



## 外から見た分子科学研究所



### 渡辺 芳人

(名古屋大学 副総長)

わたなべ・よしひと / 1975年東北大学理学部化学科卒。筑波大学化学系博士課程、Michigan大学化学科博士研究員、Princeton大学化学科上級研究員を経て、慶応大学医学部助手、通産省工業技術院化学技術研究所主任研究員、京都大学工学部助教授。

1994年10月に分子科学研究所教授、2002年4月より名古屋大学大学院理学研究科教授、2006年11月同物質科学国際研究センター教授、2009年4月より名古屋大学副総長(研究・国際企画関係担当)

### はじめに

僕の研究分野が生物無機化学ということもあり、名古屋大学に移動して以降、学会などで分子研の皆さんにお会いする機会はほとんど無くなった。もちろん、田中晃二先生や青野重利先生は無機・錯体化学、生物無機化学がホームグラウンドなので例外的にしょっちゅうお会いする。その他には、時折、名誉教授の北川禎三先生と顔を合わせることがあるが、海外の学会で会う回数の方が多いかも知れない。昨年、大森賢治先生に「量子のさざ波」というタイトルのご講演を、名古屋大学化学G-COEセミナーでお願いしたが、久しぶりに分子研らしいお話を伺うことが出来たような気がする。

### 分子研の存在感

名古屋大学の理学研究科・物質理学専攻(化学系)には、分子研出身者が大勢いる。現役教授では、私以外に篠原久典先生、阿波賀邦夫先生、田中健太郎先生、OBでは大峯巖先生、一昨年亡くなられた関一彦先生である。そういう意味で、我々の学科における分子研の存在感は、相当なものである。当然、彼らの研究室の学生にとって分子研は非常に近い存在となっているが、これは、名古屋大学が特殊な環境にあるだけで、一般の大学では、分子研そのものを知らないという大学院生がほとんどであろう。たとえば名古屋大学でも、

工学部系化学の学生がそれ程分子研や総研大を認識しているかということ、答えはNOである。また、流動教員制度がなくなったことで、多くの大学の化学系教員にとっても、分子研は物理化学系の研究所という以上の認識は無いのではなかろうか。

分子研が出来た当時は、「助手の人でも、希望すれば一億円程度の大型装置がかなり自由に購入できた」と何人もの先生から体験談として聞いている。しかし、法人化に加えて、昨今の経済状況の悪さによって、分子研の中型・大型の測定装置なども更新が難しくなってきた。昨年の補正予算でやっと一息ついたのではあるまいか。事情は大学も同じ事であるが、最新の装置が分子研には揃っているという状況が崩れてくると、分子研自体の位置づけが再検討される時期が来るのではないかと思われる。

### 分子研の役割

そもそも、分子研の今日的な役割とは何であろうか? 日本に数台しかない時間や空間などに対して最高分解能の測定装置やレーザー関連装置、高真空装置などを特権的に導入していた時代は、分子科学の総本山として物理化学以外にも錯体化学、有機化学、生化学分野の大学関係者が「分子研詣で」によって、自前では出来ない測定などを行っていた。そこには分子研に行けば

何とかするという状況があり、測定機器等の共同利用が盛んに行われていた。もちろん、現在でも共同利用や共同研究などは行われているが、利用者が限られた分野に集中しており、広い意味での「化学者のための分子研」という機能を果たしているとは言い難い状況である。私は、Scienceそのもので分子研の存在をアピールする必要がこれまで以上に求められるようになっていくと考える。残念ながら、分子研を離れておおよそ10年、分子科学の外で仕事をしている僕の耳に分子研の活発な活動が余り見えてこない。という事は、一般の化学者コミュニティの中では、それ以上に分子研の存在感が薄いということになる。

ここでScienceという言葉を使ったが、この点については、二つの側面から考えたい。一つは、分子研の研究者個人の研究活動である。この点については、世界中の研究者による分子研の個々の研究者に対する評価が高いことは言うまでもないし、様々な指標でも高い評価が出ていると思う。もう一つの側面は、研究所という組織、あるいは総研大の専攻としての活動である。喩えとして、21世紀COE、グローバルCOEやWPIなどを挙げれば良いであろうか。これらは、組織としての教育・研究活動が重要であるが、分子研がそれらに採用されていないことはOBとしては、残念なことである。COE等

は、採用された国内の各々の拠点が相互に意識しながら、大学院生、ポスドク、さらに若手助教が研究者として成長するように様々な支援プログラムを提供している。本来、COEであるべき分子研が、こうしたプログラムをどう位置づけているのであろうか？ 海外から研究者を中・長期に招聘する予算を持ち、ポスドクの人件費も手当てされている分子研だからこそ出来る、「グローバルCOEかくあるべき」という活動が見たかった。

新政権になって、政府の学術研究、高等教育の位置づけが不鮮明になっている。首相は、それらは非常に重要だと言いながら、一方で「仕分け」という別働隊が、活動の中味や実績評価とは無関係に予算をバツバツと切り捨てていく。これも政府の方針である。一方で、おいしい約束をしながら、「そうしたいけど、『仕分け』で指摘されているので……」と、あたかも自分とは関係ないところで反対が出ているので、なかなか学術予算が確保できないかのような責任を転嫁する態度である。こうした状況では、WPI等の施策は消えてしまうかも知れない。そういう意味でも、日本の学術研究を飛び抜けて牽引する研究機関としての分子研の役割は、益々重要になってくる。自分の研究が素晴らしいことで満足することなく、組織としての分子研の存在感を是非示して欲しい。

## 分子研の社会的役割

研究以外で分子研が化学者コミュニティで果たしてきた重要な役割の一つに、「学術基盤」に関する約十年に及ぶ意見交換会の主催を挙げたい。学術会議化研連と日本化学会との共催の形を取りながら、会議のアレンジ、報告書の作成など、非常に重要な役割を分

子研が果たしている。この会議が始まった当初は、学術政策について積極的に発言し、文部科学省の学術政策に影響を与えてきた諸先輩がいらっしやった。現在の分子研は、このような活動でも影が薄いのではなかろうか？ 分子研の教員の中には、「それは違う」と反論したい方もいらっしやるであろうが、やはり、見えてこない。日本化学会や学術会議などの広範な科学者コミュニティの中で、分子研はオピニオンリーダーとしての役割を果たしているであろうか？ 組織がコンパクトである分、教員が負うべき様々な「雑用の負担」は、大学に比べて圧倒的に少ない。その分、研究者コミュニティに対する貢献が求められるのではなかろうか。

## 番外編

昨年4月から、思いがけず研究と国際を担当する副総長を拝命することになった。副総長は教授の併任職なので、理事のように大学運営に100%責任を負う行政職とは異なる。そういう意味で、多少精神的には負担が軽いと思っていたのだが、ある高名な方から、「ほとんどの大学の理事や副学長は、相撲協会の理事と同じで、ただ相撲が強いだけで……。君は、そんなことにはならないだろうね。」と釘を刺された。実際に仕事を始めて見ると、これはものすごく重労働の世界である。会議、打合せ、出張、プラン作成など、一週間のスケジュールはびっしりである。その主因は（私の個人的な見解であるが）、法人化である。法人化以前は、大学の自治という言葉は格好がよいが、基本的には文部科学省の担当部署が様々な指示を行い、その範疇で大学の独自色が申し訳程度に出ていたのである。分子研も含めて、大学の執行部はその範疇で文部科学省と折衝していた。それ

に対して、法人化によって、文部科学省は「大学の責任でやってください」という態度に出ている。これは、本当は実に素晴らしいことで、運営費交付金に、これは「人件費」、あれは「旅費限定」などという面倒な色がつかなくなった。大学が自由な裁量で経費を「仕分け」出来るのである。ところが、そうは言っても勝手に何をしても良いわけではない。会計検査が目を光らせており、年度計画の達成状況、大学評価等が目前に迫ってくる。一方で、グローバルCOEをはじめとして、振興調整費など様々なカテゴリーで競争的資金を獲得するために、大学は多少背伸びをした提案を行う。予算を獲得し、それに付随する間接経費がなければ、大学運営はたちまちバンクするからである。背伸びをしてみたものの、実行する段階で申請書の提案が実施困難となる局面も出てくる。こうしたことを、当然のことであるが、大学の責任でクリアしていく必要がある。組織規模が大きくなれば、それに応じて懸案事項も増えてくる。

忙しさの余り、ついつい「文句を言いたくなる」事も多い。すなわち、「我、笛吹けど、汝ら踊らず」と。しかし、一般の教職員に対する発言として、自戒の意味を込めて僕自身が禁句にしている言葉は、「時間が無くて……」、「色々難しくくて……」、「周りが言うことを聞いてくれなくて……」である。

本年4月からは、大峯巖先生が分子研の所長に就任される。「時間が無くて……」、「色々難しくくて……」、「周りが言うことを聞いてくれなくて……」等の言葉が大峯先生の口から出ないように、分子研の皆さんがしっかりと支えて、新たな分子科学研究所を創り上げてくれることを期待して、本稿を閉じたい。



## 分子研から十年

### 天能精一郎

(神戸大学大学院工学研究科教授)

てんのう・せいいちろう / 1989年京都大学工学部石油化学科卒業、1994年同大学大学院理学研究科博士後期課程修了、分子科学研究所助手、名古屋大学助教授・准教授を経て、2009年より現職

1994 - 1999年までの5年間、理論研究系(部門)・岩田グループの助手として分子研でお世話になりました。所属が名古屋に変わった後も竜美ヶ丘の宿舎から通い続け、分子研時代と合わせると計15年間岡崎の住民として生活しました。分子研は楽しい思い出ばかりで、この紙面では到底書き尽くすことが出来ません。国研で何も考えずに基礎研究に没頭できる恩恵に浴することが出来たのが最大の理由でありますし、これまで機会が有りませんでした。当時お世話になった方々(入所時の伊藤所長、出所時の茅所長、岩田先生や現所長の中村先生を始めとする当時の理論系の先生・同僚達)に深く御礼申し上げます。

2009年4月に計算科学専攻を含む神戸大学大学院システム情報学研究科の設置母体である工学研究科に移りました(システム情報学研究科は2010年4月設置予定、現在の所属は工学研究科情報知能学専攻)名古屋大学ではポスドク主体の研究室を運営していましたので、3名の優秀な研究員と共に殆どアクティビティーを落とすこと無く新しい環境に移行出来ました。工学研究科は六甲台に位置しています。ブダペストの量子化学仲間がドナウ河岸の世界一眺めの良いオフィスを自慢していましたが、キャンパスから楽しめる大阪湾の眺望はそれに勝るとも劣りません。神戸は魅力的な街であり、学生時代を

過ごした京都やお隣の大阪とは同じ関西圏でもかなり異文化です。(帽子を冠った老若男

女が多く、私も大して使わない夏帽子を2ヶ月で5つも買ってしまいました。)東西の交通も便利が良く、専攻の新歓などは毎回違う三宮のレストランで行なわれています。

研究の方は、名古屋で始めた露に電子相関を考慮した高精度電子状態理論が主力課題です。従来の「一電子軌道」の概念を超える「ジェミナル(二体相関因子)」を量子化学計算に使おうという考えですが、5年前に湯川ポテンシャル経由の計算法を見つけたスレーター型ジェミナルを用いたF12理論が、近年の分子軌道法の分野で大きなブレークスルーとして世界的な発展を見せています。一部の手法は、多くの量子化学プログラムで数年以内に一般の研究者が使用可能になると思います。4年程前からは Crest の予算を頂き、研究室で開発していた Gellan 量子化学プログラムをベースに生体系の励起状態や物性計算のマルチスケール計算法の研究を行っています。KAIST から来た Jung 博士が中心となって一般化混成軌道 QM/MM 法の開発を行ない、大学の後輩でもある理研の杉田さんらとやっている酵素反応の他、量子化学計算をエンベッドした分子動力学シミュレー

阪神御影にある某立ち呑み居酒屋。神戸はB級グルメもお洒落で女性客も多い。



ションによるCDスペクトルやNMRの遮蔽定数とタンパク質の構造変化の関係を研究しています。従来の量子化学計算あるいは分子シミュレーション単独では得られない重要な計算化学のアプローチです。Gellan プログラムには RISM-SCF 法等の積分方程式関係の手法も実装されています。又、地理的に京都も近いので、分子研時代からの付き合いである谷村さん(京大理化)とその学生さんで量子化学的手法を利用した溶液の振動スペクトルの研究も始めました。

神戸大学には理学研究科と工学研究科に化学と応用化学がそれぞれ有り、理学研究科には富宅先生や富永先生といった物理化学でお馴染みの分子研OBの方々が活躍されています。神戸に赴任して先ず驚かされたのは理論化学の研究室が一つも無いということです。(少し前まではやはり分子研OBの高田さん(京大理生物物理)が理学研究科に居られたのですが。)それまで理論研究の盛んな所ばかりを渡り歩いて来ましたので、化学に理論が無いというのは考えた事ありませんでした。確かに以前から日本では東大を始めとして理論・計算化学の研究室が不在のデパー

トメントが多いようで、諸外国のスタンダードと比べるとかなり見劣りする状況ですので、少し考えないとまずい気がします。量子化学も統計力学も長い歴史がある学問であり、実験家の中にも理論に理解の深い方が居られるのに感心させられますが、研究や専門性となると視点が違うケースが多いように思います。

分子研へは次世代スパコンの会議等で訪れる機会があり、理論部門や計算機センターのメンバーにお会い出来るのを楽しみにしています。次世代スパコンに限らず、今回の事業仕分けのような先進国の証である科学技術や基礎研究に必要な予算を無駄か否かとかい

う議論は殆ど意味がありませんし、極めて客観性に乏しい気がします。私も殆どの論文の計算はノートパソコンで済ましてしまう方なので、最初は並列計算等というテクニカルなことに労力を費やすことに積極的ではありませんでした。しかしながら、現在使える並列計算機のコア数はせいぜい数千であるのに対し、次世代スパコンは64万であり、ここ1-2年でコア数が2桁も増加することが予想されています。このような劇的に進化する計算資源を本当に使いこなすことが出来れば、リアルで100年かかる計算が1時間強で可能となる訳であり、極めて重要な意味を持つ理論計算の論文がNatureや

Scienceに幾らでも出るでしょう。それを実現するには、既存の量子化学の計算手法やプログラムの徹底的な見直しを行なう必要がありますし、そこに新しい飛躍とチャンスがあります。若い研究者の方々には是非ともそのような機会を積極的に活かし、世界をリードする活躍をして頂きたいと思います。

注：大型計算機がとてつもない巨人となるであろうという先駆者の予測と、根本問題の提案と解決は人間の頭でしか出来ないという事実については以下の文献を参照

湯川秀樹 創造的人間  
藤永 茂 分子軌道法



初夏にドイツ・カールツルーエのWim Klopper教授を訪問した時の写真。  
奥の私の右からTew博士、Wim、Stephan Bernadotte君。Stephanは既に名古屋時代の私の研究室に二度滞在している。