

7-1 理論・計算分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 11 日

委員 榊 茂好（京都大学，教授）
樋渡保秋（金沢大学，名誉教授）
前川禎通（東北大学，教授）
北原和夫（国際基督教大学，教授）

国外評価委員面接日：平成 20 年 3 月 17 日～ 21 日

委員 William H. Miller（Professor, University of California, Berkeley）

7-1-1 点検評価国内委員の報告

(1) 当該研究領域の研究分野での分子研の役割，寄与と位置づけ

理論・計算分子科学研究領域は全部で 9 グループ（理論 6，計算 3）を擁し，わが国の大学における化学系学科では最大の陣容を誇り，国際的に第一線の研究成果を数多く発信しているだけでなく，共同利用機関として計算科学研究センターの管理・運営に責任をもち，全国，600 件／年にも及ぶ計算分子科学研究の「中核拠点」としての役割を果たしている。また，これらの活動を通して，数多くの研究者を育て，各レベルの人材（助教，准教授，教授）を全国大学等に輩出している。

(2) 当該研究領域の研究内容と各研究グループに対する個別評価

当該研究領域の研究は分子およびその集合体の構造，物性，ダイナミクスおよび機能を分子科学基礎理論（量子化学，統計力学）および分子シミュレーションに基づき解明することを目的とするものであり，その対象とする物質も電子系から生体分子まで多岐にわたっている。また，対象とする物質の相も気相，液相，固相と全範囲に及んでいる。以下に，過去 3 年間ににおける当該研究領域の活動と各研究グループの特筆すべき研究成果およびその評価について述べる。

当該研究領域の活動

理論・計算分子科学研究領域は領域全体の取り組みとして下記の 3 事業を遂行している。

計算科学研究センターの共同利用事業

NAREGI プロジェクトにおける「ナノサイエンス実証研究」拠点および「次世代スパコン」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としての事業

自然科学研究機構の「中核拠点形成」事業

計算科学研究センターはいわば分子科学研究所における共同利用事業における中核的研究施設のひとつであり，全国の分子科学分野の計算科学者に計算資源を提供するだけでなく，その共同研究を促進し，理論・計算科学分野の発展に貢献している。施設のユーザー数はワークステーションやパソコンクラスターなどの普及とともに漸減傾向にあるが，今なお，60 グループ，約 600 人の大学研究者がこの施設を利用し，100 パーセントに近い稼働率を維持していることは他に類を見ない特長であり高く評価できる。

一方，その利用形態を見てみると注目すべき特徴がある。それは利用者が理論・計算分子科学分野のプロパーの研

究者と有機化学者などを含む実験研究者に大きく分かれていることである。そして、実験研究者の多くはセンターにインストールされている Gaussian (量子化学) や AMBER (分子シミュレーション) などのプログラムを使用できることにメリットを求めている。これは分子科学分野における理論と実験との実質的な共同であり、分子科学分野の成熟度のひとつの指標でもある。今後、計算科学研究センターが分子科学分野の基盤的研究施設としての位置づけをより一層高めるためには、このような共同研究を促進することが肝要であり、これまで理論・計算分子科学分野で開発してきたプログラムのライブラリ化などを通じて、分子科学分野の研究者に供することが求められる。

理論・計算分子科学研究領域は文部科学省からの委託事業である「NAREGI ナノサイエンス実証研究」を 2003 年度から実施している。この事業は文科省の「超高速コンピュータ網形成」プロジェクトの一貫として、情報科学研究所を拠点としたチームによって作られた「グリッドミドルウェア」の実証計算を行うことを第一のミッションとしている。このプロジェクトチームは分子科学研究所、東大物性研、東北大金研、京大化研、産総研など全国 6 研究機関および 12 大学の研究者から構成され、分子科学研究所はそのプロジェクト拠点としての役割を果たしている。本プロジェクトにおいて達成された学術的成果は 2005 年度に実施された文科省での中間評価の段階ですでに「RISM-FMO」を含む各種連成計算、1000 万原子系の巨大分子動力学計算の実現など多岐にわたっており、高い評価を得ている。また、本プロジェクトでは「グリッドナノシミュレータ」と呼ばれる計算支援ソフトウェアを作成している。このソフトウェアは全く独立に作成された個々のプログラムをシームレスに連成することを可能にすることから、グリッド上での連成計算はいうまでもなく、現在、構築中の「次世代スパコン」においても威力を発揮すると思われる。本年度はプロジェクトの最終年度に当たり、グリッドミドルウェアの最終的な「実証研究」に取組んでおり、その成果が大いに期待される。

一方、「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発」プログラムは 2006 年度に開始された文科省プロジェクト「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」の一貫として、次世代スパコンを有効に活用するソフトウェアの開発を目的としている。この目的のため、1. 次世代情報機能材料、2. 次世代ナノ生体物質、3. 次世代エネルギー、という 3 つの「グランドチャレンジ課題」を設定し、それらの研究課題に沿って研究チームを編成している。これらの課題を達成する上で必要な理論および方法論を構築すると同時に、それらに対応する計算プログラムを作成し、次世代スパコンでの実証計算を行うことを目指している。現時点ではプロジェクトが開始されて未だ 1 年半程しか経っていない現状にあり、何らかの結論的な評価を下す段階にはない。しかしながら、これまでの活動でも、理研で開発を進めているスパコンハードウェアのアーキテクチャ選定における「ターゲットアプリケーション」として、上記のグランドチャレンジ課題に対応する 6 本 (うち 3 本は分子研から提案) のプログラムをベンチマークに供したことは高く評価できる。

理論・計算分子科学領域は自然科学研究機構プロジェクト「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」における「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」プログラムの拠点として活動をしている。このプログラムは機構内におけるシミュレーション分野の連携を促進し、特に、大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現するとともに、それぞれの分野においても方法論に新機軸をもたらし、学際的新分野を形成することを目指している。2005 年度に開始された本プログラムにおいて、すでに、24 回におよぶセミナー、3 回の機構内連携研究会、2 回の国際シンポジウムを開催するなど活発な連携活動を行っており、その活動は高く評価できる。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要性

本研究分野は量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした分子科学分野の理論・方法論を基礎として、分子およびその集合体の構造、物性、化学反応、相転移、ダイナミクスなど物質が示す様々な現象を電子・原子レベルから理論的に考究する学術分野であり、計算機科学の発展とも相俟って、現在、急速にその重要性に対する認識が高まりつつある。とりわけ、現在、急速にその研究が進みつつある「ナノ科学」および「生命科学」においては、分解能や感度などの限界から、実験では到底解明することのできない様々な現象にぶつかっており、理論的な解析なくしては学術分野そのものの発展が停滞してしまう状況にある。一方、これらの分野の諸現象は、例えば、水溶液中の酵素反応に典型的に見られるように、電子から無限の広がりをもつ溶媒まで、広いスケールと複数の物理・化学現象が絡みあった複雑な対象であり、従来の分子科学理論の枠を超えた新しい理論・方法論の発展が期待されている。

理論・計算分子科学の重要性は単に基礎学術研究からのそれだけに止まらない。上に述べた「ナノ科学」や「生命科学」は将来の生産技術や医療技術の科学的基礎としても重要な位置づけを担っており、この分野におけるブレークスルーがそのまま生産や医療におけるブレークスルーに直結する可能性が高い。例えば、分子レベルでの電子デバイスや新しい機能をもつ人工酵素の設計などがそれである。

(4) この分野の発展はあるか、どのような方向か

上に述べたように、この分野の発展は従来の「要素還元型」の研究からより現実的な系（分子およびその集合体）の構造、物性、ダイナミクス、機能を分子レベルから解明していく、いわば、「総合型」研究のフェーズに突入しつつある。その意味において、現代の科学研究において計算機が占める位置を再認識する必要がある。これまでは、現象の背後にある因果関係をモデルによって説明する際に、解析を容易にするために本質的な部分を抽出したモデルを考えることが多かった。しかしながら、現代では、計算機の発達によって、複雑な要因を取り入れたモデルをそのまま数値的に解析することが可能となり、複雑な要因からなる現実的なモデルの有効性を検証しさらにそこでのパラメータを変えることによって新たな現象を予測することも可能となる。このような時代において、理論やモデル構築を行う研究者と、数値解析の高速化のアルゴリズムなどを研究する計算機科学分野の研究者とが出会って協同する可能性を拓く教育の在り方を考えるべきである。また、アルゴリズム研究の成果は広く使えるような仕組みも必要である。以上のことから、我が国の理論・計算分子科学振興のために、以下の施策を提言する。

現在、非常に限られた化学系学科にしか置かれていない理論分子科学（理論化学）部門を全国の高等教育機関に増設し、学部時代から計算機を用いた理論分子科学に親しめる環境を作る。

大型計算機センターをもつ高等教育機関においては、センターを単なる計算機利用施設に留まらず、理学（理論化学、理論物理）と計算機科学あるいは計算機工学の共同研究の実践する教育研究施設とする。

物性研と分子研には、計算ソフトのライブラリーとしての機能を持たせ、基礎研究のための情報発信機能をもたせる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

理論・計算分子科学研究領域は当該分野の全国の研究者の共同研究を促進する上で本質的役割を果たしており、その活動は高く評価できる。今後とも、この方向で努力を継続すべきである。同時に、わが国における理論・計算分子科学分野のさらなる発展という視点からは、いくつかの克服すべき課題も指摘される。

これまで理論・計算分子科学研究領域の共同利用に関する活動は計算科学研究センターの運営と管理に責任をもち、主として、計算機資源を分子科学分野のユーザーに提供することを中心に行われてきた。これまでも量子化学計算ソ

フトとして GAUSSIAN や分子動力学計算ソフトとして AMBER などの市販ないしは公開ソフトをユーザーの利用に供してきたが、それはあくまでも付随的な活動に過ぎなかった。しかしながら、先にも述べたように、現在の分子科学分野における計算科学の研究対象はこれらの市販ないしは公開ソフトだけでは太刀打できないレベルに達しており、わが国の分子科学分野で開発した独自の理論や方法論および計算プログラムを共通の知的財産として共同利用に供すること、すなわち、「ハード」を中心にした共同利用から「ソフト(知識)」を中心にした共同利用へと大きく転回することが求められている。この意味で理論・計算分子科学研究領域は独自に開発した理論・方法論およびソフトウェアを計算科学研究センターのライブラリ化などを通じて積極的に公開してだけでなく、全国の理論・計算分子科学者が開発したすぐれたソフトウェアについてもその開発者にライブラリとして公開していただくよう協力を求める必要がある。また、これらのライブラリを維持・管理し、発展させるためには現在の計算科学研究センターの人員および組織体制では不十分であるため新たな措置を講じる必要がある。

7-1-2 国外委員の評価

原文

To: Hiroki Nakamura, Director-General of IMS

From: William H. Miller, Kenneth S. Pitzer Distinguished Professor of Chemistry, University of California, Berkeley

Subject: Report of my visit to IMS, March 17–21, 2008

Though I have had the pleasure of visiting IMS a number of times, it is sobering to realize that it has been approximately 30 years since my first visit, not long after the Institute was founded. It is clear that this “experiment” in scientific organization in Japan has been a great success in many areas of molecular science, and quite specifically in theoretical/computational chemistry (= molecular science) that is the subject of my review. By almost any measure one can easily conclude that the group in theory and computation at IMS is one of the premier such groups in the world. In size alone—I will comment on its quality below—it ranks at the top. I heard presentations from 9 research groups, and though Professor Okamoto has left for Nagoya University, my understanding is that a recruitment is currently in progress for a new appointment. For comparison, my own institution—the College of Chemistry (the departments of Chemistry and Chemical Engineering) at UC Berkeley—has 6 theorists in Chemistry and 2 in Chemical Engineering, comprising the K. S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, and we are the largest collection of theoretical chemists in the US. To my knowledge, there is no institution in Europe with this number of independent theoretical research groups in chemistry or molecular science.

Before discussing the scientific programs, I would like to make some comments about issues that I think are relevant to theoretical/computational chemistry in general, and to IMS in particular:

1. There has been such great progress in theoretical methodology (electronic structure theory, molecular dynamics simulation methods, *etc.*) in the last 2 or 3 decades that it can now be fruitfully applied to almost the entire array of molecular phenomena. The work at IMS and elsewhere is testament to this. While we all applaud the energetic *application* of theoretical tools to problems in bio-molecular systems, nano-materials, novel electronic devices, *etc.*, one cannot help but see a tendency to minimize the funding and support for more *fundamental methodological theory*. I am sensitive to this trend in my own country, where most young theorists think (rightly

or wrongly) that they must somehow work “nano” or “bio” into their research proposals in order for them to have any chance of being funded, and I have seen evidence for similar trends here in Japan. My general plea—and recommendation to Japanese funding sources, in particular—is not to minimize support for the creative *applications* of theory that are being pursued at IMS and elsewhere, but that creative research in *basic theoretical methodology* also be supported and encouraged. Not to do so is akin to “eating one’s seed corn” (I hope there is a Japanese version of this expression) and is a recipe for stagnation in the future.

2. I believe that a mandatory retirement age is a good thing. (I think it is a mistake that we abandoned such in the US.) Though the earlier age of 60 certainly seemed too young, something between 65 and 70 does seem about right; each society must of course decide what works best for them. Yes, some persons will still be doing excellent work at retirement age—and there should be provisions for emeritus faculty to maintain scientific viability if they still have a vigorous research program—but it is important that they relinquish their formal positions to make way for new appointments of young faculty.

3. The policy of not promoting Associate Professors at IMS is different from that in the US, where a “stay or go” decision is made at the end of a person’s assistant professorship (the tenure decision, about 5 or 6 years after the initial appointment). It is similar, however, to that of the German system, where a C3 professor (= associate professor) must move to another institution to move up to a C4 (= full professor) position. The only danger I see is that you will lose the best faculty, who will be attracted to senior positions at universities, say, and the ones who remain will thus not be the best. However I see no evidence for this at IMS, so the policy seems to be working well. It does have the positive effect of making positions available for recruiting new beginning faculty, and the importance of this cannot be over-stated. One of the best things about the large size (~50) of our faculty at Berkeley is that we are recruiting for one or two beginning assistant professors every year; it is quite exciting to always be looking for the “best and brightest” and seeing what research directions they are choosing.

4. I find the “privatization” of the national universities and research institutes to be potentially troublesome for theoretical/computational science. Yes, theory and computation are playing an increasingly important role in “practical” research that can attract money from private sources, but it usually is in a supporting role to experimental programs and thus not so visible. I believe that a large part of the success of theory at IMS has been the stable support it has had from the national government over its lifetime. I am unsure how well it will fare if it is forced to sell itself on the open market. I could make these same comments about the US—all these trends seem to be global—where universities (mine included) are aggressively pursuing partnerships with industry to help fund their research programs. This is not necessarily bad, but it certainly could be if not carefully monitored. I fear that our governments are in favor of these directions primarily as a way to lessen the demands on their budgets.

5. I am glad to see that IMS can now offer a doctorate degree to graduate students, for this certainly helps in attracting talented young co-workers. Institutions like IMS, the Max Planck Institutes in Germany, and the National Laboratories in the US, always have difficulties in attracting students since they have no undergraduate teaching role. IMS seems to be doing reasonably well in this regard, though I did see comments in an earlier review that the small size of experimental groups was somewhat of a problem. Fortunately for theoretical research, a large group is usually not necessary—or even desirable—in order to carry out a very successful program.

I was immensely impressed by the quality and variety of the research programs I heard described over an intense two-day period at IMS. Most all of the groups have interesting and novel approaches for new theoretical methodology and as well as creative applications to a wide variety of very timely molecular problems. For purposes of discussion, I comment first on the four research groups dealing primarily with *electronic structure and dynamics*. *Professor Nagase* described some very novel applications of DFT (density functional theory) to show the important role played by bulky substituent groups on the formation of multiple bonds between heavier group 14 elements, and also to the structure and functionalization of endohedral metallofullerenes. He also described the development of very efficient new algorithms for generating energy gradients at the MP2 level of electronic structure theory, the crucial tool for determining reactions paths of chemical reactions, and he also discussed the beginnings of a very novel Monte Carlo approach in electron configuration space (as opposed to the physical coordinate space of the electrons) for highly accurate electronic structure calculations. *Professor Yanai* described two very novel approaches for attacking the fundamental problem of electron correlation: a canonical transformation (CT) approach (similar in spirit, but not the same, as coupled-cluster theory) for treating the short-range dynamic correlation, and a density matrix renormalization group (DMRG) method for greatly enhancing the efficiency of CASSCF methods that treat the valence-mixing, or non-dynamical correlation. The combination of these two allow him to achieve highly accurate results much more efficiently than previous approaches. *Professor Nobusada* described his use of DFT to study gold-methane-thiolate clusters, and of TDDFT (time-dependent DFT) to show how circularly polarized light induces ring current in ring-shaped molecules. He also described an open-boundary cluster model (OCM) he developed to treat adsorbates on finite clusters. The open-boundary (outgoing wave boundary conditions) removes artifacts due to the finiteness of the cluster. *Professor Yonemitsu*, a condensed matter theorist, described projects dealing with electron dynamics strongly coupled to phase transitions in various materials, in particular the effect of photo-excitation of electron-hole pairs on conductivity, permittivity, and magnetic susceptibility. Some of the phenomena he has studied are photo-induced neutral-ionic/paraelectric-ferroelectric phase transitions in charge transfer complexes, charge transfer excitations in 1D dimerized Mott insulators, and effects of electronic correlation and lattice distortion on charge order in 2D organic salts.

The other five groups deal with a variety of complex molecular systems, making extensive use of *molecular dynamics (MD) simulation methods* (including extensions of this methodology), coupled with electronic structure calculations as necessary in some cases. *Professor Hirata* is of course very well known for his extensive work in extending the basic RISM idea far beyond the realm for which it was initially designed. He described applications to site-selective binding of ions to proteins, and in particular how this varies when mutations are introduced into the protein. Another application was to show how water is forced into a protein under high pressure, and how this leads to denaturation of the protein. *Professor Saito's* work deals with dynamics in the condensed phase, primarily aqueous solution. He described an impressive study of conformational changes associated with GTP hydrolysis in the RAS protein, using MD simulations to investigate the fluctuations and conformational changes; structures were characterized by QM/MM energy calculations. He also described MD simulations of the higher order time correlation functions that are necessary to calculate 2D infrared spectra, in particular those related to intermolecular dynamics in water. *Professor Morita* described his very extensive development of MD simulation methodology focused on calculation of sum frequency generation (SFG) spectra, a property most sensitive to interfacial regions of molecular ensembles. He emphasized that such careful theoretical simulations of the spectra are essential for extracting useful information from such experiments. He also described a very careful development of flexible and polarizable potentials that are necessary to make the MD simulations feasible.

Professor Okazaki described state-of-the-art MD simulations of extremely large molecular systems, micelles in water, lipid bilayers, and cholesterol molecules in membranes. He also described an MD simulation for the vibrational relaxation of CN^- ions in water; this was done by using a harmonic influence functional to represent the solvent, the harmonic model coming from the instantaneous normal mode (INM) model of the solvent. In so doing he was able to show that only water molecules in the first solvation shell contribute to the relaxation, and that the vibrational energy from the CN^- is deposited primarily in bending and rotational/librational modes of the water molecules. *Professor Okamoto's* research is also focused on classical MD simulations, primarily on improving the Monte Carlo (MC) and MD sampling methodology that is so important when treating truly complex processes, such as protein folding. Straight-forward approaches tend to get “trapped” in local minima and not sample the entire ensemble correctly. He has been instrumental in developing algorithms such as multi-canonical MC sampling, replica-exchange, parallel tempering, and multi-overlap MD methods. He described the application of some of these approaches to amyloid formation, a critical aspect of Alzheimer's disease.

So as stated in the prolog, the variety of problems being tackled by the IMS theoretical groups is quite astounding. The fact that the quality of the work is so high make this even more impressive. My overall finding is that the theoretical/computational group is in excellent shape. My only recommendation is that in future appointments you continue to focus on the intellectual quality and perceived creativity of the candidates and not too much on the particular topical area of the research (within reason, of course). I have found that departments and committees do a very poor job of trying to predict the most fruitful directions for research; rather, my experience is that the best directions are the ones that the best young people choose.

訳文

To: 中村宏樹 分子科学研究所所長

From: ウィリアム H. ミラー カリフォルニア大学バークレー校ケネス S. ピツァー抜群教授 (化学)

Subject: 2008年3月17 - 21日 分子研訪問の報告

これまで何度も楽しく分子研を訪問しましたが、研究所が創立してまもなくだった最初の訪問から約30年たったことに気づいてハッとしています。日本でこのような科学の組織をつくるという“実験”が、分子科学の多くの分野で偉大な成功を収めてきたことは明らかだと思います。私のレビュー対象の理論化学/計算化学 (= 分子科学) においては特に。ほとんどどの評価基準でみても、分子研の理論・計算分子科学研究領域は世界で一位のグループのひとつであることが容易に結論付けられます。以下では質についてコメントしますが、サイズだけでもトップに位置づけられます。9つの研究グループの発表を聴きました。岡本祐幸教授が名古屋大学に異動しましたが、新たな任命に向けて採用が現在進められていると理解しています。比較のため、私の施設 (カリフォルニア大学バークレー校の化学科と化学工学科からなる化学カレッジ) は化学科に6名、化学工学科に2名の理論家があり、K. S. ピツァー理論化学センターを含んでいて、米国では理論化学者の最大の集団です。私の知る範囲では、ヨーロッパにおいても化学または分子科学においてこれだけの数の独立した理論研究グループがある施設はありません。

科学プログラムを議論する前に、一般に理論化学/計算化学にそして特に分子研に関連すると思う課題にコメントしたいと思います。

1. この20～30年間に理論的方法論（電子構造論，分子動力学シミュレーション法など）は非常に大きく進展し，今では分子の関わる現象のほとんどすべての領域に応用され実りを挙げています。分子研等の業績はその証拠になっています。我々全員が理論的手段を生体分子系，ナノ材料，新規電子デバイスなどの問題に精力的に応用することを称賛していますが，より基本的／原理的な方法論への財政的支援や支持を軽視する傾向を見ざるを得ません。私は自国でこの傾向に敏感になっていて，そこではほとんどの若手理論家が財政的支援を得るため研究計画書に“ナノ”か“バイオ”という言葉を何とかして織り込まなければならないと（正しいか間違っているかはさておき）考えていますが，ここ日本においても同様な傾向があるという証拠を見ました。日本の，とりわけ資金源に対して一般に懇願あるいは勧告することは，分子研等で追及されている理論の創造的な応用を過小評価してはならないということです。基礎的な理論的方法論における創造的な研究も支援し奨励するべきです。してはならないのは，“種トウモロコシを食べる”（この表現の日本語版があると思います）ことであり，そうすれば将来低迷して不振に陥ることになります。

2. 私は強制的な定年制はよいことだと信じます。（米国でこれを放棄したことは間違いだと思います。）以前の60歳という年齢は確かに若すぎるように思えますが，65歳から70歳までの年齢なら適当に思えます。個々の社会がもちろん自分たちに最良のものを決めなければなりません。確かに，定年の年齢においても卓越した仕事をまだ行っている人がいます。名誉教授がもし積極的な研究プログラムを持っているなら，科学においての実行可能性を維持できる設備等条件を用意するべきです。若手教員を新規採用する道を譲るために，彼らが正式な地位を放棄することが重要ですが。

3. 分子研では准教授を昇進させないという方針があり，“留まるか出て行くか”の判断が助教の任期終了後（テニユアの決定，最初の任命の約5～6年後）に行われる米国での方針とは異なります。しかし，C3プロフェッサー（准教授）がC4プロフェッサー（教授）に着くためには他の施設に移らなければならないドイツの制度と似ています。私を感じる唯一の危険は，大学の高い地位に引き付けられるような最良の教員を失い，残る教員が最良でなくなることです。しかし分子研ではこのような兆候が見当たりませんし，この方針がよく機能しているように見えます。新しく始める教員を採用する地位をあけておくという建設的な効果が確かにあり，この重要性はどんなに言っても誇張にはなりません。我々のパークレーでの教員の規模が大きいこと（50名ほど）で最良なことのひとつは，毎年1～2名新たに助教になる人を採用していることです。最も優秀で聡明な人を常に探し，どの研究方向を彼らが選んでいるかを見ることは非常に胸を躍らせることです。

4. 国立大学と研究所の法人化が理論科学／計算化学に困難を与えるかもしれないことが見受けられます。確かに，理論と計算は民間の財源から資金を引き出せる“実用的な”研究でますます重要になる役割を果たしています。しかし通常は実験プログラムを支援する役割においてであって，目立つものではありません。分子研の理論の成功の大部分は日本政府から永年にわたって安定した支援を受けたことによると信じます。もしこれが自由市場に売ることを強制されたら，ことがどれだけうまく運ぶか確かではありません。全く同じこれらのコメントを米国にもできます——これらの傾向はグローバルに見えます——（私の所属しているのを含め）大学は研究プログラムに資金を出すのを助ける産業界との提携を強引に追及しています。これは必ずしも悪いことではないかもしれませんが，注意深く監視しない限り悪いことになりえます。日米の政府が予算要求を軽減するためにこれらの方向を主に支持することを恐れます。

5. 分子研がいまや大学院生に博士号を与えられることを知って嬉しいです。これで確かに，能力のある若い共同研究者を引き付ける助けになるでしょう。分子研，ドイツにおけるマックス・プランク研究所，米国における国立研究所のような施設は，学部生を教える役割がないために，常に学生を引き付けるのが難しい状況にあります。分子研はこの点，以前のレビューでは実験グループのサイズが小さいことが問題になっているとのコメントを見たものの，適

度によくやっているように見えます。理論研究では幸いにも、大きなグループは、とても成功したプログラムを遂行するためには、通常は必要ないか、または望ましくありません。

分子研での情熱的な2日間にわたって説明されたことを聞いて、それらの研究プログラムの質と多様性に、私は非常に感銘を受けました。ほとんどすべてのグループが興味深く新規なアプローチで新しい理論的方法論に取り組んでおり、広く多様性を持つとても時宜になかった分子科学の問題に創造的な応用をしています。議論をするために、まず電子構造とダイナミクスを主に扱う4つの研究グループをコメントします。永瀬教授はいくつかとても新しい密度汎関数理論(DFT)の応用を説明して、より重い14属元素の間の多重結合の形成にバルキーな置換基が果たす重要な役割と金属内包フラレンの構造と機能化を示しました。また化学反応の反応経路を決定する重要な手段である、電子構造理論のMP2レベルでのエネルギー勾配生成のとても効率的な新しいアルゴリズムの発展を説明しました。また高精度の電子構造計算のための(電子の物理的な座標空間ではなく)電子配置空間におけるとても新しいモンテカルロ計算によるアプローチの始まりを議論しました。柳井准教授は電子相関の基本的な問題に取り組むための2つのとても新しいアプローチを説明しました。ひとつは短距離動的相関を扱うための(精神としては結合クラスター理論と似ているが、同じではない)正準変換(CT)アプローチで、もうひとつは価数混成または非動的相関を扱うCASSCF法の効率を大いに高める密度行列繰り込み群(DMRG)法です。これら2つの方法の組み合わせで、以前のアプローチよりもずっと効率的に高精度の結果を得ることができます。信定准教授はDFTを使っての金-メタン-チオラートクラスターの研究と、時間依存DFT(TDDFT)を使っていかに円偏光の光が輪状分子上を周る電流を誘導するかを説明しました。また、有限クラスター上の吸着質を扱うために彼の発展させた開いた境界クラスター模型(OCM)を説明しました。開いた境界(外向き波の境界条件)はクラスターの有限性による人為的影響を取り除きます。物性理論研究者の米満准教授はさまざまな物質の相転移に強く結合した電子ダイナミクスを扱う研究課題、具体的に言うと伝導性、誘電性、磁気的感受率に対する電子正孔の光励起効果を説明しました。彼の研究してきた現象は、電荷移動錯体における光誘起中性-イオン性/常誘電-強誘電相転移、1次元二量化モット絶縁体における電荷移動励起、2次元有機塩の電荷秩序に対する電子相関と格子ひずみの効果などです。

他の5つのグループは、分子動力学(MD)シミュレーション法(この方法論の拡張を含む)を大規模に使う場合によって必要に応じて電子構造計算と結合させて、さまざまな複雑分子系を扱っています。平田教授は基本的なRISM理論の考えを最初に考案された領域よりもはるかに拡張するという広範囲に及ぶ業績でももちろんとても有名です。蛋白質へのイオンのサイト選択的な結合、特に蛋白質に突然変異を導入したときこれがいかに変わるか、に対する応用を説明しました。ほかの応用は、高圧下の蛋白質に水が押し込められるか、これがいかに蛋白質の変性にいたるかを示すことでした。斉藤教授の仕事は凝縮相におけるダイナミクス、主に水溶液に関わることです。揺らぎと構造変化を調べるためにMDシミュレーションを使って、RAS蛋白質のGTP加水分解に関連する構造変化に対する印象深い研究を説明しました。構造はQM/MMエネルギー計算で特徴付けられました。また2次元赤外分光の計算に必要な高次の時間相関関数、特に水の分子間ダイナミクスに関する相関関数に対するMDシミュレーションを説明しました。森田教授は分子アンサンブルの境界領域に最も敏感な性質である和周波発生(SFG)スペクトルの計算に焦点をあてたMDシミュレーション計算法のとても大規模な発展を説明しました。このような実験から有益な情報を引き出すにはこのように注意深いスペクトルの理論シミュレーションが本質的なことを強調しました。またMDシ

ミュレーションを実行可能にするのに必要な柔軟性と分極性をもったポテンシャルのとても注意深い発展を説明しました。

岡崎教授は水中のミセル、脂質二重層、膜中コレステロール分子など巨大な分子に対する最先端の MD シミュレーションを説明しました。また水中の CN イオンの振動緩和に対する MD シミュレーションを説明しました。これは溶媒を表す調和的な影響関数を使ってなされたもので、調和模型は溶媒の瞬間的なノーマルモード (INM) 模型から来ています。これを行うことで、第一溶媒和殻の水分子だけが緩和に寄与すること、そして CN イオンからの振動エネルギーが主に水分子の曲げモードと回転/秤動モードに蓄積することを示すことができました。岡本教授の研究も古典 MD シミュレーションに焦点をあてており、蛋白質折り畳みなど真に複雑な過程を扱うときに重要なモンテカルロ (MC) 法と MD サンプリング法の改良を主に行っています。直接的なアプローチでは極小点に “ 捉われる ” 傾向があり、アンサンブル全体を正確にサンプルすることができません。マルチカノニカル MC サンプリング、レプリカ交換、並列焼き戻し、マルチオーバーラップ MD 法などのアルゴリズムを発展することで役立ちました。アルツハイマー病の重大な側面であるアミロイド形成へのこれらのアプローチの応用を説明しました。

序文でも述べたように、分子研の理論グループにより取り組まれている問題の多様性はとても驚異的です。業績の質がとても高い事実がこれをさらに目覚ましいものにしていきます。私の総合的な発見は理論 / 計算グループが絶好調であるということです。唯一提言することは、将来の教員選定に際し、候補者の聡明な質と認識される創造性に焦点を当て続け、特定の話題性のある研究領域に (もちろん、理にかなった範囲で) 焦点をあてすぎないことです。私は学科や委員の類が研究の最も実り多い方向を予言しようとするのがとても下手なことを見てきました。むしろ、私の経験では最良の方向は最良の若手研究者が選ぶ方向です。