

算機資源のみに依拠することは正しいことではありませんし、現実的にそれ以外の重要な課題は山ほどありますが、その流れの中に我々はいることも間違いがありません。さて、そこで分子研の状況に戻りましょう。申請の多くは、必ずしも“heavy”でない計算を行うという比較的modestなものが大半を占めます。“heavy”な計算をしたくても、共同利用システムの制約から、その計算の全体（試行錯誤の過程を含んで）のすべての行うだけの占有時間とデータ蓄積容量を期待することは困難だという現実があります。仮に、この計算機センターが日本における分子計算科学の中心であり続け、さらには世界的

なレベルでリードすることを考えるならば、現在の最高水準として要求される計算量を確保することと、また同時に多くの研究者のフォーラムであるというふたつの役割を適切に両立させる努力をする必要があると思います。その「適切に」ということばで申し上げたいことは、すでにある程度の準備が完了して、product runのみで成果を出すことのできる巨大資源を要求する少数の課題と、多数のより準備的なもしくは簡易な計算の課題を峻別して、前者により大きな重点を置く配分を行う必要があるということです。現在でも、施設利用Sという前者に対応する枠組みがありますが、私の希望はその枠組

のより一層の充実です。それに対して、小さな計算機資源を用いるものはすでに個人が購入し得る計算機のレベルで実施できるものも多く、それらへの全面的支援をこのセンターがすべき時代はすでに終わったのではないかと考えます。計算機資源を提供することばかりでなく、分子計算科学の中心としての立場から、分子計算研究者のフォーラムを充実させる役割をより積極的に果たすべきであるとも考えます。

以上のような感想を抱いた2年間でありましたが、幅広い分子計算科学についての研究内容を学ぶ機会でもありました。ここに感謝申し上げます。

## 関連学協会等の動き

# 特定領域研究「実在系の分子理論」を振り返って

榎 茂好 京都大学物質・細胞統合システム拠点・特任教授  
分子科学研究所・短時間研究員

特定領域研究「実在系の分子理論」は2006年10月から始まり、2010年3月に終了致しました。この間、本特定領域研究の推進に当たり、分子科学関連の諸分野の皆様大変お世話になりましたことに心から御礼申し上げます。3年半の研究期間に約1年間近い準備期間と取りまとめを行った今年の4月から9月までを加えますと、合計5年間、この特定領域研究に携わっていたこととなります。振り返って見ますと、準備期間、特に、申請書の提出とヒアリングの準備を行っていた時期は緊張し、研究開始後約1-2年は気分が高揚していました。それに比べ、研究とりまとめを行った今年1月頃から9月までは、定年間際、定年直後ということもあり、

しんどいのみで、「特定領域研究はしんどい」と言うのが正直な印象です。それはさておき、分子研レターズに執筆の機会を与えて頂きましたので、この「実在系の分子理論」で私たちが何をしようとしていたのか、そして、何が達成され、理論化学・計算化学の将来はどのようなものになったのか、感想を交えて述べさせていただきます。

準備期間では総括班として参加して頂いた永瀬茂先生、加藤重樹先生、高塚和夫先生、田中秀樹先生と月1-2回程度、加藤研のゼミ室に集まり、議論を重ねました。この時期は、忙しかったのですが、総括班の皆さんとのdiscussionは非常に楽しく、良い思い出ばかりです。皆さんご多忙な方ばか

りですのに、本当に良くご協力頂きました。亡くなってしまった加藤さんの口調とご意見を今も良く思い出します。電子状態理論、反応ダイナミクス、分子動力学法を方法論的な基盤とし、構造的・電子状態的に複雑で、かつ柔軟な、すなわち、変化しやすい分子および分子集団を研究対象とし、広い視野から本質にアプローチし、また、実験化学者との連携を重視しよう、と言う構想は比較的早い時期からまとまっていた。それをどう表現するか、と言う点に悩みました。「実在系の分子理論」という名称でまとめるに至ったのは、実験化学者とのdiscussionの賜物です。この名称は、以下に述べるように、理論化学・計算化学の使命を考えてみ

でも適切であると同時に、私たちの感覚にじっくり来ました。

10年くらいより前は、モデル化合物、モデル系の構造や分子物性、反応過程が理論化学・計算化学の対象とされ、研究が行われていました。もちろん、そのような時期でも理論化学・計算化学は化学事象の本質を明らかにし、予測を行い、化学およびその関連分野に大きな貢献をして来ました。しかし、実験化学者の目から見ると、やはり、「ピーカーやフラスコの中と違うのではないか、実験では置換基が変われば、あるいは、溶媒が変われば、反応が進行したり、しなかったりするの、それは一体どうなっているのだ」、と言うフラストレーションを理論化学・計算化学研究に感じていたはず。「実在系」と命名したことにより、実験化学と対等にインタープレイを行える理論化学・計算化学の確立を目的としている、実際の系をそのまま研究対象としようとしていると好意的に受け取られたと思われる。そのような実在系をそのまま研究対象にする、と言うことは非常に重要なことで、私たちの目的の一つであったことは確かです。しかし、理論化学・計算化学の目的は、実験化学をそのまま再現したり、予測したりすることだけではありません。一口には「理論化学・計算化学は本質の解明と予測」と言いますが、もう少し、付け加えるなら、複雑な化学事象にアプローチするための新しい分子論的な視点を提供し、化学事象の本質を解明し、それをさらに進め、一般則を確立し、新しい概念を提供し、本質に基づいた予測を示すことが理論化学・計算化学の使命と考えられます。そのためには、複雑で、理論化学・計算化学の手に負えないような化学事象こそ理論化学・計算化学の目から見つめることが必要不可欠です。それが、理論化学・

計算化学を現在のレベルから一層高いレベルに、望むらくは、より高い次元に発展させることにつながるはずであり、同時に、新しい概念や法則性の確立にもつながると期待されます。現実の化学事象へアプローチには、理論的方法・計算化学的方法の大規模化、高精度化が必要なことは言うまでもありませんが、それと共に複雑な事象を解明するための高度化も必要と考えます。マルチスケール・マルチフィジックスという言葉が良く言われていますが、私たちの言いたいことは少し違います。最も良い例は、高塚和夫先生たちの **Beyond Born-Oppenheimer** の理論でしょう。これはけっして、マルチスケール・マルチフィジックスではありません。現在の電子状態理論は多くの場合 **Born-Oppenheimer** 近似に基づいて成立しています。しかし、レーザー化学で見出されている化学事象を正しく理解するには **non-Born-Oppenheimer** 近似の理論が必要不可欠です。レーザー化学だけでなく、昔から研究されている遷移金属錯体の物性でもこのような視点は不可欠です。このように実在系を正面から見て行くことにより、現在の理論の不足している部分とその高度化の方向性が明らかになると期待されます。実在系に正面からアプローチすることによる理論化学・計算化学の高度化、より高い次元での発展、そして、それらを通して実験化学と対等のパートナーシップを確立することを期待して、申請課題を「実在系の分子理論」としました。

事後評価のヒアリングで「実在系の分子理論の当初目的を達成しましたか？」と聞かれました。もちろん、「Yes」とお答えしました。その回答の通りにたくさんの成果を上げることが出来ました。一つ一つの紹介は止めますが、この3年間半で、理論化学・計算

化学的方法は大きく進展しました。特に、本特定領域研究から大規模化、高精度化、そして、本質にアプローチする計算結果の解析法などで大きな進展がありました。実験化学者から指摘されて来た溶媒効果の取り込みも進展しました。また、複雑な系の動的過程についてもこれまでにない研究成果が上げられました。従来の分子動力学法では弱点であった量子効果の取り込みも試みられ、成功裏に第一段階を達成し、今後の展開が期待されています。遷移金属を含む複雑な系、フラーレンやカーボンナノチューブなどの巨大系、タンパクなどの生体系についても多くの研究成果を上げることが出来ました。この意味で、当初の目的を上げることが出来たと自負して居ます。

しかし、現在の化学が研究対象としている化学事象はやはり、この特定領域研究を計画していた時点とは異なり、新しい分野や研究対象が次々に登場しています。無機化学・配位化学では多孔性高分子錯体 (**Porous Coordination Polymer** ; **PCP** と略称、**Metal-Organic-Framework (MOF)** とも言う) が新しい機能物質として登場してきました。また、結晶や無定形固体の中での孤立分子のふるまいが重要な研究対象となってきています。良い例は太陽電池や燃料電池の中での分子や分子集合体の振る舞いでしょう。金属タンパクの理論研究は進んでいますが、まだ、タンパク部分の構造最適化を含んだ反応解析はなされていませんし、さらに言えば、タンパクの揺らぎを考慮した電子状態計算は未だ不可能です。膜タンパクやイオンチャネルの分子論研究も不十分です。最近、細胞の中と試験管の中の相違が次々と実験的に指摘されています。分子科学はきれいな環境の中の分子の振る舞いを研究するのではなく、複雑な環境の中で、

どのように分子が特性を発揮しているかを明らかにすることが求められてきていると考えます。このような新しい研究対象の登場以外にも、電子状態理論への統計力学的因子の取り込み、複雑な反応系の反応速度の理論的見積もりなど、理論化学・計算化学が解決しなくてはならない課題は目の前にいくつもあります。それらの諸問題の解決は従来の理論的方法ではなく、新しい次元の方法の登場を必要としている場合がほとんどです。この意味で、「実在系の分子理論の達成」という視点は今後も化学とその周辺分野に対して重要であると考えます。

以上のように、この3年間半で、理論化学・計算化学は大きく進展しました。もちろん、本特定領域が無くても進展して来たはずですが、本特定領域で理論化学・計算化学研究者、それに加え、理論化学・計算化学研究に期待する実験化学研究者が集まり、シンポジウムを開催し、お互いに研究交流をし、共同研究を行ったことが大きな刺激となり、大きな貢献をしていたと考えられます。特に、異分野間の交流、若手研究者間の交流の活発化は現時点に止まらず、今後5年後、10年度の大きな成果につながるはずですが、このような表にすぐに出ない長所が特定

領域研究にあります。それは、事後評価のヒアリングで紹介したいいくつかの研究成果と共に、むしろ、それ以上に大切な研究成果とも言えます。その意味で、特定領域研究、現在は、新学術領域研究となっていますが、このような科学研究費補助金制度は必要不可欠であり、我が国が乏しい予算で諸外国に対抗して研究成果を上げてゆくにはベストの制度と言えます。「特定領域研究を予算のばらまき」、と考える向きもありますが、決して、そのようなことはありません。異分野の研究者、世代を超えた研究者が同じ場で研究を議論し、進めることは非常に大切なことであり、このような協力体制を保障する新学術領域研究は、我が国が世界に誇るファンドと言えます。文部科学省、日本学術振興会もぜひ、この制度の長所を認め、育てて頂きたいと切望しております。

最後に、次世代スーパーコンピュータにも触れておきたいと思います。文部科学省が設定した5分野の内、第2分野「物質・エネルギー」で、分子科学研究所は、東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所とともに戦略拠点に選ばれました。東京大学物性研究所が取りまとめ機関とした計算物質科学研究拠点（CMSI）に参画し、分子

科学分野において、次世代スーパーコンピュータによる画期的な研究を展開するための活動を開始しています。本特定領域は、この次世代スーパーコンピュータには直接関係ありませんでしたが、班員は大きな関心を持っていました。次世代スーパーコンピュータが超高並列機であることから、分子動力学計算が適しているように考えられますが、電子状態理論もそれに対応する準備が進んでいます。本特定領域研究でも次世代スーパーコンピュータに適した理論・計算方法が提案されています。また、超並列計算機であることから、これまでの理論化学・計算化学研究に統計力学的視点を取り込める可能性もあります。反応過程の経路積分計算などが具体的候補としてすぐに上げられます。分子理論による研究に新しい息吹が吹き込まれることが期待されます。このように分子理論は基礎、応用双方の面で今後大きく発展し、今以上に化学と周辺分野において大きな存在になることを確信しています。そのような中で、「実在系の分子理論」と言う視点が、理論化学・計算化学において重要な役割を果たすことが出来ることを願って、拙文を終えたいと思います。