

7-1 研究顧問による点検評価

7-1-1 中嶋 敦 研究顧問

評価レポート（2018年1月29日）

私は2017年12月26, 27日に分子研で行われている研究の評価をおこないました。所長および、4つの領域と2つのセンターの主幹を含む10名を越える教授陣と会い、9つの全体総括の発表を聴きました。また、9つの研究室と3つの主な施設（計算科学研究センター、UVSOR放射光施設、装置開発室）を訪問し、12月26日夕刻には、分子研助教や博士研究員による研究ポスター発表に臨みました。去る2017年4月4, 5日の32件の口頭発表の内容とともに、今回の全体の発表や研究室訪問を通じて、分子研の各領域や各センターにおける現在の研究活動を理解するように努めました。以下はその評価報告で3つの部分から構成しました。1つ目の(I)では、近い将来に解決が望まれる分子研の活動状況に対する提言を行ない、2つ目の(II)では、各領域・センターと各研究者の研究活動についてそれぞれ検証しました。

(I) 分子研の領域・センターへの提言

1. 現在の研究活動へのコメント

詳細な提言とは別にいくつかの重要な点をまず述べたいと思います。第一に、分子科学研究所の研究活動はたいへん充実しており、川合眞紀所長の優れた指導力のもとに十分な支援と組織化が図られています。設定されている研究テーマはいずれも最先端の科学であり、その先見性は分野を先導しています。第二に協奏分子システム研究センター(CIMoS)やメゾスコピック科学の新たなセンターを構築している運営方針は、これからの分子研の研究業績を高め、国際競争力をもちうる戦略であると考えられます。それを裏打ちするように創造性溢れる共同研究が始まり、新たな最前線の研究を拓くことが期待されます。最後に、研究所も各研究者も分子研の研究人材をグローバルな視点で活性化されており、研究会合を通じて十分な意思疎通が図られています。この研究所のあり方は、国際性豊かな若手研究者を育む上でも十分に機能しています。

2. 一層優れた研究所に向けた提言

分子研における研究活動を一層優れたものにするために2つの提言を以下に示します。

1) 最先端機器の先鋭化と高度化

分子研の重要な役割の一つには、分子科学分野の研究を一層力強く進めるために分子研を訪れる研究者に最高レベルの研究機器を提供することがあります。分子研ですべての最先端機器を整備することは困難ではありますが、「分子研には最先端機器としてこれが備わっている」、という状況は期待したいと思います。具体的には、微細構造X線解析、高分解能質量分析、微小領域電子分光、高分解能プローブ顕微鏡など、どれかの手法で先端研究を牽引することが期待され、その手法の先鋭化と高度化を通じて分子研の研究者が一層の研究の高みを目指して頂きたいと思います。

2) 広い視野をもった若手人材の育成プログラムと戦略

これまでの分子科学研究所の努力の結果として、国内外の学部生や前期博士課程（修士）大学院生のインターンシップを通じて、若手研究者の育成につながる質の高いきっかけや動機付けが行われていることは高く評価できます。その結果、総研大への進学プログラムを利用した大学院生の獲得に結びつくことは、優れた結果であるばかりでなく、各研究グループの研究活動の充実にもつながる展望が開けていることは、特筆すべきことです。この取り組みが分子

研のすべての研究室に広がるのが望ましいですが、海外からの大学院生の場合には、博士取得後に母国に戻った際に研究活動基盤が確保できるかを意識するものであり、研究分野の必要性や成熟度に応じて、国ごとに志向する研究課題に偏りを生じることは避けられません。近年、増加している東南アジア諸国からは、材料系実験や理論系の比重が高いので、今後、欧米の諸国から先端計測系の研究分野にも人材育成が波及することが望まれます。人事交流では、長年の信頼関係が重要であることから、機関ごとの協定による交流の前に、個人ベースの研究交流が先行する必要があります。その実行の際は、所外プログラムを利用することはもちろん、所内での手当を惜しまない支援体制の構築と精神が醸成されると良いと思います。

また、併せて大事なことは、所内の他の研究室との研究交流を、大学院生はもとより、ポスドクにも推奨し、学術の多様化と柔軟性の確保に留意することは有効な施策であると考えられます。合同発表会に全員が顔を揃えることを最低条件にしつつ、座長などの役回りに大学院生の貢献を求めるなど、質の高い時間を共有する仕組みを運用するとよいかもしれません。研究の視点に複眼的な要素が加わることに加えて、仲間作りにつながる研究交流は、研究機関への心地よい所属意識につながる可能性も高まり、「分子研ファン」の増加につながることを期待します。

(II-1) 分子研の領域とセンターの構成について

A. 協奏分子システム研究センター

分子科学における分子と分子集合との階層間のロジックを解析し、新たな分子システムを創成することを目的としているグループで、研究課題の先端性と国際性は高く、また構成員の研究活動は極めて活発である。研究グループ間の交流を通じて、センターとして特に力を入れる課題を打ち出せるとセンターの意義は一層高まると期待される。

B. 物質分子科学研究領域

新たな機能分子とその集合体の創製を念頭に、これらの物理的、化学的特性の解明を先端計測手法の開発をしながら進める研究グループで、研究活動は活発で多くの共同研究から多岐にわたる研究成果を挙げている。新たに2名の准教授の公募を進めており、先端計測手法の観点から人選が進めば、さらに強力な研究領域になることが期待される。

C. 生命・錯体分子科学研究領域

分子科学の視点からタンパク質の構造と機能を研究するとともに、生体分子の機能に学びつつ無駄のない化学反応を実現することを目指している。各研究室の研究課題は先端的で国際レベルであり、研究活動は共同研究を含めてとても活発で、優れた准教授が多くいる。分子科学的な方法論の駆使という観点から、適切な高精度分光法などを用いた共同研究が進むと、分子科学研究所の特徴がさらに高まるものと期待される。

D. 理論・計算分子科学研究領域

本研究領域では、量子力学や統計力学に基づいて理論・概念を構築し、さらに、大規模コンピュータによる計算を行うことにより、分子ならびに分子集合体の様々な現象を分子レベルで解明し、新規な物性機能の予測を行っている。計算手法の開拓研究、実験グループとの共同研究の両面にわたって、国際的にも高いレベルの研究が進められている。最近数年間で人材の若返りが起こった中で、的確な人材登用が進められた結果が感じられ、センターとしての機能を充分果たしている。それぞれの成長によって学術の発展が楽しみではあるが、大学などへの人材流出へ対応などは、国家プロジェクトのAI指向への取り組みと併せて注意深い対応が必要であろう。

E. 装置開発室

装置開発室は、機器開発、電子機器開発、リソグラフィー微細加工、デジタルエンジニアリングの4つの部門からなり、それぞれ分子研内外のユーザーの最先端研究の要望に的確に応えている。今後の取り組みとして、ものを作らずに設計指針をシミュレーションする **Computer Aided Engineering (CAE)** への技術対応、電子描画によるリソグラフィー微細加工、従来のプラスチック材料に加えて金属材料の3次元プリンター、という3つを挙げている。これらのマイクロファブリケーションの拡充などの方策は、いずれも今後の研究発展に資する技術であり、工作機器類の高度化に伴ってスタッフの機器操作への習熟が重要である。また、的確な人材の登用と育成が、この新しい装置開発室の活動の充実の鍵であると考えられる。

F. 光分子科学研究領域

本分野では、X線からテラヘルツ波までの光発生のための大型放射光施設 **UVSOR** とともに、固体フォトリソ制御に立脚したマイクロチップレーザーなど、高性能な光源の開発を進め、その光源の利用によって分子及び分子集合体の物性・機能・反応の研究を展開している。計測手法の高度化とともに、反応の精密制御などの研究は先端的で、共同研究を含めて十分な活力を示している。

G. UVSOR 放射光施設

維持管理と装置の高度化について、研究者の目が行き届いている様子が感じられたが、決して余裕のある状況ではなく、予期しない装置トラブルの発生への対処や高度化へのスピード感の加速には、人的手当が必要であるように感じられた。

H. メゾスコピック計測研究センター

本センターは、新たな分子能力の創発を念頭に、ミクロとマクロの機能が相乗的に作用するメゾスコピック領域における分子の機能や反応過程を明らかにする研究を精力的に展開している。新たな物性機能の舞台の化学合成に加えて、物質スケールに適合化させた革新的な計測解析手法の開拓の先鋭化が生命線であり、国際競争に負けない研究体制作りが重要である。

(II-2) 個別研究者

1. 秋山修志教授 協奏分子システム研究センターセンター長

秋山教授のグループは、生物時計タンパク質の24時間の起源を反応素過程から解き明かす取り組みで大変ユニークな研究を分子科学の視点から展開しており、研究の意義は高く先駆的である。タンパク質時計の生化学的な活性測定、X線結晶構造解析や動的構造解析、分子動態計測、などの実験研究を軸に、研究所内の優れた理論化学の研究者と組むアプローチは合理的である。研究グループは小さいものの研究成果は活発に出されている。

2. 小林玄器特任准教授 協奏分子システム研究センター

小林特任准教授のグループは、二次電池などの電気化学デバイスを念頭に新規なイオン導電体の合成と物性計測の研究を展開している。とりわけ、水素原子アニオンであるヒドリドを導電の担い手とする固体電解質の物質を新たに合成することに成功しており、その高速イオン導電に着目して、さらに優れた特性をもつ物質合成が精力的に進めら

れている点は、特筆すべき点である。イオン導電のみならず物質変換に関しても研究アイデアが豊富であり、研究グループの拡充によって更なる発展が見込まれる国際トップレベルの研究者の一人である。

3. 古賀信康准教授 協奏分子システム研究センター

古賀准教授のグループは、タンパク質分子の立体構造形成と機能発現の原理を解明することを目的として、そのためのタンパク質分子を新たに計算機上でデザインして生化学実験によって検証する研究を展開している。研究者一人一人が、計算と実験の両方を手掛けることによって、スピーディーな研究展開を重視している姿勢は、限られた研究資源の制約を克服しようとする戦略に基づいており、研究推進の力強さを感じた。タンパク質分子の構造変化に協同した機能発現を解明しようとする課題への取り組みは国際的にも優れていると考えられ、また、千葉大学や東京大学とも興味深い共同研究が進められている。

4. 横山利彦教授 物質分子科学研究領域研究主幹

横山教授のグループは、放射光を用いた優れた研究実績を基礎に、機能物質の素性やさまざまな測定環境に合わせて、動作下の燃料電池触媒や大気圧下の金属酸化状態を研究するための新しい分光手法を開発している。電気化学の反応下の白金触媒に対する硬X線光電子分光（HAXPES）や、新たに立ち上げたX線磁気円二色性分光などの手法開拓は、共同利用機関として極めて先端的な手法提供であり、実用技術の基礎としても重要な視点を見据えている。また、得られている学術的成果は優れており、播磨 SACLA などの外部機関との連携にも積極的で、重層的な研究活動を展開している。

5. 平本昌宏教授 物質分子科学研究領域

平本教授のグループは、有機太陽電池に関する研究を有機半導体材料の超高純度化を基礎として、高精度なドーピングとナノ構造デザインを駆使して、高い素子性能の実現を達成し、さらに発展させている。有機半導体のバンドギャップの制御に着目しつつ、基礎物性から素子性能までを見通した研究の視点は明快で、太陽電池をはじめとするさまざまな有機エレクトロニクス素子の実現に貢献しうる実用上の価値も高い、独創的な研究と判断される。

6. 魚住泰広教授 生命・錯体分子科学研究領域研究主幹

魚住教授のグループは、水溶液中で作用する精密な分子設計に基づく触媒（水中不均一系有機分子変換）や極めて高活性な金属錯体触媒を中心に極めて精力的に研究を展開している。これらの研究課題はこれまでの優れた研究実績を背景とした独創性の高いもので、グリーンケミストリーの視点を十分に実現した有機合成の研究において、その精密さが格段に高まり、優れた実用性の実証がなされている点は高く評価できる。

7. 飯野亮太教授 岡崎統合バイオサイエンスセンター

飯野教授のグループは、タンパク質でできた生体分子機械の作動原理と設計原理の解明を目的として、金属ナノ粒子を用いて生体分子機械の動きを単分子検出で可視化する研究を展開している。ユニークな金属ナノ粒子の活用を提案しており、観測と解析は容易ではないかもしれないが、非天然の生体分子機械の創製につながる生体分子機械の動作原理を詳細に明らかにできる期待がもてる。

8. 正岡重行准教授 生命・錯体分子科学研究領域

正岡准教授のグループは、人工光合成システムの構築を目指して新しい金属錯体の合成研究を精力的に展開している。酸素発生の触媒として鉄5量体の発見を基礎として、水分子をはじめとして、窒素分子、二酸化炭素など、活性化の難しい小分子の利用を可能とする金属錯体を精密合成する研究が精力的に進められ、海外留学生を含めて研究室にも活気が溢れている。生体酵素のクラスター骨格の例から考えて、標的としている合成対象は合理的であり、新たな金属クラスター骨格の触媒が見出される期待が高い。

9. 榎山儀恵准教授 生命・錯体分子科学研究領域

榎山准教授のグループでは、金属フリーの新たな有機触媒の設計とその触媒による合成研究が展開されている。これまでの豊かな研究実績を基礎に、新たに独自の世界を構築する途上にあり、研究成果の論文発表はこれからではあるものの、その研究成果は着実に生まれている。反応機構の解析を所内の理論グループとも精力的に進めており、新たな知見は分子分光学の上からも興味の対象となると期待される。研究成果について話を聞くのは今回が2回目であるが、研究の進展とともに話し方に自信がみなぎってきたことはたいへん頼もしい。

10. 斉藤真司教授 理論・計算分子科学研究領域研究主幹

斉藤教授のグループは、液体や生体分子系などの多体分子系の理論研究から、系の揺らぎ、揺らぎによる物性や機能などの研究を展開している。解析が十分になされていない多体問題に対する理論的な機構解明を進める課題では、課題設定にセンスの良さが感じられ、生体分子機能、水の異常熱力学特性などの研究はいずれも迫力ある本質的成果につながっている。実験研究の連携にも意欲的であり、理論化学を国際的に先導する中心的役割を果たしている。

11. 江原正博教授 計算科学研究センター

江原教授のグループは、極限環境下や溶媒中の化学反応を取り扱うための電子状態理論の開発とともに、電子状態理論を様々な化学現象に適用しながら、新しい化学概念の構築に取り組んでいる。電子状態理論計算の適用範囲は、光機能分子の励起状態ダイナミクス、不均一系の合金ナノクラスターの触媒作用、生体分子の電子励起状態解析、など非常に幅広く、実験研究との連携はきわめて真摯であり、それぞれの課題で優れた研究成果を挙げている。とりわけ、理論化学の活用による現象解明に大いに貢献していることは、理論計算の重要性の実証はもとより、化学現象の本質を理論的に見極める眼力が優れていることの証左である。

12. 石崎章仁教授 理論・計算分子科学研究領域

石崎教授のグループは、凝縮相における化学動力学の理論研究を独自のアイディアに基づいて推進している。光合成光捕獲系の動作機構に関する生物物理を、量子動力学理論によって解明する研究において、実験研究者とも連携して優れた実績を挙げており、その成果を基礎とする今後の発展は大いに期待される。国際学術研究からの手厚い支援を受けながら、光合成光捕獲系の構造ダイナミクス、エネルギー散逸、消光といった過程を、単分子分光の実験研究者との連携しつつ、理論を構築する研究を進めることは、今後も学術的に優れた成果を生み出すものと大いに期待される。

13. 奥村久士准教授 計算科学研究センター

奥村准教授のグループは、新しい分子動力学シミュレーションの手法開発を基礎に、タンパク質の構造と物性を明らかにする研究を展開している。タンパク質のヘリックスのミスフォールディングに起因する病気の機構解明を視野に、分子動力学シミュレーションを用いてアミロイド線維の動的挙動を解き明かすために、Replica Exchange 法や Replica Permutation 法などの新たな MD 法の開発を含めた理論研究を展開しており、研究の位置づけと方針は独創的で明確である。比較すべき定量的な実験の困難さに加えて、自ら行う計算の長時間化によって、現象論的な議論が中心になりがちであるにもかかわらず、アミロイド線維の形成に関する本質が解き明かされつつあることはたいへん頼もしい。

14. 柳井 毅准教授 理論・計算分子科学研究領域

柳井准教授のグループは、多電子波動関数理論とその光化学への応用に関する研究を、密度行列繰り込み群 (DMRG) 法を基礎として様々な化学現象の理解につなげる独創的な研究を展開している。計算の方法論の開拓、構築とその進展に合わせて、実験科学との連携にも積極的に取り組んでおり、これらの研究活動を通じて、多電子理論に基づく国際的に注目される成果を挙げている。

15. 大森賢治教授 光分子科学研究領域研究主幹

大森教授のグループは、量子コンピューティングや化学反応制御、さらには量子論の実験的検証までを念頭に、物質の波動関数の干渉を光で制御する先端的研究を展開している。高精度なアト秒レーザー光の発生手法と極低温のアルカリ金属集合体の生成手法とを組み合わせ量子波束エンジニアリングを実現し、高速量子シミュレーターを構築する研究は、独創性が高く、分子科学研究所の誇るべき優れた研究の1つである。また、国際的な研究連携の研究レベルも高く、この学術領域を牽引している。

16. 解良 聡教授 光分子科学研究領域

解良教授のグループは、弱い分子間力で集合した有機分子固体や有機薄膜の電子物性を精密に評価する研究を展開している。丹念な試料作りと精緻な分光手段との組み合わせによる高い実績を踏まえて、UVSOR 光を基礎とする各種光電子分光装置を利用して、有機分子と固体表面の界面における相互作用とその電子状態を高精度に評価することに成功している。また、表面化学関連分野の周辺技術を取り入れることにも積極的で、厚みのある優れた成果を挙げていくことが期待される。共同利用施設として運営でもその信頼は厚く、共同研究においても優れた成果を挙げている。

17. 岡本裕巳教授 メゾスコピック計測研究センターセンター長

岡本教授のグループは、ナノ物質と光の相互作用を巧みに用いてナノ物質のカイラリティーとそれに付随する磁気的性質を明らかにする先駆的研究を展開している。プラズモン共鳴励起に伴う光電場を近接場円二色性によって可視化することに成功するなど、研究手法や考え方は独創的で、研究グループのサイズは小さいが、研究活動は活発で優れた成果を挙げている。

18. 平等拓範准教授 メゾスコピック計測研究センター

平等准教授のグループは、光学材料の性質をミクロンオーダーで精密制御することによって、レーザー光を発生で

きる「マイクロ固体フォトンクス」の研究を展開している。この手法は高輝度レーザーや極端パルスの開発につながるなど、その技術レベルは世界的に注目されている。目的とするフォトンクス材料の創製のためにマイクロ固体として、精密なマイクロ周期構造の構築と希土類イオンのドーピング構造体の構築を進めている。国際学術論文の公刊にも注力しており、研究活動は十分なされている。実験室の案内は大変丁寧で、この技術開発の重要性を相手が理解できるように説明する姿勢がとても好印象だった。

7-1-2 Hrvoje Petek 研究顧問

The Advisory Committee thanks the IMS Director, Faculty, and Staff for a productive review.

The presentations were organized according to different Centers and Departments, with the head of each unit providing an overview of the ongoing research, and the purpose for existence and function of the unit. What was missing universally how each unit is contributing to the advances in molecular science, though the purpose of some units is to support other research groups inside and outside of IMS, rather than to perform research at the forefront of molecular science.

The structure of various centers at IMS has evolved over a long time with the Center for Mesoscopic Sciences being established most recently. From the themes of the Centers it is clear that someone envisioned a long time ago how IMS could continue to be a significant player in the field of molecular science if the goals of the center were actually pursued. Based on the themes, I think if the envisioned research were really pursued, IMS would be making significant contributions. However, what we experienced are different commitments by the center leaders and members to the function of each center. For the most part, the group members are pursuing their own research interests, regardless of the center theme. In part, this is driven by the funding. If a group leader obtains significant outside funding to perform such a research topic that is not directly related to the center theme, it is appropriate to carry out such research. Another model would be for group leaders to join together and use the strength of the center to seek outside funding on a topic related to the center theme. In fact, the purpose of the center should be to facilitate such interactions and to enhance the possibility of obtaining such funding.

What I found is that there is little ongoing research that is focused on the current popular topics in molecular science. Personally, one topic that I find very exciting is the research on quantum materials where the molecular structures of a solid-state material impart special electronic properties that are generally unavailable and rare in most materials. For example, two-dimensional materials such as graphene and chalcogenide semiconductors have special electronic properties related to electron spin and charge that exist only when a material is a single molecular sheet. This is clearly not a strong theme at IMS, but I find the center goals to be more ambitious and longer term; they may not be fashionable now, but progress at IMS could make them one of the growing fields in molecular science and thereby make IMS a center of excellence for such research. For that to happen Centers and Center leaders should advance the center goals, rather than to promote unrelated strengths. For the center theme research to thrive, the research funding could be allocated to topics, which are proposed by several center principle investigators, and contribute to the center theme.

What I found disappointing, was when center leaders could not communicate the research and role of each principle investigator to the center theme. This made it clear that the center leader does not himself believe in the center theme. If that is the case, the center

leader should strive to change the center theme, so that it suits better the center member's strengths or interests. A center is failing, however, if the center leader is mainly interested in pursuing his/her own research, rather than leading the center. Perhaps, in that case it is best for the center leader to step down and a new one to be appointed. This is also a good time to reevaluate the center themes and goals, and how they are being achieved.

It is important to reevaluate the center themes after some time. After some time, the center theme may be successfully accomplished or prove to be too difficult. Other themes where IMS has strength may emerge and provide new targets for new centers. It is important to have a continuous turn over in research themes as faculty leave for other positions, retire, and new faculty are hired. The hiring of new faculty is particularly important, because they bring in new ideas and topics, which should be made to flourish. Hiring should be made with a clear strategy of how a person can contribute to IMS by bringing in new ideas and expertise. When someone is hired, they should be provided the resources to establish their research quickly so that the ideas that they bring in can be put into action and not be realized elsewhere.

It is important for IMS to be a dynamical research institution, which can respond to developments and lead research in molecular science. I believe, that when IMS was established the policy of no internal promotion was instituted to make it a more dynamical and rapidly evolving research institution. This has made it an attractive institution in Japan for persons at the Associate professor level to establish their research careers and move on to other leadership positions in Japan. Associate Professors can make IMS and incubator for new ideas and research directions in Japan. One would hope that Professors would also have similarly impactful roles, but in addition, they should also nurture and guide the advance of young scientists in their department.

When I first decided to go to IMS as a postdoctoral fellow 32 years ago, IMS was a leading international institution in Molecular Science. Although I heard about very successful internship opportunities at IMS, I did not see much evidence that IMS attracts the top researchers or faculty, who come to advance their careers by a longer stay at IMS. There should be ample internal resources to support international collaborations, as well as stronger effort to use the existing government resources to attract visitors. One way to easily judge the IMS perception in the field of molecular science is by how many top international scientists can be attracted to spend some time in Okazaki, and how many IMS scientists have international research experience and collaborations.

Another tradition at IMS that should be renewed and strengthened are the Okazaki conferences. They are an excellent venue to open up IMS to the Japanese and international research community, to show the strength of IMS research, and to build new avenues for international collaborations. The lack of new initiatives and paucity of seminars and colloquia is not encouraging. IMS faculty need to be more active in communicating their results and exchanging ideas with research leaders in their field.

IMS has always provided unprecedented opportunities for leaders in molecular science to pursue and develop their research interests. This can best be accomplished by engaging their center leaders and director in communication. IMS researchers should use the available and substantial resources to advance their fields and the resources should be provided based on evidence of contributions to molecular science within IMS and in the broader community.