

分子科学のこれまでとこれから①

理論・計算分子科学研究領域

齊藤 真司

理論・計算分子科学研究領域 研究主幹



アメリカで研究をされていた諸熊奎治先生が、分子科学研究所の理論研究系の初代教授として着任されるにあたり、「日本に計算化学を定着させ、広めたい」という強い決意を抱いていたと伺ったことがある。計算化学（計算科学）には計算機が必要となるが、当時の日本の計算機環境は米国と比べると極めて脆弱であった。そこで、諸熊先生は、日本初の24時間稼働の「電子計算機」の運用を開始するとともに、分子科学を中心とする多様な分野の実験科学と理論・計算科学の協働という研究の礎の構築にも尽力された。このような研究基盤の確立は極めて大きな成果をもたらし、今や計算科学は理論研究者だけでなく、化学における多くの実験研究者にとっても不可欠な研究手法となっている。

また、この50年間で、計算科学の対象は飛躍的に拡大してきた。当初は、比較的小規模な分子の量子化学計算や単純な系に対する分子動力学（MD）計算が中心であった。1970年代後半から、電子状態理論、統計力学、および反応論に関するさまざまな理論研究が進み、その成果として、高精度な電

子状態計算や凝縮系ダイナミクスの研究が大きく進展した。その後、タンパク質のような巨大分子系を対象としたQM/MM（量子力学/分子力場）法の発展に加え、複合的な生体分子系や物質系を対象とした大規模MD計算へと研究は広がった。そして、2020年代に入ってから、機械学習やAIを用いた物質・機能探索、構造予測などの研究も急速に進展している。これらの進展は、理論・計算化学に関連するノーベル賞の授与と軌を一にしている（表1）。今後、研究の対象はさらに複雑になり、そのスケールも一層拡大していくことは間違いない。

しかし、これらの発展は、計算機の性能向上や計算手法の高度化といった技術的要因だけによって実現されたものではない。今後の展開を見据えるには、研究の根底にある合理性に目を向ける必要がある。例えば、機械学習や深層学習を用いた材料・反応設計や構造予測のように、目的達成のために最適な手段を合理的に選択・実行する研究は、「目的合理的行為」の典型例であり、極めて効率的に目覚ましい成果を上げている。一方、効率性や進展の速

さは乏しくとも、量子力学や統計力学の理解を深め、それに基づく現象の解明に価値を置く研究は、「価値合理的行為」と言える。価値合理的な探求は、イギリスの化学者ジョージ・ポーターのいう「まだ応用されていない研究」であり、応用研究の基盤であるとともに、基礎科学の発展を支える源泉でもある。そして、これら二つの合理的探究は相反するものではなく、むしろ補完し合い、科学の進歩を支えている。

多様で複雑な課題に直面するこれらの時代においては、目的合理性と価値合理性という両輪の探究が理論・計算分子科学における創造性と深化をもたらすとともに、異分野間の連携を促進し、未踏領域への挑戦を支える原動力となるであろう。ただし、AIの発展によって目的合理性の追求が一層加速する現代だからこそ、価値合理的な探究の意義を改めて認識することが、科学を持続的に発展させるためにこれまで以上に重要である。

表1 1966年以降の理論化学および計算化学に関するノーベル賞の例

受賞年	受賞者	受賞理由
1966	Robert S. Mulliken	化学結合および分子軌道法による分子の電子構造に関する研究
1977	Ilya Prigogine	非平衡熱力学、特に散逸構造の研究
1981	Kenichi Fukui, Roald Hoffmann	化学反応過程の理論的研究
1992	Rudolph A. Marcus	溶液中の電子移動反応理論への貢献
1998	Walter Kohn, John Pople	密度汎関数法の開発、量子化学における計算化学的方法の開発
2013	Martin Karplus, Michael Levitt, Arieh Warshel	複雑な化学系のためのマルチスケールモデルの開発
2024	David Baker, Demis Hassabis, John Jumper	コンピュータによるタンパク質設計手法の開発、タンパク質構造予測プログラムの開発

光分子科学研究領域

大森 賢治 光分子科学研究領域 研究主幹

分子研は文部科学省が所管する大学共同利用機関法人ですが、50年前の創立当初とは共同利用研の在り方も変わってきました。当方は過去10年に渡り文科省審議会委員を仰せつかって参りましたが、省内においても共同利用研の役割は定期的に議論になるところでありまして、本稿では分子研の始まったばかりの次の50年のためにも、新しい分子研のあるべき姿について考えてみたいと思います。

私が学生だった1990年頃、大学の研究室はとても貧乏でした。実験系のラボの学生は、自前の装置をゼロから組み上げるため図面引き、機械工作、ガラス細工、電気回路の設計やハンダ付けなどに日常の-effortの大半を取られていたと思います。本郷のラボから秋葉原のラジオデパートに都バスでよく通ったのを思い出します。今や大学の研究室は驚くほど裕福になり、ラボに市販の高価な装置が溢れているところも少なくありません。当時の大学のラボでエアコンが完備しているところは稀だったと記憶しています。そのおかげというか、普通に実験していれば温度依存性が測定できましたが、真夏の実験は修行の場でもありました。今では多くの大学のラボでエアコンが稼働し快適な実験環境が整っています。

この現代において、高価な実験装置や実験環境を共同利用や共同研究に供することを柱とする「大学（アカデミア）の共同利用研」から、新たな「社会的な価値」を創造し提供する「社会（アカデミア+政府+企業+市民）の共同利用研」に変わっていくべきではないかと感じています。そのために、以下の3つのミッションがあると思います。いずれも日本国家・

社会から全面的な支援を受けて成り立つ分子研に国益や国民の利益に資する責任があり、その責任を果たしてのみ今後も国家や社会から「必要とされる」という観点から述べました：

- (1) リスクを超えて新しいサイエンス／テクノロジーを創造し先導するCenter of Excellenceであり続ける；
- (2) 上記(1)によって新しい産業を創造し産業界と連携して日本の国力に貢献する；
- (3) 今までよりも若い世代（小中高生）も含めて知的に刺激・先導し上記(1)と(2)を支える先進的な人材の源泉を醸成する。

まず(1)についてですが、多くの学生の教育に予算や実験装置を使う必要のある大学では、然るべき教育がなされた証である卒業論文や学位論文の完成が最重要ミッションの一つであり、その結果として学生にリスクの高い研究課題をアサインすることは難しくなります。一方、分子研には学生も一定数いますが、基本的にはプロの研究者の集団であり、ハイリスクではあるが革新的な研究を行うことで国益に資する義務があります。その上で、もう一つの観点は「テクノロジー」だと思います。これまで分子研は、純粋科学を基本とし、工学応用には重きを置いてこなかったと理解しています。しかし現代の工学では高度な純粋科学の蓄積や先見があって初めてチャレンジが可能になるDeep Techの比重が増えています。例えば私の専門である量子コンピュータは、量子力学という「非常識」な世界観で誰も考えつかなかった新しいアイデアを生み出す「クリエイティビティ」と、それを10のマイナ



ス4乗以下のエラー率で実装する「エンジニアリング」という、一見相反することを両立させる極めて新しいタイプのチャレンジであり、しかもその先には社会を一新するような変革が待っているかもしれません^[1]。分子研がその高度な純粋科学をテクノロジーに開放するとき、かつての「アカデミア」だけでなく、政府、企業、市民の「社会」に対して、より直接的に貢献できる新しい価値を創造することができます。

次に(2)ですが、(1)で創造した価値を社会実装するためには産業界と連携することが不可欠です。さらには産業構造のDeep Tech化に対応するための産業界における人材育成（産業界から分子研ラボへの出向等を通じた人材受け入れ）、分子研から産業界への技術移転を通じて、より直接的に国益に資することが重要であると考えます。

最後に(3)についてですが、上記の「Deep Tech」化に対応するための人材育成は、背後にある学問体系が社会にとって斬新であればあるほど、言語と同様に低年齢の段階から始める必要があります。例えば量子コンピュータの背後にある量子力学の世界観をネイティブとして身につけた人材を育成するためには小学生層へのアウトリーチから始める必要があると、上記の文科省審議会でも議論してきたところであります。これも、純粋科学を極める分子研の国益に対する重要な使命であると思います。

[1] 大森賢治, 巻頭言「量子コンピュータ概観」, 表面と真空 vol. 68, No. 3, pp. 127-128, 2025.

分子科学のこれまでとこれから②

物質分子科学研究領域

横山 利彦

物質分子科学研究領域 研究主幹



分子科学研究所がめでたく創設50周年を迎えたことについて大変うれしく思います。私は2002年1月に当時の岡崎国立共同機構・分子科学研究所の分子構造研究系教授に着任し、以降23年の長きにわたって分子研に勤務させていただきました。歴代所長はじめ分子研関係者の皆様に大変お世話になり心より感謝しております。本稿では、学問としての分子科学、特に物質分子科学のこれまでとこれからについて、また、分子研の物質分子科学研究について私見を書かせていただきたいと思います。

分子科学という言葉自体は従前から一般的な単語ではなく分子研創設時に造られた言葉だと思います。分子や分子集合体の性質を物理法則に基づいて理解し、特異な物性や優れた機能を有する分子・分子システムを新たに創製することを目標とする学問領域でしょう。創設当初は物理化学的な学問領域であり、そのうちの物質分子科学では分子集合体の固体物理学的物性や化学反応論的特性が主たる研究内容だったかと思います。現在でも物質分子科学研究領域はこれらの研究分野を中心として、半導体・応用物理学から生命科学や地球宇宙科学にまで及ぶ極めて広い研究領域に発展しているといえます。

50年前というと、私は中学生で、中学生から見た当時の我が国は公害と戦っていたという印象が大変強いです。

大気や河川の汚染に対策を講じ始めた時代であり、美しい自然は二度と戻って来ないのではないかと危惧していました。しかしながら、自動車排ガス3元触媒の発明に代表されるような素晴らしい科学技術の発展のおかげで、現在では美しい海・河川、青い空・澄んだ大気が復活し、完璧とは言わないまでも、もともと科学技術、特に化学が引き起こしてしまった公害を科学技術自身が克服してきたと言えるでしょう。現在も、生活・環境にかかわる問題は、個々の問題点は異なるものの、克服すべきところは本質的に同じであり、例えば地球温暖化を科学技術によって克服するためには、これまでにない優れた機能を有する物質材料を創製するのみならず、様々な観点から生活・環境と調和のとれた材料開発が期待されます。飛躍的なブレイクスルーをもたらす機能物質材料創製は新たな基礎的自然法則を導く発見であり、生活を豊かにする物質材料開発には常に物質分子科学の基礎研究が欠かせないものと確信します。

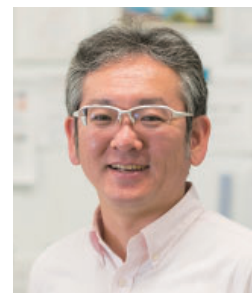
分子研における物質分子科学研究について期待することも同様であり、我々の普段の生活や地球・宇宙環境と調和のとれた優れた機能物質材料を創製するため、新しい学理を構築する基礎研究からのブレイクスルー的物質分子科学の展開を期待しています。さて、分子研の特徴的な役割を少し具体的に見

てみると、最も重要な特徴の一つに准教授や助教等のステップアップがありそうです。統計によると、准教授・助教授81名のうち74名が他大学等の教授相当職（うち43名は旧帝大教授）、また、助教・助手303名のうち149名が教授相当職（うち旧帝大43名）、70名が准教授相当職（うち旧帝大27名）に栄転しています。これらは准教授・助教の方々が分子研で優れた研究成果を挙げた賜物であり、分子研の若手研究者育成が秀でている結果と言えるでしょう。分子研は創設以来50年にわたって内部昇進禁止の原則を堅持しており、このこともこの秀でたステップアップにつながっていると思います。

しかしながら、特に外国人顧問や国内の外部評価においては、秀でた成果を挙げた研究者を転出させるのはいかなものかとしばしば指摘を受けています。特に法人化以降は法人としての成果が強く求められるようになったと感じます。所内の主幹施設長会議でも漸く内部昇進禁止の原則の是非が議論され始めました。また、研究施設所属の主任研究員（機器開発等を主に担当する講師相当職）が上席研究員（准教授相当職）への内部昇進が認められるようになりました。内部昇進禁止の原則の是非を真摯に検討する時期に入ってきており、有意義な議論の展開に期待したいと思います。

生命・錯体分子科学研究領域

飯野 亮太 生命・錯体分子科学研究領域 研究主幹



分子科学研究所（分子研）50周年おめでとうございます。生命・錯体分子科学研究領域（生命錯体領域）は、2007年の組織改編（研究系および錯体化学実験施設の廃止）に伴い、極端紫外光科学研究系、錯体化学実験施設、分子スケールナノサイエンスセンター、岡崎統合バイオサイエンスセンターに所属していたグループリーダーの一部を構成員として始めました。当時設置された研究部門は、生体分子機能、生体分子情報、錯体触媒、錯体物性、生命・錯体分子科学（客員）の5つであり、グループリーダーは世代交代しておりますが、現在もこの体制が維持されております。

私自身は2014年に、岡崎統合バイオサイエンスセンター（統合バイオ）を本務、分子研生命錯体領域を兼務として着任しました。その後、2018年に統合バイオが生命創成探究センター（ExCELLS）に改組されるタイミングで分子研が本務となり、生命錯体領域の研究主幹を拝命しました。現在、岡崎に着任して11年以上が経過し、自身の研究活動を再考する時期でもあります。そこで本稿では、生命錯体領域の今後のあり方だけでなく、自身の研究の今後の方向性を含め、「分子科学のこれから」について私見を述べさせていただきます。

まず、率直に申しますと、生命錯体領域の寄せ集め感は否めません。「生命（生体分子）」と「錯体（人工分子）」を

対象とする異なる分野を、領域としていかに協同的に発展させていくかが今後の課題です。そして、生体分子、人工分子の科学にとって共通の重要な概念は「非平衡」だと考えています。非平衡開放系を利用した自律的な高効率エネルギー変換、高エネルギー物質産生、高速情報処理は、生体、人工分子に共通の重要な研究課題だと考えております。

非平衡の概念の導入によって可能となる研究課題の重要性を所内、領域内で認識して頂くため2022-2023年度には、関連分野の先駆者であり造詣が深いDavid A. Leigh教授（マンチェスター大学化学科）を分子研外国人運営顧問にお招きし、渡辺芳人所長および生命錯体領域のグループリーダーとの議論、生命錯体領域の評価、コロキウムでの講演を行って頂きました。また、生命錯体領域の客員教員として、非平衡物理学に精通した鳥谷部祥一教授（東北大学工学研究科、2023-2024年度）、林久美子教授（東京大学物性研究所、2025年度）に着任して頂いております。

私個人のグループでは現在、光学顕微鏡1分子計測、タンパク質工学、DNAナノテクノロジーを利用し、分子モーターの作動原理と設計原理の解明を目標に研究を進めております。分子モーターは、駆動エネルギー存在下で自律的に働き続けるナノマシンであり、

原理の理解には非平衡の概念が必須となります。着任当初は作動原理の解明のため、タンパク質分子モーターを研究対象にしてきましたが、最近は設計原理の解明により注力しており、非天然型生体分子モーターや人工分子モーターに対象を広げています。将来的には、分子設計の柔軟性を生かして生体分子を凌駕する性能を持つ人工分子モーターや人工分子モーターシステムを生み出し、分子モーターの動きに基づく自律的な論理計算、バイオマーカー検出等の応用に展開したいと考えております。

本稿の最後は、関連の宣伝で締め括らせて下さい。分子研研究会「2050年の生体分子科学を語る」を2025年10月21日（火）～22日（水）に岡崎コンファレンスセンター大隅ホールで開催致します（https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2025/10/21_6683.html）。本研究会では、生体分子科学に関わる若手研究者18名に自らの研究活動に関連する夢を語って頂き、生体分子科学の未来を展望します。招待講演者には生体無機化学やケミカルバイオロジーの若手研究者も含み、生命錯体領域と高い関連性を持つ研究会です。参加登録の締切は2025年9月30日（火）で、本稿が出版されるころには締切を過ぎているかもしれませんが、ご興味のある方々は是非、奮ってご参加をお願い致します。