

庶発第1069号 昭和40年12月13日

内閣総理大臣 佐藤栄作 殿

日本学術会議会長 朝永振一郎

(写送付先: 科学技術庁長官・大蔵・文部両大臣)

分子科学研究所(仮称)の設立について

標記のことについて、本会議第44回総会の議に基づき、下記のとおり報告します。

記

分子科学は、分子の本性をその原子的構造および電子的構造に基づき明らかにするとともに、物質の物理的、化学的性質を分子レベルにおいて系統的に理解することを目的とする科学である。

分子科学は、科学の関連する各分野の研究の共通な基盤として、また、化学と物理学の境界領域の科学として、近年急速に発達したものであり、その重要性はますます高くなっている。化学研究推進の方策として総合的研究計画をたてるに当たり、分子科学の研究を強化することは、その性格からみて最も有効な効果が期待されるものである。特に、わが国におけるこの分野の研究は、世界の趨勢においても重要な地位を占めているが、さらにこれを強化し、ひとり国内のみでなく世界における関連分野の科学に貢献するためには、この際、新たに分子科学研究所を設立し、化学と物理学が一層強く協力することを可能とする買を設けることが最も適切な方策である。よって、ここに共同利用研究所として分子科学研究所を速やかに設置されるよう要望する。

分子科学研究所(仮称)設立趣旨ならびに設立案

[I] 設 立 趣 旨

(A) 分子科学の立場

今日の科学は極めて広範な経験則の集積に基づいて成立した科学である。しかるにその特徴は物質の構成単位である分子を対象の中心として展開された科学であるとみなすことができる。従ってもし個々の分子の本性を明らかにし、これに基づいて物質の性質相互間の変化の原理を理解することができるならば、それは化学の終極の目的に沿うものである。化学はこの線に沿って近年目覚しい進歩をとげつつあるが、その大きな原因は物理的方法を化学の研究にとり入れたことによると言っても過言ではない。すなわち、マイクロ波、赤外線、可視紫外線の吸収、核磁気共鳴吸収など各種の分光学的方法や、電子線回折、X線結晶解析、質量分析計などの物理的実験方法と共に量子力学に基づく理論的方法を分子に適用することによってその実体を正確に促えることが可能になりつつある。

化学における物理学的方法の導入とそれによって得られた目覚しい成果は必然的に化学と物理学特に分子物理学との緊密な連繋をもたらし、両者の融合した新しい境界領域の研究分野に発展した。すなわち分子科学とよばれるものである。

分子科学は分子の個性をその原子的構造および電子的構造に基づいて詳細に促えることを目的とするが、また同時にこれらの構造と物質の物理的、化学的性質との関係を研究するものである。従って化合物を研究対象とする化学の広い関連分野に対して最も基礎的知識を提供すると共に、

またその発展に役立つ方法論を分子レベルにおいて開発することが分子科学の役割である。

分子科学はその性格からみて、これが関連する学問分野は極めて広い。有機化学、無機化学をはじめとする化学の諸分科をはじめ、生物現象を分子レベルまたは原子・電子レベルで理解しようとする分子生物学もその基礎的方法論は分子科学に負う所が多い。さらにまた、分子科学は分子反応の基礎的研究やラジカルなど不安定な化学種の研究を通して一見無関係と思える大気上層の科学的研究とも関連している。特に分子科学の主要な目的である分子の個性の研究が進むときは新しい興味ある物質の開発が期待され、種々の合成材料を生み出すための分子の設計が可能となり、またレーザーの如き分子のエネルギー準位を利用した新技術の発展において分子工学と言うような新しい応用分野の展開が期待される。すなわち分子科学は種々の関連分野の研究の発展に寄与するのみでなく、また応用分子科学とも言うべき広範な研究分野につながりをもつものである。

(B) 海外における研究状況

分子科学の研究は、米国、英国をはじめ欧米諸国において活潑に行なわれており、毎年米国 Columbus の Ohio 州立大学で開かれる Columbus Meeting はこの分野の研究者の集まりとして世界的に広く知られている。また I U P A C の主催でこの分野の国際的な会議が隔年に開かれており、1962年の国際会議はわが国で開催された。その他量子力学の化学に対する応用、分子分光学、分子性結晶、有機半導体などの国際会議が世界各地で開催されている。

恒久的な研究施設としては、英国では第二次大戦前から Cambridge 大学に Department of Theoretical Chemistry が設けられ、Lannard-Jones Longuet-Higgins らを中心にしてこの方面の研究と教育が活潑に行なわれている。また米国では Chicago 大学に Laboratory of Molecular Structure and Spectroscopy が、また Florida 州立大学には Institute of Molecular Biophysics が設けられているほか、各地の大学、会社研究所で多数の研究者がこの方面の研究に従事している。

カナダの National Research Council も現在の時点におけるこの方面の研究の中心の一つで、分子分光学、分子性結晶、気相反応など分子科学の主要な分野において集約的な研究態勢が整っており、その研究成果には注目すべきものがある。その他フランス、スウェーデンにおいても分子科学に関した研究所または研究グループが活潑な研究を行なっている。

(C) わが国における研究の現状

わが国では、水島三一郎教授を中心とした分子内部回転の研究、赤松秀雄教授を中心とした有機半導体の発見など世界的に知られた輝かしい業績が生れており、また分子科学の理論的部分にならな量子化学の分野においても分子の電子構造の計算において先駆的な研究が小谷正雄教授を中心に行なわれている。こうした輝かしい伝統の上に立って、化学における構造化学グループ、電子状態グループ、ラマン・赤外グループ、物理における原子-分子グループなど、それぞれのグループに別れて活潑な研究が行なわれ、個々のグループについて言えば世界的に高く評価された多くの重要な研究が発表されている。またこの分野の研究を志す若い研究者も多く、研究者の層も永年と共に厚くなりつつあり、分子科学は化学においてわが国で最も進んだ研究分野となっ

ている。しかしながら、分子科学の研究分野が化学と物理学にまたがったいわゆる境界領域に属している関係もあって、各研究グループ間の連絡を密にするための研究態勢の整備は遅れていたと言ってよい。したがって上にあげた諸研究をはじめこれまでの勝れた業績は不利な環境にも屈しない個々の研究者の努力に負う所が大きいと言われざるを得ない。

特に近時の核磁気共鳴吸収や電子スピン共鳴吸収の研究にみられるように、新しい原用の発見や新しい研究方法の開発が、化学の研究に予想外に大きな影響をもたらすこと、ならびに基礎から応用に発展する時間が驚くべき程短縮化されている世界の現状にかんがみ、分子科学の研究者は化学と物理学との研究の緊密化ならびに集約化の必要性を痛切に感じている。

〔Ⅱ〕 分子科学研究所設立に対する要望

化学研究連絡委員会は化学研究を推進する方策に関し将来計画をたてるためにすでに数年にわたって検討をつづけてきた。その結果化学の将来計画の一環として分子科学研究所をまず設立することが適当であるとの結論に到達した。これを要望する理由を要約すれば次の如くである。

1. 分子科学は化学の各分野にわたり共通の基盤となるものであって、その研究の強化は各分野の研究に対しても貢献することが多いと期待される。

分子科学は歴史的観点からみて、いままさに急速な発展の段階にあるものと考えられるが、その進歩は予想を許さないものがある。幸いにこの分野の研究に関してはわが国の研究は多くの先駆的実績をもち、世界に定評のある有能な研究者をもっている。いまその研究体制を強化するならば、真に世界の科学の進展に強力に貢献することができる最も有望な研究分野であると考えられる。

分子科学の研究は従来各大学の講座を中心として、さらにグループ活動を通して行なわれてきた。すでに多くの誇るに足る業績をあげ、また多数の研究者をも養成した。さらにその研究活動を強化し世界の趨勢に応じてこれに貢献するためには特別の研究所を設立し、これを中心として一層の体制を強化することが、この際最も適切な積極的方策である。

4. 分子科学研究所の意義は次の如くである。

- (i) 分子科学の性格からわかる如く、新しい原理を見出し、研究方法を開発するためには化学と物理学とを包括して両者が一層緊密に協同できるような研究の場を提供するものである。
- (ii) 分子科学は化学、物理、生物学などにまたがる境界領域の学問分野であるから、大学の既設の講座、教室のわくを越えて関連分野の研究者が集り、知識の交流をはかるとともに、また若い研究者に対しては既存の学問分科にこだわらず分子科学に関する高い訓練をうける場を提供する。
- (iii) 分子科学研究の世界的趨勢として、分子線装置、閃光分光装置など特殊なかつ多額な経費を要する装置を必要とする。また電子計算機、分光器など分子科学の研究に広く使用される装置も大型かつ高精度化し、しかもこの傾向は今後ますます増大するものと予想される。このような大型の研究装置を備え維持し、また新しい原理に基づく独創的装置を開発するためには多額の経費と人員を必要とするが、これは従来の大学の講座の枠内では処理が困難であろう。しかもこのような大型装置は共同利用研究所に備えて関連分野の研究者が協力して利

用できることがのぞましい。分子科学研究所は世界の研究水準をさらに高めることを目標とする規模をもち、わが国の研究者に共同利用の場を提供するものである。

〔Ⅲ〕 研究所設立案

(A) 名 称

分子科学研究所（仮称）

(B) 目 的

分子科学研究所は、分子の原子的ならびに電子的構造を輻射場との相互作用など、主として物理的方法を用いて研究し、それぞれの分子のもつ個性を原子または電子レベルで正確に理解すると共に興味ある個性をもつ新しい物質を作り出すために必要な一般的法則を探索することを主な目的とする。同時に個々の分子の未知の個性をひき出し、それを基にして化学、生物学、工業化学などに応用できる新しい研究方法および研究対象を開発することも分子科学研究所の大きな目的である。

(C) 運営方針

- (1) 研究に関する研究者の主体性を第一義とする。
- (2) 研究所の運営にあたっては全国の分子科学研究者の意向を尊重するように充分配慮する。
- (3) 外部研究機関および研究者との協同研究、総合研究的プロジェクトを持つことができるようにする。

(D) 所 属

大学附置の共同利用研究所とする。

(E) 組 織

(1) 部 門（総計20部門）

1. 理論研究部（3部門）

分子基礎理論Ⅰ（原子・分子における多電子系の理論の基礎的研究）

” Ⅱ（具体的な原子・分子の波動関数の研究）

” Ⅲ（原子・分子と輻射場との相互作用の理論的研究）

2. 分子構造研究部（4部門）

分子構造学Ⅰ（回折実験を主とする分子構造の研究）

分子構造学Ⅱ（回転スペクトルの実験を主とする分子構造の研究）

分子力学（分子内部回転の研究、分子振動に関する研究）

分子場論（有機化合物および無機化合物の結合力の研究）

3. 電子構造研究部（4部門）

基礎電子化学Ⅰ（電子スペクトル、e Q c、双極モーメント、旋光分散などによる分子の基底単位の電子構造の研究）

基礎電子化学Ⅱ（吸収スペクトル、けい・りん光スペクトルなどによる分子の励起エネルギー単位の電子構造および電子移動やエネルギー移動の研究）

磁気電子化学（NMR、ESR、磁気旋光など磁場との相互作用による分子（三重項状態

を含む)および遊離基の電子構造の研究)

量子エレクトロニクス(レーザーなど分子のエネルギー準位の応用に関する基礎的研究)

4. 分子集団研究部(4部門)

物性化学Ⅰ(分子間力および分子性結晶の光学的ならびに電磁氣的性質の基礎的研究)

物性化学Ⅱ(有機半導体の合成およびその化学的ならびに物理的性質の研究)

基礎光化学(励起分子,遊離基など光によって生ずる活性分子種の構造に基づく光化学反応の研究)

分子集団動力学Ⅰ(分子線,質量分析計などによる反応の基礎的研究)

分子集団動力学Ⅱ(速度論,同位体交換などによる置換反応および電子授受反応機構の研究)

5. 応用分子科学部(4部門)

生物分子科学((蛋白質など巨大分子の高次構造に関する研究)

無機分子科学Ⅰ((錯体の構造と物性の研究)

無機分子科学Ⅱ((新しい非遷移元素化合物の合成および構造の研究)

有機分子科学((有機金属化合物の構造と物性の研究)

(2) 室(総計4室)

電子計算機室

極低温室

化学分析室

装置開発室

(註) 上記の部門及び室はできるだけ固定しないようにし,いくつかの部門が相互に密接な関連をもって研究を進めるようにする。また研究領域の発展と変動に伴い部門および室の再編成などによってできるだけ機動的に運営されるようにする。この他に図書室および事務部を置く。

(F) 人員

(1) 部門の構成人員

教授1・助教授1・博士研究員3・助手2・技官および技術員4・秘書1・1部門の構成人員は12名。20部門の小計240名。

(2) 室の構成人員

1. 電子計算機室(14名)

技官3・技術員6・パンチャー5

2. 極低温室(12名)

技官2・技術員10

3. 化学分析および試料調整室(5名)

技官2・技術員3

4. 装置開発室(15名)

技官4・技術員11

以上4室の小計 46名

(3) 図書室の構成人員

司書(事務官)3、事務員5

(4) 事務部の構成人員

事務官15、技官5、事務員10、雇員15

以上事務部の小計 50名

(5) 人員総計 344名

(内訳) 教授20、助教授20、博士研究員60、助手40、技官(部門構成は技官2、技術員2として)56、事務官18、事務員35、技術員80、雇員15

(g) 設備費

(1) 一般設備費

各実験部門当り	30,000千円(×17)	小計	510,000千円
各理論部門当り	6,000千円(×3)	小計	18,000千円
		計	528,000千円

(2) 主要種別設備費

No.	機種設備品目	基数	金額
1.	分子線装置	2	65,000千円
2.	閃光分光装置 (大型回折格子分光器を含む)	2	60,000
3.	パルス磁場実験装置	1	20,000
4.	光イオン質量分析計	1	55,000
5.	量子エレクトロニクス装置	1	50,000
6.	極端紫外分光器	2	30,000
7.	軟X線分光装置	2	40,000
8.	マイクロ波実験装置	3	30,000
9.	遠赤外分光器	2	40,000
10.	自記X線回折装置	1	100,000
11.	電子回折装置	2	20,000
12.	マイクロフォトメーター・カウンター	1	10,000
		計	520,000

(註) 上記特別設備品目は一部のものを除いてはどれも高性能で、しかも特殊実験のための基礎設備となるものであるから、既製品を購入するよりもむしろ試作品として製作を発注購入することが望ましい。

(3) 図書室設備費 40,000千円

(4) 電子計算機室設備費* 800,000

(大型および中型電子計算機)

(5) 極低温室設備費 50,000

(液体窒素、液体ヘリウム製造装置)

(6) 化学分析および試料調整室設備費	1 0 0, 0 0 0
(7) 装置開発室	1 3 0, 0 0 0
(8) 検査及び測定機械類	5 0, 0 0 0
(9) 一般器具計器類	4 0, 0 0 0
計	1, 2 1 0, 0 0 0 千円
設備費総計	2, 2 5 0, 0 0 0 千円

(H) 建築物 (1単位10坪として算定)

(1) 研究部門関係	基準	1部門当り	20単位	200坪(部門数20)
	延坪総計		400単位	4,000坪

(2) 共通研究施設関係

No		実数	単位	単位合計	延坪数
1.	電子計算機室	1	10	10	100
2.	極低温室	1	15	15	150
3.	化学分析室	1	5	5	50
4.	装置開発室	1	13	13	130
5.	特別共同実験室	10	2	20	200
6.	図書室	1	15	15	150
7.	輸講室	6	1.5	9	90
8.	大講義室(200人用)	1	15	15	50
9.	小講義室(50人用)	3	3	9	90
10.	大会議室(60人用)	1	5	5	50
11.	小会議室(20人用)	2	2	4	40
12.	食堂	1	10	10	100
13.	電源室	1	4	4	40
14.	空気調節室	1	5	5	50
15.	所長室	1	2	2	20
16.	事務部	未定	未定	20	200
			計	161単位	1,610坪
	建築物延坪総計			561単位	5,610坪
	平均単価13万円/坪として建築関係費			729,300千円	

* ただし大型電子計算機は電子計算センターなどの整備により十分目的を達することができるならば、単独で設けることに拘泥しない。