

## 4-1 理論研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月25日

委員 加藤 重樹（京大院理，教授）  
塚田 捷（東大院理，教授）  
吉川 研一（京大院理，教授）  
中村 宏樹（分子研，教授）  
岩田 末廣（分子研，教授）  
平田 文男（分子研，教授）  
オブザーバ 谷村 吉隆（分子研，助教授）  
岡本 祐幸（分子研，助教授）  
米満 賢治（分子研，助教授）  
青柳 睦（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成12年1月17日～18日

委員 Professor Nicholas Handy (Department of Chemistry, University of Cambridge)

### 4-1-1 点検評価国内委員会の報告

#### (1) 分子科学における理論の位置付け

分子科学における理論の重要性は近年ますます増しており，理論研究グループの存在は今や不可欠なものであると認識されるに至っている。研究対象も，小さな分子から，液体，生体高分子などの巨大分子，そして分子性導体へと大きく広がっている。量子化学に代表される電子状態論，化学動力学とその制御，分子系の散逸過程の統計力学，分子集合体の電子相変化の理論，生体分子のシミュレーション等など実験に刺激されながら理論的手法も大いに発展を見せている。一方，電子計算機は言うまでもなく理論研究にとって極めて重要な道具となっている。ハードウェアや計算手法等の計算科学の発展が理論に及ぼした影響も計り知れない。

#### (2) 日本における理論分野の発展と問題点

上述した様な理論の重要性とともに理論が本来持っている幅広い可能性にも拘わらず，日本ではまだ十分に理論に対する評価が根付いていない。以前から言われている事であるが，その状況は今もあまり変わっていない。欧米諸国に比較して理論の重要性に関する認識が依然として低い。この状況を改善するためには，日本の化学に於ける教育の改善（化学物理関連の科目や学科がない等）及び学界の理論に対する認識の変革が必要である。これは，化学側だけの問題ではなく，物理の方からも化学との交流を深め学問の融合をもっと推進する努力がなされるべきである。

#### (3) 分子研理論研究系の評価，問題点，期待する役割等

理論研究系では幅広い分野に亙る研究が行われている。特に理論第四の設立により，化学系と物理系様々な分野の研究者が一堂に会して議論し切磋琢磨できる環境が整い，研究活動が飛躍的に増大した。研究活動・環境について特に問題点はないと言える。

ただし，分子研は大学と同じ様な体制・構造を採るべきではなく，研究本位の仕事をすべきである。特に，若い人（助手等）が大学院教育などで時間をとられる様な体制にすべきではない。また，大学では学生の学力低下が深刻な問題になっているが，それに巻き込まれないようにもすべきである。つまり，分子研では，博士課程はまだしも，修士課程を持つのは良くない。むしろ，大学で博士号を取得した学生の博士研究員等の教育の場としての役割を持つべ

きであろう。分子研でやるべき事をこのように位置づけることが大切であると考え。また、分子研は、化学と物理の人間が入りし易い環境を常に保ち、色々な学問分野の交流の中心になるべきである。様々な研究会の開催等を通してこれに貢献すべきである。

#### (4) 電子計算機センターの評価と問題点

分子研電子計算機センターが、日本の理論化学発展のために果たした役割は大変大きい。理論研究にとっての数値計算の重要性は言を待たないが、国際的に最先端の計算機環境を常に整備・維持する事が必要がある。ワークステーション等の発達により、小規模な計算は、計算機センターを必要としなくなったが、分野によっては、計算機的能力が国際競争の鍵となっており、その重要性はますます増している。電子計算機センターの今後の重要な役割の一つは、真に大型計算を必要とする分野を選択しそこに特化したシステムを持つことであろう。大学では計算機センターの目的を特定できないが、分子研では特定できる。分子科学の研究の飛躍的進展のためには計算機的能力が不可欠であることをアピールし、予算増を目指すべきである。そのためには、電子計算機センターを積極的に使う大型ユーザーを、予算申請やシステム選定に積極的に参加させるべきであろう。

分子研電子計算機センターは来年度から岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターへと組織変えが行われる。従来からの分子科学を大事にしながらも生物科学を包含した形での展開をする事になるが、それをどのように実現するかについては、十分な議論が行われるべきである。機構への組織変えに伴い、将来はなお一層の計算能力の拡大を目指さなくてはならない。

また、予算の問題もあるが、分子研の施設は大学共同利用機関として全国の研究者に研究支援を行う必要があるにも関わらず、相変わらず支援スタッフ（助手や技官など）が不足しているという深刻な問題もある。予算や人員の不足問題は、前回の評価でも指摘されているが、何も改善されていない。

#### (5) 博士研究員に関する問題

分子研は、高度な研究を行う場として、また若手研究者を訓練する場として、博士研究員を増員すべきである。また、現在分子研に所属する博士研究員には、さまざまな待遇のものがあるが、ある程度待遇を統一した方がよい。また、外国人の博士研究員をもっと容易に採用できる制度を導入するべきである。

#### (6) 独立行政法人化に関する問題等

独立行政法人化に当っては、分子研は高等学術研究機関としての役割を果たすことを目指すべきであろう。そのためには、予算の集中投資が必要である。基礎学術研究の重要性を訴え続け、直ぐに役立つ研究にしかお金が出なくなる様な状況の到来を絶対に避ける努力をしなくてはならない。また、米国におけるように、研究指導者が研究費申請のための労力に研究時間の何割も費やさなくてはならないというような本末転倒な状況は是非とも避ける必要がある。

### 4-1-2 国内委員の意見書

委員 A

分子科学研究所理論研究系は、設立以来、25年の間、日本の理論化学の研究の中心的役割を果たしてきた。現在の日本における理論化学、化学物理理論の研究の進展も分子研理論研究系の存在を抜きには語れないと言っても過言ではない。数年前に分子基礎理論第4部門が作られ専任部門が3部門になったことにより研究分野が広がり、電子状態、反応動力学、液体統計論、生体高分子など理論化学、化学物理の幅広い分野の研究者を擁する研究センターとして大きく発展している。特に、歴史的な理由により理論化学の分野に偏りが大きい日本の現状を考えると、理論研究系における研究分野の配置のバランスの良さは極めて重要であり、今後の日本における理論化学、化学物理理論の研究に幅

を持たせ大きく発展させるためにはこれまで以上に重要な役割を果たすことが期待される。分子研の恵まれた研究条件の下で研究をすることは若い研究者にとって憧れであった。これまでも分子研での研究を通じて力量をつけ、大学等の場で活躍している研究者を多く生み出してきた。ここ10年ほどの間の大学における理論化学の研究室数の増加やこの間の大学院の量的拡大により理論化学、化学物理理論の研究者を目指す学生、特に博士課程大学院生の数が20数年前に比べて大幅に増加している。これは理論化学の学問的發展にとっては好ましいことではあるが、一方で、いわゆるオーバードクター問題を再び生み出し、現状ではかなり深刻な事態となっている。このような現状を考えると、分子研が博士課程修了者に研究の場を与えることは極めて重要であると思える。現在、IMSフェローを初めポスドクの人たちが分子研で研究を行っているが、日本の大学から生み出される博士課程修了者の数を考えると、分子研のポスドク数はまだまだ少ないと言える。分子研における研究は、大学のように学生に対する教育の一環として進める研究ではなく、professionalな研究者が切磋琢磨して進める質の高い研究であるべきであり、そのために卓越した研究条件が用意されていると言えよう。従って、特に理論研究系は、ポスドクを主力に研究を進めるべきであると言える。具体的には、1研究グループ当たり2名の分子研独自のポスドクを持つ制度を早急に確立すべきである。これが保証された上で学振その他のポスドクを受け入れる体制を作るべきである。

理論化学、化学物理理論の研究を進める上で電子計算機の利用は不可欠である。分子研計算機センターは、設立以来、日本の理論化学の研究の発展に極めて大きな貢献をしてきた。日本が分子科学のための大きな計算機センター、計算資源を持っていることは国際的にも有名であり、海外からの高い評価を受けてきた。分子研計算機は、日本の乏しい研究条件の下で理論化学の研究を進めるための一種の生活保障のような役割を果たし、それが今日の理論化学研究の進展を支えてきたといえるが、科研費の増額などにより個々の研究室が不十分なワークステーションを所有することができるようになってきていることを考えるとその役割を変化させる必要があるように思える。当然、日本の多くの理論化学研究者は、自分の所属する大学等に十分な計算資源を持っていないため、分子研計算機を日常の研究のため使う必要があり、日本の理論化学のレベルを維持するためにはこの機能を引き続き持つ必要がある。しかし、現状では、Gaussianなどの汎用プログラムが多く使用され、多数のCPUやメモリーを要する大型計算が容易に実行できる環境が十分に整備されていない。共同利用研の計算機は、大学などでは様々な制約のため実行することが困難な大型計算を実行することができる環境を整え、研究の先端部分を前進させる役割を持っている。来年度には、分子研計算機センターが岡崎研究機構のセンターになり、新しいスーパーコンが導入されることになっている。この機会に20数年間続けてきた計算機利用申請の方法を再検討することも必要であろう。特別プロジェクトの申請を他の申請とは別に募集するのも一案かもしれない。

最後に、現在、国立大学の独立行政法人化が大きな問題となっている。分子研も独立行政法人化の対象となると聞いている。そもそも独立行政法人は、日本の財政問題に端を発し、行政改革の一環として大学、研究所を政府から切り離し、効率化の論理で評価しようというものである。もし、現在言われている法人化が実行に移されたならば、分子研は大きな打撃を受けることは想像に難くない。特に、理論研究系の研究は、実用に直接結びつくものではなく、産業その他に役立つことを基準に評価された場合、極めて困難な事態に陥らざるを得ない。また、効率化の論理、費用対効果の論理で論文増産競争に巻き込まれた場合、質の高い研究によって理論化学、化学物理理論のセンターとしての役割を果たすことが困難となり、ひいてはその存在価値も問われることになる。分子研理論研究系は、これまで日本の理論化学の研究の進展に大きな寄与をしてきたが、それは実用の論理ではなく、純粋に学問の論理に則ってである。この意味で、独立行政法人問題は、理論研究系にとって極めて深刻な問題であると言わざるを得ない。理論研究系として、これまで果たしてきた役割、成果を踏まえ、独立行政法人問題に対して明確な意志表示をすべきで

あると考える。

委員 B

#### 研究内容について

一般的な印象として、理論研究系の各部門のスタッフは、分子科学の最も重要と思われる領域に布陣しており、それぞれが専門的に掘り下げた一流の研究活動を行っている。新設の分子基礎理論第四部門は順調にスタートし、活発な研究活動を軌道に乗せたように思われる。とりわけ電極・溶液界面などの溶液関連の研究や、有機導体関連の研究はそれらの中核であり、従来カバーしきれなかった理論系研究科としての新しい領域を開拓している。分子基礎理論第一研究部門では量子化学の中軸となる研究が進み、励起状態やクラスターなどで大きな成果があがっているが、たんぱく質分子の第一原理計算からの立体構造予測など、生物との関わりのある研究も大いに注目される。分子基礎理論第二研究部門でのトンネル遷移過程の解析的な理論はユニークな研究であるが、溶液の非線形高次光学過程、溶液内電子移動の研究も分野的には重要な方向を目指すものと言えよう。

一方、これからまさに大きく発展しようとする分子科学の課題は多く、その前線は極めて大きな広がりを見せている。例をあげれば個々の分子を機能回路素子として用いる単分子エレクトロニクス、原子間力顕微鏡で開かれる原子分子ナノ力学、カーボンナノチューブと表面のハイブリッド系、有機分子と無機固体複合系など、将来の超微細デバイス、機能性ナノ材料と関係する分野がある。このような躍動的に進展している周辺分野の動きにも、理論の立場からの目配りが欲しい。物性物理や電子工学などの分野とのより太いパイプができることを、さらに期待したいところである。電子計算機センターの関連では、新しい計算理論やコンピュータアーキテクチャなど関連分野についても、関心を持っていただき、交流の機会を作るよう努力されるといいのではないかと思った。

一般論として、先端的な科学研究者には専門分野で超一流の研究をすることを絶えず求められているのはもちろんだが、分子研の研究者にはそれ以上のことを期待するのは間違いだろうか？ すなわち、研究の成果とその意義、あるいは面白さを、同業者はもちろんのこと、他の科学一般の領域にいる人々、さらにはアカデミックな世界とは無縁な一般社会にどのようなかたちにせよ有形無形に絶えず発信してゆくようなスタンスを持ってほしいと思う。すなわち基礎科学がなぜ社会にとって必要なのかという、一般国民、特に行政やメディアにたいする説得性（アカウンタビリティ）が必要とされる。これは科学や文化に対する基本的な無理解にねざす安易な独立法人化などが喧伝される現在、とくに重要なことと思われる。残念ながら我が国では一般の国民を始め、政財官界、マスコミなどの多くは、科学に対する共感や理解は乏しく、技術と科学の違いすらよく認識していないように思われる。たとえば先端技術の基礎として応用研究に徹する工学的研究ならば経済的基礎も得やすく、政府、国民にたいして十分な説得力を持ちうるであろう。しかし、分子研の使命は必ずしも応用を指向する訳では無く、自然科学的な真理の探求あるいは純粋な学問的な好奇心に触発される基礎科学としての展開に重点があると思われる。そうであればこそ、上に述べたアカウンタビリティと情報発信の努力が求められるのではなからうか？ 上に述べたことを実現するためにも、関連分野はもちろんのこと、科学技術の最先端の動向にいつも関心を持ちつづけ、場合によっては新しいパラダイムを創生するほどの気構えが、必然的に求められることとなるであろう。一つの専門分野でリーダーシップをとりつづけることは、おそらくどのような一流の研究にとっても必要条件であるに違いない。しかし、そればかりではなく発想やアプローチを固定化することなく、生き生きと躍動する異分野を横断的に眺められるスケールの大きさと大胆な発想が重要になる。これは研究者一般に望まれることであるが、とりわけ分子研の研究者にはそのようなことを期待したいところである。ことばを変えれば専門性に埋没するのではなく、非専門性の中から養分をとりこむ努力を怠らないことである。

ことなる環境にいる研究者との感受性の豊かな出会いが必要なのである。学問の細分化が極限にまで進みつつある現在、異分野間の交流、情報発信の意欲の重要性はますます高まりつつある。分子研の研究者、とくに理論研究者の方々には、是非こうした意識を持ち続けていただくことをお願いしたい。

#### 大学院教育について

研究にたいするしっかりした動機をもった学生については、分子研で大学院教育を行うことによって、いろいろな面で良い効果が期待される。学生自身が優れた研究者からの影響を受け、第一線を切り開く一流の研究に身をもって参加し、一つの達成を体験することの教育効果は計り知れない。そればかりでなく研究者自身にとっても、学生の生き生きと発想にふれること、自らも教育者として初心回帰を迫られることなど、いろいろと望ましい効果があると思われる。

一方、十分な動機と能力のない学生を分子研に受け入れること、あるいはそうならざるを得ない教育システムにコミットすることには、賛成できかねる。このような学生の指導をするには、膨大な労力と時間を割かなければならないからである。もちろん、このように全精力をもって動機付けから出発する初心者教育をおこなうこと自体は有意義なことである。しかし、これに最先端の研究を行う研究所スタッフが取り組むのは、経済的、人的資源の効率的運用の観点からしても、決して望ましいことではないと思われる。

---

委員 C

年の暮れのおしめまつた12月25日に分子研に寄らせていただき、中村先生をはじめ理論系の研究者の方々と、情報交換・議論をさせていただきました。その折私が発言しましたことを中心に、ここで一筆述べてさせていただきます。

#### (1) 分子科学関連分野での理論の発展

電子状態理論は過去20年余の間に驚異的な発展をとげ、各種分光法によって得られるスペクトルの解析はもとより、多様な化学反応について反応経路の詳細を明らかにすることのできるような理論的手法が発展してきた。

一方、分子集団や蛋白質などの巨大分子を対象とする統計力学的な研究についても、De Gennesのスケーリング理論に代表されるように、大きな進展があった。さらに、非平衡系の統計力学の主たる研究対象が、国際的に見て線形領域から非線形領域へとシフトしたのも、ここ20年余の間の特徴であると思われる。

#### (2) 日本における現状と国際的位置付け

分子軌道理論に代表される量子化学の研究者は、分子研創設以降着実に増加しており、国際的に見て、トップクラスの研究が進められてきている。一方で、日本国内の大学では依然、化学と物理の間の溝は深く、分子科学の理論的発展を担う人材の養成には大きな問題が残されている。

#### (3) 分子研の役割と評価

分子研はこの間、分子の電子状態や反応論の研究の発展に中核的な役割を果たしてきたと言って良いと思われる。過去、理論系の人員は決して多いとは言える状況にはなかったが、国際的に見ても、極めてレベルの高い研究が進められていた。

又、少ないスタッフのもと計算センターがOpenな形で運営され、それを活用する中で国内外の研究者が、有意義な研究を進めてきたといえる。

分子科学領域の理論計算は、大規模なものとなることが多い。又、そのような高負荷の計算によってはじめて分子や分子集団の挙動をより正しく、記述することが可能となる。それ故、共同利用研究所としての有効に機能するためにも、計算機環境を持続的に整備していくことが重要な課題である。

#### (4) 今後の発展が期待されている研究課題

分子の理論計算は依然、極めてホットな研究課題であり、今後も大きな発展が期待される。そのためにも計算機環境の整備が必須であることは既に述べた。そこでここでは別の側面から私見を言わせていただきたいと思います。

過去20余年の間に、化学物理（物性）理論は、質的な発展をとげた。繰り込み群やスクーリング理論、カオスなどの非線形現象、ランダウ流の相転移理論等、それまでの時代とは一線を画するような新しい概念や理論が生み出されてきている。非平衡系の統計力学の理論的対象自体、線形から非線形に大きく拡張した。このような理論的発展を踏まえて、いまや北米や欧米を主体に30を超える Nonlinear をその名称の中に持つ研究所や機関が創設されてきている。そしてこういった研究所では数理物理的方法論を核にして、化学、生物さらにはもっと広い分野を対象とした研究が進められている。残念ながら日本ではこのような学際的な研究所はまだ無い。私の個人意見としては、日本でこのような研究所を作ると、すぐにそれ自体が変質して新たな“村社会”となる危険性が大きいと思われる。そこで、分子研の理論部門を、今後一段と拡充することにより、このような非線形ダイナミクスを中心に捉えた研究も行えるようにしていただければと思う。特に岡崎研究機構に設置予定の総合バイオセンターは、分子研と基生研・生理研の3研究所が協力してできるものとお伺いしている。分子研はかつて“バイオ系の研究はしない”ものと思われていた頃と比べると、隔世の感があるが、この新しい方向性は歓迎すべきものと思われる。

生命現象の核心に迫ろうとするなら個々の分子の物性研究だけでは限界がある。生命は、極めて多数の分子が巾広い時間スケールにわたって関わっている非平衡の現象である。そこでは近年発展してきた化学物理の理論が大いに役立つものと期待される。

#### 分子研への期待

物理と化学を融合した新しい化学物理研究を切り開いていただくことを期待している。又、日本の大学や学会の持つ“村社会”の悪弊を打ち破るような、研究活動をしていただければと思っている。

特に重要なのは、欧米の流行を追いかける競争的研究ではなく、学問的に意味のある創造的研究を推進していくことであろう。

#### (5) 分子研に対する諸々の意見

##### 博士研究員

各大学で博士課程を終了した若手研究員が武者修行できるように、十分な数の博士研究員のポストを確保することを努めて頂きたい。特にIMSフェロー（非常勤講師）の一層の充実が望まれる。

##### 大学院生教育

優秀な大学院生が入学してくるよう努力することが求められていると思います。少なくとも国立大学の修士修了者が分子研の博士課程に進学する時には、入学金は免除されるべきものとする。又、各々の国立大学においても学生を抱え込むのではなく、流動化するような方策をとる必要があるであろう。

今後、総研大として、修士の学生も採るようになるのであれば、分子研の若手・中堅の研究者にとって教育上の負担が大きくなりすぎないような配慮が望まれる。

##### 独立行政法人化

分子科学研究所は過去20年余、一貫して基礎的な学問を推進し、学界に貢献してきた。その成果は新材料や医薬品開発などの広範な応用部門に、必ずしも目に見えない形で役立ってきている。換言すると“目的志向”の研究所でないが故に、その社会への寄与はむしろ極めて大きなものとなっている。議論が進められている独立行政法人化は、安易な形で実行されるなら基礎研究所の用途をつぶすものになりかねないと思われる。基礎研究を推進する場としての、

分子科学研究所の役割が社会に認知されるよう，より一層の努力をお願いしたい。

### 4-1-3 国外委員の評価

原文

19 January, 2000

Dear Professor Kaya

I now send you my report and recommendations following the presentations of the Professors of the Department of Theoretical Studies. I saw three Full Professors (Iwata, Nakamura, Hirata) and three Associate Professors (Okamoto, Tanimura, Yonemitsu) as well as Professor Aoyagi from the computer centre.

I was impressed with the originality of the research presented, and the enthusiasm of the scientists in their research. Much of the research commands international attention and is certainly at the forefront of modern research in these areas. The breadth of research is considerable: quantum chemistry, protein folding dynamics, molecular reaction dynamics, condensed phase non-linear optical spectroscopy, molecules in solution, one- and two-dimensional organic conductors, spectroscopy and dynamics of 3- and 4-atom molecules. Taken all together the research is of the highest quality.

It is my view that the size of the Department of Theoretical Studies is appropriate. Of course today theory plays a role in all branches of physics and chemistry and there are innumerable areas in which a theoretician can make a contribution. Increasingly experimental groups will carry out their own theoretical studies. My only advice regarding new directions is that when an Associate Professor departs for elsewhere, it should not follow that his successor is in the same field.

There is good collaboration with other departments at IMS and other universities in Japan.

The situation of theoretical chemistry in particular in Japan is rapidly improving. I know of large research groups in Tokyo, Kyoto and elsewhere; this means that IMS must work hard to maintain its reputation for excellence if its function is to be justified. A critical decision must soon be made because Suehiro Iwata retires shortly. Quantum chemistry (following its Nobel Prize in 1998) is now recognised as a permanent mature branch of theoretical chemistry. Every leading theoretical chemistry department must have a quantum chemist. IMS must have a quantum chemist! I furthermore observe that many universities are appointing young people as their quantum chemists. Quantum chemistry now covers a broad range from state-of-the-art studies of small molecules through the use of density functional theory for larger molecules, leading to a combination of quantum mechanics and classical mechanics for the largest systems.

I was particularly impressed that the associate professors were pleased with, the scientific environment within which they work, their equipment and the library facilities. I was also pleased that they were able to attend important international conferences in their fields; this is vital for the development of their research.

I was pleased to hear that the scientists at IMS recognise the importance of holding scientific meetings at their conference centre; such meetings and participations are becoming almost as important as writing scientific papers. They automatically lead to international collaborations.

The area of concern which was drawn to my attention: in a modern research environment (consisting of full professors and associate professors) the role of the post-doctoral scientist is important; he/she will already have research experience and will contribute strongly to research and will bring in new ideas. Permanent staff members wish have funds available to appoint postdoctorals to work on specific projects; such applications should be dealt with promptly by the grant issuing authorities, and it is usual for the

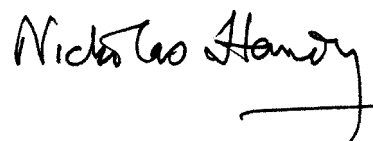
postdoctoral positions to be advertised once they are awarded. It is recommended that the procedures for postdoctoral appointments is re-examined.

I heard about the new machines which are expected at the computer centre. Their prospective performance will be of great benefit of the Department of Theoretical Studies.

In summary, it was a pleasure for me to hear about the exciting research being carried at the Department of Theoretical Studies at IMS. The Department's size and activities mean that it is well placed to contribute to 21st century science.

Yours Sincerely

Nicholas Handy



訳文

茅所長殿：

理論研究系のグループリーダーの方々による研究紹介を伺い私の報告と助言を申し上げます。三名の教授(岩田, 中村, 平田)と三名の助教授(岡本, 谷村, 米満), 及び計算センターの青柳助教授にお会いしました。

皆さんの研究のオリジナリティと熱意には感銘を受けました。研究の多くは国際的な注目を受けており, 各々の分野の研究の最前線に間違いなく位置付けられます。研究の広がりには実に顕著であり, 次の様な様々な分野にまたがっています: 量子化学, タンパク質フォールディング, 分子の反応動力学, 凝縮系の非線形光学分光, 溶液中の分子, 1, 2次元の有機導体, 3及び4原子分子の動力学。これら全ての研究は最高水準のものであります。

理論研究系の大きさは, 私の見る所, 適当なものと思われれます。勿論今日では, 理論は物理と化学の全ての分野に渡って重要な役割を果たしており, 理論家が貢献出来る分野は数え切れない程あります。実験家は益々彼等自身で自分達の理論的解析を行う様になるでしょうが。今後の新しい方向に対する助言と言える事は, 将来助教授が他に転出した時その後継者を同じ分野で選ぶ必要はないであろうと言う事だけです。

分子研の他の研究系及び日本の他の大学との共同研究も活発に行われています。日本に於ける理論化学の状況は最近富に改善されています。東京や京都, その他の場所に大きな研究グループが形成されています。従って, 分子研はその役割を正当化する為に研究における高い評価を維持する様に十分な努力をする必要があるでしょう。岩田末広教授が間もなく退官されるので, 近い将来重要な決定がなされなくてはならないでしょう。量子化学は1998年のノーベル賞を受けて今や理論化学の成熟した恒久的分野として認知されるに至っています。全ての拠点的な理論化学部門には必ず量子化学者が必要です。分子研にも量子化学者が絶対に必要です。多くの大学が若い量子化学者を採用しているのを見てとれます。量子化学は今や小さい分子の詳細な研究から大きな分子の密度汎関数による取り扱いまでに及び, 量子力学と古典力学を結合して大きな系への挑戦を始めています。

助教授の人達が分子研における研究環境, 設備, 図書等の完備に満足しているのには大変感銘を受けました。また彼等が各々の分野で重要な国際会議に出席出来る様になっているのもまた喜ばしい事です。これは彼等の研究の発展にとって極めて大事なことです。

分子研の研究者達が岡崎コンファレンスセンターに於いて種々の研究会を開催することが重要な事であると考えておられるのを聞いて嬉しく思いました。そういう研究会に参加する事は論文を書くのと同じ位重要なことです。そ



れは国際的な協力研究へと自動的に発展しうるからです。

私が気になった事の一つは、現代の研究環境に於いては（教授にとってであれ助教授にとってであれ）博士研究員の役割が大変重要であるという事です。彼等は研究経験があるが故に研究に大いに貢献してくれますし新しいアイデアを持ち込んでくれます。教授・助教授の人達は個々の研究課題に参画してくれる博士研究員を採用できる資金が出来る事を望んでいます。その為の申請は資金供給の当局によって速やかに処理される事が望ましいと思います。博士研究員を採用出来る事が分かったらそれを速やかに公にし優れた人を採用出来るようにすべきです。博士研究員採用の手続きを見直す必要があるでしょう。

電子計算機センターに設置される新しい計算機の事を伺いましたが、その能力は理論研究系にとって大きな力となるでしょう。

最後に、分子研の理論研究系において行われている高度な研究活動のお話を聞く事が出来大変嬉しく思います。系の大きさとそこにおける研究活動は正に21世紀の科学に大いに貢献して行けるものであります。