

分子研シンポジウム2008

分子研シンポジウムが6月13日午後～14日午前に開催されました。このシンポジウムは14日午後のオープンキャンパスに連動させた企画で、昨年度からスタートし、本年度が2回目になります。お話をいただいた講師と講演題目は以下のとおりです（講演順に記載）。分子研OB、総研大OBを中心に4研究領域から推薦された7名の先生方です。

藤田 誠（東大・工 教授）

「自己組織化分子システム」

緑川 克美（理研 主任研究員）

「アト秒レーザーで探る原子・分子の超高速ダイナミクス」

稲辺 保（北大・理 教授）

「分子結晶の設計と機能開発」

谷口 弘三（埼大・理 准教授）

「超高压を用いた有機超伝導体の研究：新超伝導探索と発現機構の理解」

小松崎 民樹（北大・電子研 教授）

「1分子時系列情報から生体分子機能の複雑さを解読する」

Chaoyuan Zhu（台湾 National Chiao Tung University 教授）

「Semiclassical theory with applications for non-Born-Oppenheimer molecular dynamics」

高橋 保（北大・触媒セ 教授）

「新しい分野へのチャレンジ、炭素-炭素結合切断反応の開発」

参加者（参加登録された人数）は、所外53名、所内45名の計98名です。登録されなかった所内参加者もあったようで、一時はコンファレンスセンター小会議室がいっぱいになり、座れない方が十数名いました。所外からは学部生、大学院生、研究者、企業と幅広く参加していただきました。皆さんに総研大への進学や共同研究の提案・申請を促すことを意図して、それぞれの講演の最初に分子研との関わりを紹介していただきました。各講師の分子研や総研大への愛着を感じる話ばかりで、我々にとっても大いに励まされるものでした。13日夕方、所内外の学生、研究者の交流を深めるため懇親会を行いました。懇親会には所内の方の参加



が若干少なく、来年度は特に総研大生の積極的な参加を期待します。参加者の皆さんには分子科学の多様性ととともに、その基礎を支えている分子研の存在意義を感じ取っていただけたものと思います。お忙しい中をご協力いただいた講師の先生方にこの場をお借りして感謝申し上げます。

（藤井 浩 記）



分子研オープンキャンパス2008

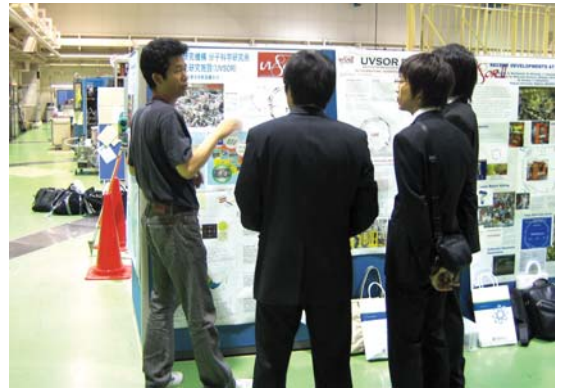
2008年6月14日(土)に分子研オープンキャンパスが分子科学研究所において開催された。本事業は全国の大学院生、学部学生および若手研究者を対象に、分子研で行なわれている研究内容を分かり易く解説することにより、共同研究の機会を拡大するとともに、総合研究大学院大学の物理科学研究科を担う教育機関であることについても、外部の方々に広く認識して頂くことを目的としている。本年度で18回目の開催となるが、広報室の発案でその名称が“オープンハウス”から“オープンキャンパス”へと変更された。また、例年前日から開催される分子研シンポジウムと連携して開催した。本年度は、オープンキャンパスでの申し込み総数は47名、キャンセルが2名で、北は北海道から南は鹿児島まで、学部学生15名、修士課程20名、博士課程4名、その他の方々6名の、総勢45名の参加となった。シンポジウム、オープンキャンパスの双方への参加者は28名であった。

当日は13:15より岡崎コンフェレンスセンター小会議室で説明会を行った。

受付では希望者に「分子科学者がいどむ12の謎」および、「爆発する光科学の世界」を各々6、4名に購入頂いた。分子研、総研大のパンフレット、および募集要項等を資料として配布し、中村所長、永瀬教授、田中教授から分子研、総研大、共同利用について丁寧な説明があった。その後、

明大寺、山手の両地区で14:00から18:00まで実験室を自由に見学して頂いた。写真撮影のため実験室を伺った際、各部屋では先生方がポスターや機器を前に熱心にご説明されていた。参加者は訪問した各グループで十分に時間をかけて、熱心に先生方のお話を聞いていた。また、対応した先生方からも、今年度の参加者は例年より熱心であったことを伺った。当日はシャトルバスの終了間際まで、所内を歩く参加学生さんの姿が見かけられた。

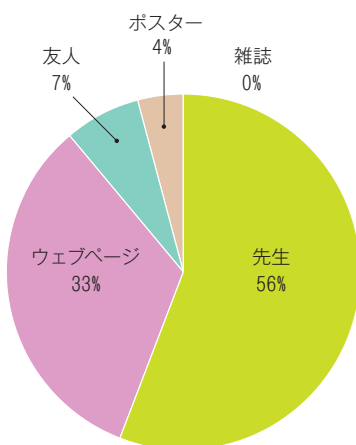
一方、アンケートは、説明会で提出を強くお願いしたが、回収率は51%に留まった。今回のアンケートでは情報の入手先、ポスターの印象等について



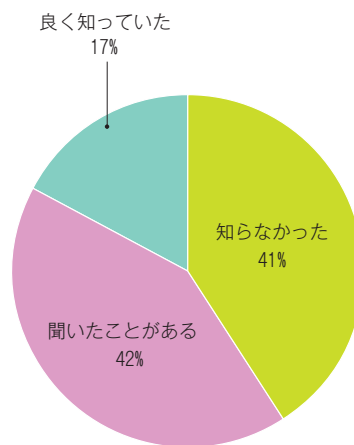
具体的な質問を行った。アンケート結果から、参加情報の入手先は、先生からの紹介、およびホームページが大きな割合を占め、残念ながらポスターは4%に留まった。また、ポスターに関して、その印象が参加に大きく左右するという返答は30%以下であり、所属の機関で過去に見たことがないという返答は73%を占めた。ポスターは目にする機会があれば一定の効果があると思われるが、その機会が十分でないことが伺えた。今回のアンケート結果は、学生さんの多くはインターネットを情報収集の手段としていることを表しており、名称の変更は効果があったのではないかとと思われる。また、自由コメント欄には、「先生方のお話が大変面白く、研究所の学生に不親切なイメージが払拭された。」「もっとこのような機会や、Web、ポスターなどを作成して知名度を高めてほしい。」など、これからの広報活動に有益なコメントを頂けた。

最後に今回のオープンハウスの開催にあたり、所内の皆様、各大学の先生方をはじめ、広報担当の原田美幸様、中村理枝様には大変にお世話になりました。この場を借りて、厚く御礼申し上げます。

(西村勝之 記)



オープンキャンパス開催情報入手先



総研大認知度

第7回所長招聘研究会「教育・研究環境のあるべき姿」

我が国が世界規模での資源・エネルギー・環境問題を抱えた現代社会の中で、科学技術創造立国として、これからも持続的に発展していくために、大学および大学共同利用機関が国際的に活躍できる人材を数多く育成し輩出するための大学院教育の改革が不可欠であるとの観点から、分子科学研究所では、毎年、日本学術会議化学委員会と日本化学会との共催で大学院教育戦略・国際化・学術動向・設備・科学政策について多角的統括的に討議する所長招聘研究会を行っている。平成20年度も、5月7日（水）13時から岡崎コンファレンスセンターで参加者70名で第7回所長招聘研究会「教育・研究環境のあるべき姿」が開催された。研究会は分子研所長・中村宏樹の挨拶と日本学術会議化学委員会委員長・岩澤康裕の趣旨説明の後、三つの課題に分けて、以下に示す講師が、それぞれの課題について講演を行った。

本年の研究会も講演後の活発な議論のため、最終的には予定時間から2時間の大幅な遅れを生じ、予定した自由討論の時間がなくなりました。本年の講演は、例年以上に優秀な若手人材獲得のための世界戦略の必要性が強く指摘された。おもな講演を取り上げると、

課題1で、野依良治氏は、米国、英国は国家戦略として多額の奨学金を出して海外からの優秀な留学生の世界的競争戦を行っているのに対して、科学技術創造立国を標榜する日本政府の高等教育への財政支援と国際的頭脳競争戦に関する国家戦力のなさを強く指摘された。大竹暁氏は「日本型研究室の問題点」、「補助金と委託費による競争的研究資金の相違の認識」、「公正な評価と研究者の実行責任」「科学コミュニティの社会に対する説明責任」等の問題点の解決による研究費の増額のための方法論に関して独自の意見を展開された。本田成親氏は、国際間での頭脳

獲得競争の成否が国家の存亡を左右する時代に突入しつつあることを、米国、英国、フランス、ドイツ、オーストラリア、シンガポール、中国の具体的な例を挙げて説明され、この問題に対する日本政府および大学の認識の低さに強い危機感を表明された。

課題2で、西 信之氏は、分子研が中心になって進めている「設備有効活用ネットワーク」の現状と出席者への支援を求める講演を行った。

課題3で、相澤益男氏は、イノベーション創出戦略、人材育成・獲得戦略、環境変動解決への国際的取り組み、持続的成長のための米国、EU、英国、中国、OECD諸国が採用している科学技術政策、第3期科学技術基本計画に沿って日本が取り組むべき財政改革、多様な人材の育成・確保・活躍促進のための方策、評価基準に関して説明された。岩瀬公一氏は「目標設定の明確化」に焦点を絞り、明確な目標設定に基づく

「課題1 大学院教育の属実化、戦略性、施策」

野依良治（理化学研究所理事長）「大学院教育の国際化にむけて」

大竹 暁（文部科学省研究振興局基礎基盤研究課長）「国際競争の中の日本——主として研究の側面から」

西本清一（京都大学教授）「グローバルリーダーシップ大学院工学教育の取り組み」

巽 和行（名古屋大学教授）「日独共同大学院プログラム——大学院教育国際化の取り組み」

本田成親（ジャーナリスト）「世界頭脳競争戦の現況とその戦略について」

「課題2 化学の学術動向と研究設備」

小池康博（慶応義塾大学教授）「フォトニクスポリマーの研究を展開するにあたって」

西 信之（分子科学研究所教授）「化学系研究設備有効活用ネットワークの現状について」

小倉克之（千葉大学名誉教授）「化学の研究展開と研究設備——千葉大学の現状を中心に」

「課題3 科学政策と評価」

相澤益男（総合科学技術会議議員）「科学技術政策のグローバル化」

岩瀬公一（文部科学省科学技術・学術政策局科学技術・学術総括官）「政策のねらいと評価」

北澤宏一（科学技術振興機構理事長）「科学技術研究環境の変化について」

有本建男（科学技術振興機構社会技術研究開発センター長）「グローバル・イノベーション・エコシステム」

【世話人】理化学研究所理事長 野依良治、分子科学研究所所長 中村宏樹、日本学術会議化学委員会委員長 岩澤康裕



「ロードマップの策定」、「競争的資金の制度設計と成果の具体的例示」、「自立の法人運営のための目標設定」について説明された。北澤宏一氏は、年間10兆円に達する日本の貿易黒字が20年以上継続しており、さらに日本企業が行ってきた積極的な海外投資で、年間20兆円の投資利益を生み出している日本経済の現状を説明された。その結果として国内での新産業創成と輸出増への意欲の減退によるGDP飽和現象、失業

問題（フリーター問題）、非正規雇用の増大等の「日本病」が蔓延しつつある危険性を強く指摘され、その克服のためのイノベーションの仕掛け作りの緊急性を強く指摘された。有本建男氏は、中国、インドの急激な経済成長を踏まえて、我が国の緊急の課題として国際的に通用する人材の確保、科学と技術の融合、Funding制度と大学改革、国際化を取り上げられた。さらに、大学の質と量の分布を踏まえた人材の確保

の観点からは、今後ますます中国、インドからの人材確保が重要になることを指摘された。

今回の研究会で、筆者は国際間での人材獲得競争での日本の国家戦略の構築と、北澤宏一氏が指摘された定常的な貿易黒字と投資利益がもたらしている「日本病」に対する緊急の対応策を打ち出すことの必要性を強く印象づけられました。

(田中晃二 記)

機構長裁量経費事業 若手研究者によるアジア新興国研究機関との研究交流促進 ——マレーシア科学大学との分子科学シンポジウム——

若手研究者育成を目的とした機構長裁量経費事業として、2008年2月5～6日の2日間に渡って、分子研若手研究者助教8名がマレーシア科学大学（University Sains Malaysia, USM）を訪問し、ジョイントセミナー、研究交流を行ったので、この場を借りて報告致します。

本事業は、分子研若手研究者が研究成果を国際的に積極的に発信していくと共に、アジア地域においては特に科学研究発展の先導的役割を担うこと、また新しい国際的な連携関係を築くこ

とを目的として行った。マレーシアはASEAN諸国の中でも近年急速に経済発展する国の一つである。マレーシア科学大学はマレーシアペナン島に位置し、マレー大学に次ぐ教育・研究水準を有する総合大学として知られる。今回、同大学生物学部のKumar博士がホストを務めて下さり、同大学化学学部とのジョイントセミナーが実現した。分子研側は、物質分子科学領域から十代健、西條純一、根岸雄一、石塚智也、生命・錯体分子科学領域から手老龍吾、岡崎統合バイオサイエンスセンターから吉岡資郎、分子スケールナノサイエンスセンターから田中啓文、東林修平、の8名の助教が参加し、USM側からは化学学部からWan学部長、Baharuddin 副学部長を含む教授陣と助教授、講師の若手スタッフ及び学生、生物学部からKumar講師が参加し、セミナーは全体で約30名程度



の規模であった。

セミナー1日目は、冒頭に東林から分子研についてスライドを用いた研究所紹介を行った後、分子研側から8名が、USM側から5名の教授陣が、各々の最新の研究成果について講演し、研究討論を行った。2日目には、数グループに分かれ、化学学部、生物学部の共通施設及び各研究室を回り、施設・設備見学を行うとともに、各研究グループの研究内容について説明を受け、研究討論を行った。マレーシアにおける分子研の知名度はそれほど高いと思われなかったため、セミナーの冒頭で分子研の歴史、位置付け、施設、研究水準、各種プロジェクト、及び総合研究大学について、スライドを用いた紹介を行ったことは、正解であったと思われる。日本の分子科学研究領域における分子研の占める地位について認識を深めることができた。講演については、





分子研側はいずれの講演も高水準の研究内容に聴衆からの反応も高く、質疑応答も活発に行われ、USMの若手研究者、学生も討論に加わった。USM側の講演は、若手によるセミナーという趣旨がうまく伝わっていなかったためか、講演者はいずれも教授陣によるものであった。

USMの研究内容は、政府による応用重視の政策もあって応用研究を中心としたものであり、講演者の研究分野が有機材料化学、無機触媒化学、環境化学、高分子化学と多岐にわたったことを差し引いても、分子研側の基礎研究を中心とした研究内容とはかなりのギャップが認められた。研究設備については、NMR、ガス／液体クロマトグラフィー、マススペクトロメトリーなど基本的な設備が共通設備として近年導入され、またSciFinder、主要なジャーナルなどの情報ソースも利用できることから、基本的な研究環境は現在では整っているように思われる。各々の研究室の設備については研究室間でかなりの差が認められ、日本の研究室と遜色のないグループから最低限の器具さえ揃っていないグループと様々であった。これは、応用研究を目的とした政府のグラントの各グループの獲得状況によるものである。マレーシア全体として外資系メーカーの工場進出は盛ん

で、ペナン島周辺も化学産業、電子機器産業を含む外資系メーカーの工場が多く見られる工業地域であった。しかしながら、これらは製品製造を目的としたものであり、マレーシア国内で研究開発を行える職は極めて限られるとの話であった。このため、化学系の大学／大学院を卒業しても相応の職がなく、化学系への進学意欲が低い、あるいは研究意欲が低い一因となっている。こういったことから、自国産業育成のため、政府の大学機関への研究費は、日本の感覚における応用研究以上に、実際の製品開発を目的としたものを奨励しており、研究内容も必然的にそれを目的としたものとなっている。しかしながら、基礎的な高等教育や基礎研究が欠如していることから、応用研究も表面的なものに留まっており、一部を除いて総じて教員の水準が決して高くない結果となっているように感じられた。近年の経済発展に伴い、研究費の配分、大学の研究設備の改善は徐々に進んでい

るものの、高等教育／基礎研究とそれを担う教育者／研究者の育成が追いついていない。これらの発展なくしては、応用研究、産業育成も容易ではないと強く感じられた。

このような大きな研究の質の違いから、今後の共同研究や研究交流は分子研とUSMの双方にとって相乗的な効果は薄いと考えられる。しかし、日本への留学とその後の共同研究により、高いモチベーションと研究水準を維持している研究室も一部に見られたことから、教育レベルからの交流は双方にとって大きなメリットが得られると考えられる。事実、今回のジョイントプログラムを通して、純粋に向学意欲の高い積極的な学生も見られた。

最後に、今回のジョイントセミナーを通じて、終始お付き合い頂き歓迎して下さったUSM化学学部Wan学部長、Baharuddin 副学部長、生物学部Kumar講師に、この場を借りて御礼申し上げます。今回のプログラムはKumar博士と田中博士の理化学研究所時代からの交流により実現したものです。

(東林修平 記)



機構長裁量経費事業

若手研究会「理論分子科学のフロンティアを探る」開催報告

機構長裁量経費の支援を受けて、平成20年1月15日から3日間にわたり「理論分子科学のフロンティアを探る」と題する若手研究会（於岡崎コンファレンスセンター）を開催した。10月末に経費を認めて頂き、平成20年度中に開催せよとのことであったので、広く参加者を募るのではなく、発起人（筆者に筑波大学の重田氏、横浜市立大学の淵上氏を加えた3名）が話し合っただけで選んだ気鋭の若手研究者に直接参加を要請した。その際に掲げた開催趣旨は以下の通りである。

“一昔前の理論分子科学は、電子状態理論と化学反応理論とを中心とする、量子力学という強固な基礎体系を基盤とした exact science のことを指していた。適度な複雑さを持つ分子を対象に様々な理論が生まれ、孤立分子のことはほぼ分かるという段階にまで進歩した頃、我々はこの世界に足を踏み入れた。このような境界条件のもと、小さな孤立分子を対象としているだけではダメだという認識が我々の意識に生じ、結果として我々の世代の理論分子科学者の活躍するフィールドは大きな広がりを見せている。生体・ナノ物質、溶液や表面などの環境を含む分子のサイエンスをその代表例として挙げることができよう。理論分子科学者がこのように様々なフィールドで活躍することは、それ自体、非常によいことである反面、上述のサイエンスは理論分子科学として全体をくくるより、諸学問分野における微視的アプローチとして規定する方が実情をよく反映するほど、理論分子科学者同士の交流は希薄になってしまったように思われる。自ずからそうなったのであるから、それはそれで特に問題はないの

かもしれない。しかしながら、様々な分野に散らばった学問基盤を共有する同士が一堂に会して議論を行うということも魅力的なことだと発起人は考えた。流行の分野には様々なセンスの人々が集まり視野を広げることができる一方、議論の深まりは必ずしも期待できないのに対し、共通の学問基盤を持つもの同士、丁々発止の議論ができたとしたら面白いのではないか。このような趣旨のもと、若手准教授、助教、ポスドクを中心とした実際に手を動かして研究をしている実働部隊の皆様にお集り頂き、通常の研究成果報告会とは異なるスタイルでの研究会を開催したい。研究会を通じて多様な研究分野の共通基盤としての分子科学を再認識し、フロンティアに横たわる問題意識を参加者で共有することが本研究会の目的である。”

若手研究者間の横の繋がりを新たに作ることも目的としてこれまで交流の無かった方々にも参加を要請したが、若手研究者間の交流が希薄であるとの認識に賛同を頂いたようで、講演者はすぐに決定した。ところで、筆者にとって研究会の主催は初めてのことであったが、分子研には優秀な秘書さんがいらっしゃるし、コンファレンスセンターもあるので、事務・会場業務に煩わされることなく研究会を開催することができた。これほど簡単に研究会を開けるのだから、（グループリーダーの理解あってのことですが）若手所員もどんどん各々の興味を赴くまま、楽しい研究会を開いてはどうだろうか。閑話休題。研究会では21件の発表があった（表1）。

当日は、所内からのオブザーバー参加（柳井毅准教授・吉田紀生助教・石村和也技術職員）があり、参加者総数

は24人であった。個々の発表の内容を意味のある形で要約することは、紙数・筆者の能力をとともに大きく超えている。そこでここでは、筆者個人が研究会から受けた印象を記すこととする。研究会の雰囲気が伝われば幸いである。

大規模計算とモデル化

孤立分子の性質を調べ上げる狭義の分子科学を超えて、本来の分子科学——溶液・表面など環境と相互作用する分子、もしくはタンパク質などの巨大分子の関与する現実系の分子科学——を理論的に押し進めて行くに当り、大規模計算が必要となるのは必然である。その意味で、大塚・中田両氏の大規模系へ向けた電子状態理論の開発は王道とも言うべきものである。大規模系電子状態理論が現在、理論分子科学の大きな潮流をなしていること自体が、この方向性の重要性を物語っていると言えよう。

一方で、研究会を通じて示されたもうひとつの考え方があった。それはつまり、いくら計算機の進歩が早いとは言っても、現実系を時間依存シュレーディンガー方程式に基づいてシミュレートできるようになるのは遙か先のことであり、それでも我々は孤立小分子の世界を超えて行かなくてはならないのだとすれば、現実系をうまくモデル化する手法の開発が重要だということである。ある意味保守的な考えだとも言えるが、早い計算機を作って全てをその中にいれてしまえば何でも分かるという世の中の風潮に対しては、強いアンチテーゼとなっている。墨氏の2成分密度汎関数法による液体水素の金属-非金属相転移の話などは洗練されたモデルのよい例であった。

部分と全体、量子と古典

系の振る舞いがある程度ローカルに決まっているとすれば、重要な部分とそうでない部分に、つまりシステムと環境に分けるのが素朴であると同時に自然であろう。実際に、日野・鷹野両氏はそれぞれ、適切な部分系を取ってきて高精度な電子状態計算を行うことで、創薬化学や生体反応のある側面がうまく記述できることを示した。石田(干)氏は液相反応に対して、溶質を量子力学的に、溶媒を古典統計力学的に扱う時間依存RISM-SCF法によって光励起後の溶媒とダイナミクスを議論した。筆者自身は、このような部分系の抽出の際に、一般的には部分系を開放系として扱う必要があることを説明し、表面吸着分子系でその効果が著しいことを示した。中村氏は同様なバルク物質と接続された分子という開放系でおこる電子移動の理論をレビューし、コヒーレント極限のLandauer理論とインコヒーレント極限のMarcus理論の間に位置する理論の不備を指摘した。

コヒーレンスをどの程度真面目に扱うべきかという問題は、大規模系の動力学シミュレーションにおいても現在広く議論されている。山田氏は原子核の自由度に対する量子古典混合シミュレーションのレビューに加え、量子力学的自由度と古典力学的自由度が相互作用するとみる氏の取り組みについて述べた。長い歴史を持つアプローチとして、古典力学の側から量子性をいれていく半古典論がある。重田氏は新しい拡張された古典力学によって、中山氏は古典軌道の特殊なアンサンブルをとることで、古典力学+ α の手間で量子揺らぎを考慮したシミュレーションが実行可能であることを示した。コヒーレント・インコヒーレント両極限の間に、一般性のある、セミコヒーレ

ントとでも呼ばれるべき階層は存在しているだろうか。存在したとして、古典軌道間の干渉を自然な形で適度な計算量で記述する理論の構築は可能だろうか。電子・核自由度の連関の問題もある。大規模系のダイナミクスの理論には今なお多くの解決すべき問題があると感じられた。

分子科学のシニフィエ

佐甲氏は、量子ドットの研究で盛んに論じられる閉じ込められた電子系の多体波動関数を、分子振動で氏が議論に用いてきたローカルモード描像を適用して鮮やかに解析してみせた。このように、狭義の分子科学から一歩足を踏み出した分野で物事を考えるとき、まず我々は、その分野で用いられる概念・用語を分子科学的な概念に置き換えてみることから始めるであろう。例えば、蛋白質のフォールディングの問題を物理学者はある種の相転移とみなすが、分子科学者は巨大分子の異性化反応と捉え、ノーマルモードやIRCといった概念の適用を試みたいと考える。淵上氏は、蛋白質の動力学シミュレーションで“観測”される運動と低振動数のノーマルモードがよく対応することを指摘した。蛋白質の全反応経路を探索することは難しいが、前田氏はそれを近い将来可能にし得るであろう強力な反応経路探索手法について話した。宮下氏の示したアルツハイマー病感染の初期過程を、これらの概念から解析することも興味深いであろう。アルツハイマー病の感染を司る遷移状態とはこのようなものです、と提示することができれば、分子科学の意義を一般に知らしめることができるかもしれない。直接(一分子計測でない)通常の実験との対応を考えると、トラジェクトリーのアンサンブルに基づいた議論を

行うべきである。石田(豊)・河津両氏は、トラジェクトリー・アンサンブルからの自由エネルギー曲面の構成法について述べた。現状では、自由エネルギー曲面を描く座標を事前に仮定しなくてはならない点が、筆者には不満であった。この恣意性を除いた自然な反応座標を定義するために、一般化されたIRC(蛋白質のIRCは分岐を繰り返す、そのままでは適切な反応座標とはなり得ない)や、寺本氏の示した位相空間での反応チューブが利用できればと思う。また、熱的ダイナミクスの直感的な理解のためにはアンサンブルを代表するトラジェクトリーが分かるとよいと感じた。高橋氏が示したように、量子論は古典軌道の特殊なアンサンブルから生成されると見ることもできる。だとすれば、量子論に古典的極限・半古典論があるように、熱的アンサンブルが少数の有効トラジェクトリーに帰着することがあってもいいかもしれない。筆者の妄想はともかくも、ノーマルモード、ローカルモード、反応座標、大振幅運動、分子内振動エネルギー再分配といった概念の総体からイメージされる、我々が“分子振動”というシニフィアンで語るところのシニフィエに基づいた直感が、蛋白質を語る新しい概念を生み出す可能性は大いにあると感じた。その他の分野への参入の際にも、分子科学のシニフィエは我々に力を与えてくれるであろう。

分子科学のテクニク

分子科学は物理と化学の境界領域に生まれた“元祖”学際分野であり、化学の問題への物理的手法の導入にその特徴があった。ところが近年では、理論分子科学において開発、洗練された電子状態理論の他分野への適用が一つの流れとなっている。袖山氏による

transcorrelated法の固体バンド計算への適用もその流れの中に位置づけられ、今後の発展が期待される。保木氏は、氏がレーザーによる分子制御の研究に従来より用いてきた最適制御理論のコンピューター将棋への応用（氏のプログラム“ボナンザ”は渡辺竜王との対戦でも有名）について話した。懇親会でのディスカッション(?)では、棋譜の評価法が平均場的であるとの指摘がなされ、多体相関を入れるためにcoupled-clusterにしる、励起演算子をexponentialの肩に載せろなどと、実にいい加減なアドバイスも飛び交い大いに盛り上がった。

研究会を終えて

これまで若手同士で集まると、ロラン・バルトが大都市東京の中心にある皇居を指して「その中心は空虚である」と言ったことをもじって、もともと物理と化学の境界に成立した分子科学には堅固な実体などなく、その中心は空虚なのではないかと穿ってしまうのが常であった。しかしながら今回、参加者各々が様々な分野に出て分子科学の視点を持ちながら活躍する姿を見ると、縁辺である山手線界隈が盛り場となっているそのとき、中心は確かに存在するのだと実感することができた。新しい物質が合成できればそれでよしとされる化学の世界で、ことさら分子科学

は現象の理解や概念の抽出にこだわってきた。21世紀の新しい物質科学、生命科学を理解する明確な概念を生み出すのは我々をおいて他にあるまい。研究会を通じて、このような大それたことを考えた。それだけの熱気が研究会にはあったのである。理論分子科学という枠組みで集まる意義があるのかどうかを見極めることも研究会の目的の一つであったが、その意義はあったと自信を持って結論する。最後に、このような格別なテーマのない実験的な集會に、機構長裁量経費からのサポートを頂けたことを改めて感謝して、報告を終えることとする。

(安池智一 記)

表1

※発表順

大塚 勇起 (分子研)	Configuration State Function を用いたプロジェクトモンテカルロ法
中田 真秀 (理 研)	二次の密度行列の変分法に関する研究：最近の進展より
佐甲 徳栄 (日 大)	擬1次元人工原子のエネルギー準位構造と多体波動関数
中村 恒夫 (東 大)	分子科学はナノサイエンスに有効なツールとなり得るか？ ——ナノスケールでの電子移動の考察——
安池 智一 (分子研)	表面吸着分子の局所電子状態：開放系量子力学に基づく分子科学
袖山慶太郎 (東 大)	平面波基底を用いたトランスコリレイティッド法による固体の第一原理計算
日野 理 (アドバンスソフト)	インシリコ創薬化学と電子相関理論
山田 篤志 (分子研)	凝縮系の量子シミュレーション——量子古典混合系近似による手法——
前田 理 (東北大)	超球面探索法による非調和下方歪み追跡：巨大系の反応経路解析と単分子反応ダイナミクス解析へ向けて
保木 邦仁 (東北大)	最適制御理論 —— 化学反応からゲームまで ——
石田 干城 (分子研)	Theoretical Investigation of Time-Dependent Phenomena in Solution : Pursuing Environmental Change around Solute Molecule and Polarization Effect
寺本 央 (北 大)	力学系としての分子ダイナミクスの普遍的側面の理解に向けて
石田 豊和 (産総研)	複合モデリングによる糖タンパク質 - 糖鎖複合体の解析
鷹野 優 (阪 大)	金属タンパク質の活性中心の電子構造
河津 励 (京 大)	古典動力学シミュレーションを用いた自由エネルギー差の計算
宮下 尚之 (理 研)	神経変性疾患のメカニズムに対する理論生物化学からのアプローチ
淵上壮太郎 (横浜市大)	タンパク質立体構造変化における経路の揺らぎと動的機構：タンパク質という分子の理解に向けて
高橋 聡 (東 大)	カオスの半古典エネルギー量子化
中山 哲 (北 大)	凝縮系における原子核の量子シミュレーション
墨 智成 (豊橋技科大)	高密度流体水素の金属——プラズマクロスオーバーおよび金属-非金属転移
重田 育照 (筑波大)	準量子キュミュラント分子動力学法

分子科学コミュニティの声

分子研では平成17年度より系・施設の在り方等検討委員会を設置し、分子研の今後の進むべき方向とその受け皿となる研究体制を探っているが（分子研レポート2005, p.340、2006, p.286;分子研レターズ53号(2006.3) p.14、57号(2008.5) p.14.参照）、平成19年度は大学共同利用機関としての在り方について検討した。検討結果を要約すると以下のようになる。

(A) 組織として国際的に分子科学研究を先導していくのはもちろんのこと、個人レベルでも真に独創的な研究を生み出すための特徴ある方策を打ち出していくこと。

(B) 分子研の研究成果を大学等に還元していくとともに、特徴ある研究設備を精査して組織的に整備し共同研究に供していくこと。

(分子研の特徴) 活発な人事流動を通して所内と所外が入れ替わる、つまり(A)と(B)は密接に関係していること。

詳細は分子研レポート2007, p.321~324にまとめ、公開しているが、それに対して、昨年末までに、コミュニティを代表している運営会議メンバーにそれぞれ意見をお願いし、さらに、共同研究者、分子研OBの一部からも意見をいただいた。以下はそのまとめである(順不同)。これらを参考に所内でさらに検討を進める予定である。

【運営会議メンバーからの意見】

・分子研に最も期待するのは大学から若い人材を採用してもらって成長したところで大学に戻してもらうことで

ある。研究レベルや国際化などは大学とあまりかわらない。

・大学と分子研の差がないという意見はごく一部の大学であって、研究をやるうにも何もできない大学が沢山あるので、そのような大学にとって分子研の共同利用や人事採用は不可欠である。

・教育は大学に任せてもらって、分子研は先端的研究に専念すべきである。
・准教授の人事流動と同じように、教授についても若い人材を大抜擢して、成果が出れば大学に戻すことをもっと考えてはどうか。

・創設当時に比べて分子研の予算も激減しているようであるが、やはり所長が頑張っって大きな予算を獲得して、分子研は大学よりはるかに優れた研究環境にしてもらうことが重要。

・リスクのある研究でもやれる環境、短期的な成果を求めない姿勢はすばらしいので、もっと所外に宣伝したらどうか。日本で女性研究者が育ちにくいのは分子研のような研究環境が大学に少ないからなのかも知れない。

【共同研究者、分子研OBからの意見】

・准教授、助教に関する人事制度や研究支援はきわめてうまくいっており、このままでよい。(共同研究者、分子研OB)

・分子研は分子科学の専門家集団としてシャープなピークを作っており、その点では他の機関の比ではない。高い研究水準(数ではなく、質)を維持することが分子研の生命線。(共同研究者、分子研OB)

・分子科学の分野の指針となるべき基礎的かつ重要な分子研の研究成果を、

論文ばかりでなく学会や大学での講演などで発信してもらうことが重要。そうすれば自ずと研究所に人が集まり、共同研究も活発になるはず。(共同研究者)

・分子研の存在感がかなり減少している。教授は分子研の顔であり屋台骨でもあるので、それぞれの分野で高い質の研究をもって存在感を示すことが望まれる。そのためには、学問世界でその存在感を与えるリーダー的活動もやりやすくするように、とりわけ業績の高い教授層に対する人的サポート等の施策を考えて、研究所の存在感を増すための努力を払うことが喫緊に必要ではないか。たとえ教授ポスト数を減らすことになったとしても、各教授には助教2、ポスドク1を配分すべき。設立当時の分子研の教授グループは実質的にそのような体制だったはず。(分子研OB複数名)

・長期的ビジョンについてはあまり気張らないで自然な方がよい。建前論が先行すると却って自由な発想を阻害する。分子研の究極の存在意義は、基礎的な分子科学分野で優れた研究者のインキュベーターであることにある。物理と化学の境界領域をコアとして分子を理解するという立場は、生物関連にまで対象が広がった現在でも変わらない。この分子科学を志すものにポジションを与えて自由に研究させることこそ重要。(分子研OB)

・分子科学の対象が広がって来た現在、「分子を扱っていれば分子科学」「分子を扱っているので私も実はナノテク研究者」というような安易な基準で人事を進めないで欲しい。分子研では、異分野の人を採って研究対象を広げる

のではなく、分子のことを一番真剣に研究している分子科学者自身が研究対象を広げることが重要。(分子研OB)

・ 機器センター復活は大学との連携を考える意味で重要で適切である。その意味でも中型・小型機器の更新が不可欠と思うのでがんばってほしい。(共同研究者、分子研OB)

・ 国内の大学で設備が乏しくなっている事を補うための共同研究よりも日本の化学が国際的にピークを出すための共同研究を分子研が中心になって推進することの方が遙かに重要であろう。(分子研OB)

・ 共同利用研究を計画する際、有効に成果を出さなければならないとか、

面識のない方に迷惑をかけないようにしないといけなとか、短時間で実験をやらなければならないとかあって、どうしてもありきたりのテーマになってしまいがちである。リスクがあっても是非チャレンジしたいというような環境整備を望む。(共同研究者)

・ 所内でほとんど人に会わないし、すれ違っても誰も挨拶しない。夜は節電対策で廊下が暗く人の顔さえ見えず恐怖感を覚える。このような環境(明大寺地区だけ?)は大学では絶対にありえない。研究所の若い学生たちが親しみを感じるような、元気の出る雰囲気作りが大切ではないか。(共同研究者複数名)

・ 殺風景で閉塞感のあるような印象とか、研究会が優先されてロτζが取れずホテル滞在にならざるを得ないとか、ロτζが取れても値上げで高くなったとか、があつて研究室の学生は分子研に対しあまり好感を持っておらず、共同研究の際に付いてもきてくれなくなった。昔、夜も煌々としていてお互い見知らぬ共同研究者・院生・所内研究者であつても顔を合わせているうちに仲良くなるようなアットホームな雰囲気が懐かしい。(共同研究者複数名)

(小杉信博 記)

分子研広報活動の新たな取り組み

「アカウントビリティ」という言葉が喧伝される昨今、研究者コミュニティばかりでなく、老若男女を問わず広く一般の方々に、分子研の研究活動や役割を分かり易く伝えることの重要性が益々増加している。このような広報活動を進める組織として、分子研には広報室が設置されている。現時点のメンバー構成は、広報室長ならびに副室長として研究教員2名、技術職員1名、技術補佐員1名である。広報室では、この数年来、広報活動のより一層の充実を目指して、以下のような様々な改革を進めている。

- (1) 分子研ホームページの改善と全面改訂
- (2) Annual Review 誌の全面改訂
- (3) プレスリリースの支援と強化

(4) 分子科学フォーラムの充実

ここでは、各項目に関して簡単に紹介したい。

(1) 分子研ホームページの改善と全面改訂

現在のホームページは平成17年に作成して以来、「トピックス欄」の増設、バナーの設置など誌面を魅力あるものにするための様々な改訂を行ってきたが、依然、いくつかの問題が存在していた。そのひとつは「トピックス欄」の更新頻度が低く、新鮮な情報を供給できていなかったこと、さらに、専門外の読者には内容が難しすぎることであった。この問題を解決するため、各研究領域から積極的に原稿を投稿するよう依頼し、また、原稿内容は広報室

担当教員がチェックして執筆者に改訂を求めるようにした。この改善により、少なくとも毎月ひとつは新たな「トピックス」が追加されるようになり、ホットな研究成果を平易に紹介する記事が掲載されるようになった。もうひとつの問題は、分子研共同利用業務との連携が不十分だったことである。すなわち、分子研ホームページにアクセスした研究者が共同利用申請に至るまでの「流れ」が「見えにくい」という問題が指摘されていた。この問題を解決するために、共同利用研究のページに「利用の手引き」や「機器一覧」等を追加するなど大幅な改訂を行なった。また、「4年目広報Womanが綴る分子研ウォッチング」という欄も、試験的に開設している。これは、分子研内



図1 分子研ホームページトップページ原案

の人々や日々の活動を技術職員がブログ形式で紹介するもので、一般の方々の「分子研って、いったいどんなところなの？」という疑問に少しでもお答えできることを期待している。お時間がありましたら、是非、トップページ <http://www.ims.ac.jp/indexj.html> 内のバナーから、お立ち寄り下さい。

以上のように、広報室では様々な改善を行ってきたが、依然「継ぎはぎ」

的な感を否めず、他の先進的な大学や研究機関に匹敵する「親しみ易い」ホームページにするためには全面的な改訂が必要であるという認識に至った。このため、「ホームページ改訂ワーキンググループ」を発足させ、所内の若い研究者の協力を得て、全面改訂の作業を進めている。動画なども効果的に利用することにより、より親しみ易いホームページとなるよう企画が練られている。この改訂では、研究面でのアクティビティーはもとより、共同利用研としての意義と具体的な利用の仕方、総研大を含む教育面での貢献等について、「誰が見ても直ぐ分かる」画面となることを最重要視している。図1に、トップページの原案を示す。今秋リリース予定であるので、「乞うご期待」である。

(2) Annual Review 誌の全面改訂
Annual Review 誌は分子科学研究所の研究活動を外国に発信するための

唯一の年間レビュー誌として重要な役割を果たしてきた。しかしながら、これまで Annual Review は論文要旨を単に寄せ集めたような体裁になっていて、分量が多いにも関わらず内容に統一感がなく、読みにくいという声が出ていた。このことは単に外国の研究者に分子研の存在を知らしめる点においてマイナスであるだけではなく、特に、外国からの留学生を引きつけるという意味においては致命的な欠陥であるという認識に至った。このため、昨年度 Annual Review 誌の全面改訂 (図2) を行ない、ご覧の通りの、しゃれた体裁のブックレットに一新した。内容としては、各研究グループの1年間の研究業績を、図などを含めてトピックス的に見開き2ページに分かり易くまとめている。また、研究者や研究スタッフの写真を載せ、全てのページをカラー刷りとして親しみ易い紙面を目指した。

(3) プレスリリースの支援と強化
新聞、テレビなど報道機関を通じて「できるだけ分かり易い形で」研究成果を社会に発信していくことを目指して、プレスリリースを支援・奨励する

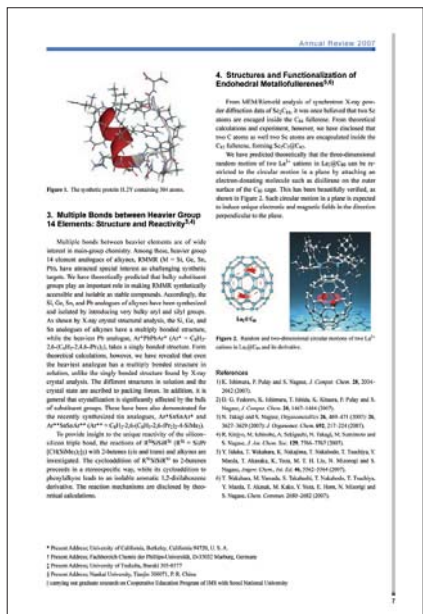


図2 Annual Review 誌

ための体制整備に取り組んでいる。こちらから積極的に情報を発信するという見地から、岡崎市役所内にある市の記者クラブに研究者が向かい、新聞・テレビ各社の記者を前にプレスリリースを行なうこととした。その際、カラフルな模式図などを多用して平易に研究成果を説明したリーフレットを配布している(図3)。この新規体制に移行した昨年末より、これまでに既に4件のプレスリリースを行なっている。幸いなことに、その全てについて新聞に紹介記事が掲載された。プレスリリースを行なった研究者の方々も、発表の準備や記者との質疑応答を通して、自身の研究内容を一般の方々に分かりやすく伝えることの重要性や楽しさ、さらに難しさを実感されたようである。このような体験が、以後の研究の進展と深化に少なからぬ貢献を与えることは確実といえる。このように、「アカウントビリティ」を外的な圧力としてではなく、他者との双方向的なコミュニケーションを通じての自己啓発として位置づけることが極めて重要だと考える。所内研究者のより一層積極的な参画が期待される。

(4) 分子科学フォーラムの充実

分子科学フォーラムは、分子科学の内容を他の分野の方々や一般市民に紹介し、また、分子研の研究者がより広範な科学の内容に触れて自身の研究展開に資することを目的として、1996年より実施されている講演会である。共催機関として豊田理化学研究所のご協力を得ており、毎年6回開催されてきている。所内のコロキウム委員(研究教員2名)がこれまで運営を担当してきたが、少数で対応せざるを得ないことから、講演内容や開催時期の選択という面で、効果的な運営が困難となる場合が増えてきた。そこで、本年度からは、一般市民の方々から科学の面白さ・楽しさを広く知っていただく「市民一般公開講座」として位置づけ直し、広報室を中心とした広報委員会が運営する体制に改訂することとした。

その第一弾は、特別企画として5月21日にサントリー水科学研究所の樋口直樹所長およびチーフブレンダーの興水精一氏をお迎えし、「水とアルコールと人生」という総合タイトルのもとに、それぞれ50分程度の講演をして頂いた。講演前のコーヒータイ

ムでは、所内の有志によるジャズ演奏をBGMに、サントリーからご提供頂いたウイスキーの試飲会も開催された。岡崎コンファレンスセンターの中会議室が多数の参加者で埋め尽くされ、グラスを片手にアルコールと人生について賑やかな歓談が行なわれていた。その後の講演は20時過ぎまで続いたにも関わらず、退席者が殆どなく皆が熱心に聞き入っておられた。講演には活発な質疑・応答が繰り返され、最後には質問を打ち切らざるを得ないほどであった。全体として200名を超える参加者があり、特に、今までのフォーラムでは殆どお見掛けしなかった中高年の女性の方々が多数いらしたことは、企画者側としては嬉しい限りであった。

引き続き第二弾として、6月11日に「カーボンナノチューブの世界によるこそ」という題目で、東北大学大学院理学研究科の齋藤理一郎教授にご講演頂いた。こちらの方も200名近い参加者があり、特に、高校生の皆さんが多数出席されていた。今後も、社会人の方や中高校生などとターゲットを明確にして、広報委員会で広く検討して企画を練り上げたいと考えている。

2007年12月21日
 2007年12月21日 午前11時
 2007年12月21日 午後1時
 岡崎市民会館 記者クラブ

「分子の火花」を用いて超高速度で回造する水素の可視化に成功

自然科学研究機構 分子科学研究所(所長 中村 道隆)と科学技術振興機構(JST)、豊田 理化学研究所(所長 樋口 直樹)は、超高速レーザーを用いた超高速度で回造する水素の可視化に成功した。これは、分子科学の発展に大きく貢献する研究成果である。この成果は、2007年12月21日(土)の夜、岡崎市民会館の記者クラブで発表された。

自然界には、水素分子は特定の場所に留まり続けるのではなく、分子の中を大きく動き回ることが知られている。今回、超高速レーザーを用いて「分子の火花」を利用して、分子の超高速度の動きを捉え、分子内で水素分子の位置を捉えることに成功した。その結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

分子内で水素分子の動きは、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。今回の研究成果は、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。今回の研究成果は、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。今回の研究成果は、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。

本研究成果は、平成19年12月31日(水)まで有効(Physical Review Letters)に掲載される。オンライン版で公開される。

ポイント

- 分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。
- 水素分子は、分子内で10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。
- これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。

研究の背景

自然界には、水素分子は特定の場所に留まり続けるのではなく、分子の中を大きく動き回ることが知られている。今回、超高速レーザーを用いて「分子の火花」を利用して、分子の超高速度の動きを捉え、分子内で水素分子の位置を捉えることに成功した。その結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

研究成果

超高速レーザーでは、100億分の1秒以下の極めて短い時間、非常に高速度でレーザー光(スパーク)として照射することによって、分子の中で水素分子の動きを捉えることができた。この結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

2007年12月21日
 2007年12月21日 午前11時
 2007年12月21日 午後1時
 岡崎市民会館 記者クラブ

「分子の火花」を用いて超高速度で回造する水素の可視化に成功

自然科学研究機構 分子科学研究所(所長 中村 道隆)と科学技術振興機構(JST)、豊田 理化学研究所(所長 樋口 直樹)は、超高速レーザーを用いた超高速度で回造する水素の可視化に成功した。これは、分子科学の発展に大きく貢献する研究成果である。この成果は、2007年12月21日(土)の夜、岡崎市民会館の記者クラブで発表された。

自然界には、水素分子は特定の場所に留まり続けるのではなく、分子の中を大きく動き回ることが知られている。今回、超高速レーザーを用いて「分子の火花」を利用して、分子の超高速度の動きを捉え、分子内で水素分子の位置を捉えることに成功した。その結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

分子内で水素分子の動きは、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。今回の研究成果は、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。今回の研究成果は、物質の物理的性質を決定する重要な役割を果たしている。

本研究成果は、平成19年12月31日(水)まで有効(Physical Review Letters)に掲載される。オンライン版で公開される。

ポイント

- 分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。
- 水素分子は、分子内で10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。
- これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。

研究の背景

自然界には、水素分子は特定の場所に留まり続けるのではなく、分子の中を大きく動き回ることが知られている。今回、超高速レーザーを用いて「分子の火花」を利用して、分子の超高速度の動きを捉え、分子内で水素分子の位置を捉えることに成功した。その結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

研究成果

超高速レーザーでは、100億分の1秒以下の極めて短い時間、非常に高速度でレーザー光(スパーク)として照射することによって、分子の中で水素分子の動きを捉えることができた。この結果、10億分の1秒程度の極めて短い時間で、水素分子がレーザー光の位置から四方八方に散らばる様子、その散らばり具合を捉えることが明らかになった。これは、分子内で水素分子の動きが分子の振動の変化と同期していることが明らかになった。世界で初めての研究成果である。

図3 プレスリリース リーフレット

以上、簡単にご説明した4項目以外にも、紹介ビデオの作成や研究所見学対応の強化など、充実した広報を目指した活動を行なっている。このような活動を進めていく上では、所内の研究者ばかりでなく、研究所OB・OGや、分子科学コミュニティの皆様のご協力が不可欠である。忌憚の無いご意見や様々なアイデアを、分子研広報室まで是非お寄せ下さい。

(記 平田文男(広報室室長)、大島康裕(広報室副室長))