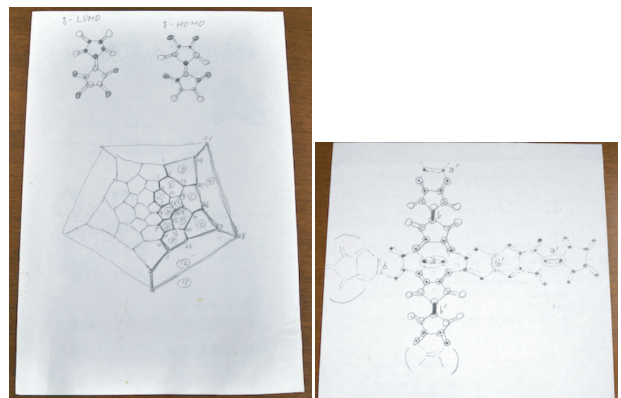


写真9 研究関連メモ（絶筆研究メモ）

性の病で逝去されるが、写真9は1997年秋に手術のために入院される前日の夜に描かれたフラーレン分子の軌道相互作用の研究メモである。フラーレン分子は3次元的であるため、便宜上このような展開図に軌道を描きこむことが多かった。これは絶筆研究メモと言える。なお上段のメモは、病院の看護婦さん募集のチラシの裏側に描かれている。写真7のホテルの便箋の利用もそうであったが、福井博士は身近にあったいろいろな紙、例えば、日めくりカレンダーの裏紙などにも研究メモを残されている。これはエコ的であるとも言えるが、思いついた研究上のアイデアを咄嗟にメモ書きするのに便利な方法を取られていたものだと思う。

おわりに

以上述べてきた関係資料のうちの研究関連メモ類については、京都大学総合博物館から京都大学研究資源アーカイブ：福井謙一研究資料、1936-1988（主年代1940-1982）として、<https://peek.rra.museum.kyoto-u.ac.jp/ark:/62587/ar128649.128649>において2023年4月19日から公開されている。併せてご覧いただければ幸いです。