

4．点検評価と課題

分子科学研究所は、1993年から3年毎に外部評価委員による点検評価を行い、その報告が分子研レポートに掲載されている。本年度は第3回の外部評価が、6研究系および、錯体化学実験施設に対して実施された。分子科学の指導的立場にある6名の外国人研究者が、多忙な時間を割いて岡崎を訪れ、数日のインタビューによつて的確な評価をされたことに篤く感謝する。研究の第一線で活躍されている、国内の著名な研究者による外部評価でも、分子研が四半世紀の歴史を持つ現況を踏まえ、共同利用研究機関としての在り方を含め、多くの貴重な御批判、御意見をいただいた。

国内外いずれの評価においても、分子研での現在の研究水準については、高い評価が与えられている。分子科学の発展の指導的役割を果たす意味で、さらに野心的、意欲的な分野開拓型研究を期待する声が大きかったことが印象に残る。このためにも、分子研の研究者が、所の内外と協力して発展的な研究を行うことが重要である。

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るべきである。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对象自体、線形から非線形に大きく拡張した。このような理論的發展を踏まえて、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考えます。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

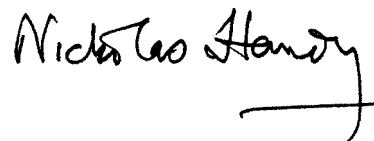
postdoctoral positions to be advertised once they are awarded. It is recommended that the procedures for postdoctoral appointments is re-examined.

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。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が見てとれます。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。

4-2 分子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成11年11月8日

委員 田隅 三生（埼玉大理，教授・理学部長）

志田 忠正（京大院理，名誉教授）

藪崎 努（京大院理，教授）

北川 禎三（分子研，教授）

オブザーバ 森田 紀夫（分子研，助教授）

加藤 立久（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成11年12月13日～14日

委員 Professor Wolfgang Kiefer (University of Würzburg)

4-2-1 点検評価国内委員会の報告

分子構造系の将来・展望

所内委員D：分子構造研究系の現状を説明します。第一部門の齋藤教授が3月で退官され、後任人事を行いました。しかし人事部が決定した候補者を招聘することに失敗しました。現在このポジションは空き枠になっています。研究所全体の現状としては、三研究所合同の研究センターが発足し、基生研所属のセンターとなっています。この研究センターの発展としての統合バイオサイエンスセンターを概算要求中です。まず、系の再編成ということを含めて分子構造系の将来を議論していただけないでしょうか。

所外委員B：分子構造系の今後や、分子研の将来に対する意見は、3年前に述べた内容と何ら変わりがないと思います。歴史的には高分解能分光がこの研究系のキーワードになってきたのだから、高分解能分光の現状評価と将来展望を行ってみては如何ですか？

所内委員D：それではこの研究系の分野として高分解能分光を今後も生かして行くべきか否かを議論してください。

所外委員C：最近世界的に高分解能分光を基礎とし、原子や分子を制御する研究など、新しいものへの応用として広がりつつある。それは化学と物理の接点として重要である。

所外委員A：コロバスマーケティングなどの出席者を例にとって、高分解能分光の人口は増加しているのでしょうか？

所外委員C：物理の分野では人口は増えていない、他分野への広がりや変化している。

所外委員B：高分解能分光の人口は増減していないでしょう。しかし、米国内では高分解能分光の分野として悲観論はない。落ち着いた安定した学問であって、安定感がみられる。その上で岡先生や天野先生のような天文学への進出が盛んである。つまり、基礎がしっかりしているがゆえに、変幻自在に変化・発展している。その点日本の学会では、他への応用など他分野への進出がうまくいっていない気がします。

所外委員A：人口は増加していないにしても、内容が大きく変わってきているのではないですか？ クラスタや天文学の問題へと。

所外委員B：高分解能分光としての方法論はほぼ完成して進歩は止まって、今後新しい応用への展開を模索していくことが必要でしょう。

所内委員D：「分子構造研究系」という名前を捨てるような改組も頭に入れた、系の再編成についてはどう考えられますか？

所外委員B：基礎分子科学として何が重要なのかという観点から、高分解能分光（分子構造）が必要かを徹底的に議

論すべきで、名前の問題は二次のような気がします。

化学者として分子間相互作用を正しく人々に知らしめることが仕事と考えます。たとえば水中のタンパク質の問題でも、生物学者や薬学者に対して化学者はそこに働く分子間相互作用の正しい姿を教えているのでしょうか？ 物理化学者のやり方が荒っぽく、解ることだけを解るように説明してきたし、例えば分子軌道法などでは状態のエネルギーですべてを片づけてきた。そこに安住しすぎた感がある。

所外委員 C：確かに、日本の化学者はよく解らないことに興味を示さないようです。例えば、液体 He 中の分光を行うと、よく解らない分子間相互作用や反応がいっぱい見つかるのですが、化学者は興味を示さない。

所外委員 B：化学者は保守的です。各論的で、安定感のあるところに満足している。

所外委員 A：創立当初の分子研の旗頭は「極限に挑む」でした。最近この旗頭がボケてきていると思います。

所外委員 C：分子研は保守的であってはならない、チャレンジングであるべきです。

所外委員 B：創立当時はもっとチャレンジングでした。若い人に機会を与えるべきです。

所外委員 C：若い人たちが必ずしも、保守的ではなくチャレンジングかという疑問ですね。今はお金で買える装置を使って研究をして、本当のオリジナリティーが欠けている。また、新しい物を作らなくなった。他の人の良い仕事をフォローしたがる傾向がある。

所外委員 B：オリジナリティーの定義をそこまで厳格にする必要はないと思いますが、若い人が新しい物を作らなくなったことは問題です。それに数学的訓練が大きく不足している。

所外委員 A：それは大学にこそ当てはまると思います。

大学との区別

所内委員 D：それでは分子研と大学との住み分けについて議論願いますか？

所外委員 A：国立大学・研究所の特殊法人化が現実味を帯びてきている今、分子研は大学との差をはっきり打ち出すべきです。

所外委員 C：法人化は、基礎学問派は反対で、実学問派は賛成ですね。

所内委員 D：分子研も基本的には法人化に反対してます。大学の理学部と同じ立場です。プロジェクト志向型の研究は法人化に適しているが、基礎研究にとって年次計画で結果を求められても困ります。現在、分子研としては国立の高等研究所構想を考えています。

所外委員 B：法人化に反対して、例外的存在が可能であるならば高等研究所構想はおもしろいですね。しかしそのためには、建物、人材などそれなりの『器』が必要ではないですか？

所外委員 A：それに高等研究所であるためには、外からのサポートが必要でしょう。

所外委員 B：外の大学からのサポートが難しければ、ヨーロッパとの連合高等研究所構想などはできないでしょうかね？

所内委員 D：21世紀の構想のなかで、税金を使っていることへのアカウンタビリティーが必要な気がしますが、どう考えられますか？

所外委員 B：納税者（一般大衆）へのアカウンタビリティーは必要ないでしょう。

所内委員 D：しかし、天文学などは一般大衆へのうまいアピールで多額の研究費を獲得しています。

所外委員 B：ライフサイエンスの領域を、分子研レベルの分子科学まで引き上げるような努力をすれば良いのではないですか？

所外委員 A：生物学・生理学の問題を分子科学として分子研が取り上げるという考えは20年前なら良かったが、今が

らでは手遅れですよ。現在の遺伝子操作・発生分化操作技術は、分子科学基礎レベルで説明できるようなものから遙かに先を走っています。生物の上流だったはずの物理学・化学が、今は下流になりつつある。

所内委員D：環境科学に対する分子科学の貢献が可能ではないでしょうか？

所外委員A：大変どろくさい研究になって、研究所全体でやれますか？

所外委員B：それに、環境科学の研究所はすでに2つありますので、ずっと後発になります。

所外委員A：そう考えていくと、物質科学の分野に展開していくのがオーソドックスな展開方向ですね。系の改組を考える考える前に、研究系を越えた共同研究プロジェクトを進めては如何ですか？

所外委員B：確かに系を越えた共同研究による、変幻自在なアメーバー的プロジェクト研究を推し進めるのは良いですね。研究テーマによって協力する系の組み合わせが自在に変わっていくようなプロジェクトです。

所外委員A：これまで、本気でこのような系を越えた共同研究プロジェクトを考えた人がいなかったのではありませんか？ 系を越えた共同研究プロジェクトを強くひばっていく人が必要です。

人事問題

所内委員D：教授人事で教授にきてくれる人が少ないという問題はどうお考えですか？

所外委員C：教授候補者が分子研へきたがらないのは、もうすでに研究や研究体制がかなり確立したシニアな人を選んでいるからではないのですか？

所外委員A：分子研の教授人事選考の方法が硬直化しています。固すぎます、柔軟性に欠けていると思います。もっと柔軟・敏速に人事選考すべきです。最初から書類審査に始まり、候補者全員の論文査読、等々すべての手続きを固くとっていく。これでは良い人を柔軟・敏速に採ることができませんし、時間の無駄です。

所外委員B：バイオセンターの件にしても、高等研究所構想にしても、それを推し進める上で「器」だけは確保してほしいですね。欧米の一流の研究施設をみるときに、分子研は研究所としてのインフラストラクチャーを堅持すべきです。

所外委員A：その通りです。経費削減のために研究者が草抜きをするなんてことはやめるべきですよ。

4-2-2 国内委員の意見書

委員A

評価委員会でとくに話題になったことが二つあったと思う。第一は、齋藤修二氏が定年で退職された後の人事に係り、高分解分光分野を分子研で今後どう取り扱ったらよいかという点であった。分子研発足以来、廣田榮治、齋藤修二の2代の教授が多くの輝かしい研究業績をあげ、分子研の名声を高からしめたことは衆目の一致するところであろう。そもそも高分解分子分光は分子科学の基幹的手法であり対象であるから、この分野で今後有望と目される人材がいるのなら、やはりこの分野は分子研として保持してほしいと私は思っている。しかし、どうしても適当な人材が得られないのならば、他の分野の有望研究者を当てることも止むを得ないであろう。

もう一つの話は、生体分子関係の分野を分子研で拡大すべきかどうかというものであった。私はこの問題について mixed feeling を持っている。私自身も生体分子の研究を行ってきたつもりなので（現時点ではほとんど行ってないが）、そのような視点から見て、分子研がこの分野を重視するのが遅かったと常々思ってきた。もちろん、分子研では北川教授がラマン分光によるヘム蛋白の研究で世界的な業績をあげてこられたが、分子研の相当大きな部分がこれからこの分野に参入するとなると、生物科学にどういう切り口で挑戦するのかよほど考えなければならない。生物科

学の過去20年間の進歩は恐ろしいほどのものがあり、分子科学に一番近い構造生物学も活気溢れる分野に成長している。分子生物学と薬学、医学との距離が縮小し、分子生物学自体も急速に変質しつつあるように見える。このような状況下で、分子科学が本当に意味のある貢献ができるだろうか。個々の研究者がばらばらに自分が興味を持っていることを研究するだけでは、大きなインパクトは期待できない。ユニークな研究課題について組織的な研究を展開することができなければ、出遅れを取り戻すことは不可能であろう。よほどの覚悟がなければ出来ないことだと思う。

委員 B

分子構造研究系は気相での短寿命分子の高分解能分子分光と生体系の時間分光を中心としてこれまで先駆的な業績をあげてきた。この研究系の分野は分子研の研究の中でも最も基礎的な実験研究を指向したものであり、分子研が今後、どのように進展するかによらず、このような「基礎の基礎」をコアとして確保することは重要である。高分解能分子分光の実験手法は完成度が高いように見えるので将来的にはなばなしい発展が期待できないという見方もあるが、信頼性の高い分光データは今後とも分子科学の進歩を支えるものである。最近の星間分子に関する分光情報は狭い意味の化学の領域を抜け出て宇宙科学に大きな貢献をした。このような形が堅実な分子科学のあるべき姿の好例といえる。生体系や少数多体系での分子間相互作用の定量的な情報を含んだ分光データを得ることも、慶味な推論に基づいた議論より重要な作業である。生体系などに見られる微妙な分子間相互作用の解明にも結局、分子分光学的な研究が最も基礎になるものと考えられる。

これまでの構造研究系が辿ってきた道は大筋で正しいものであり、種々の外圧によって改変が迫られているように見える現在こそ、分子研が四半世紀をかけて築いてきた研究の路線に自信をもってよいと考える。しかし、勿論、現状維持にとどまることは許されない。そこで、仮にエージェンシー化が進み、運営の自由度が増すものとして、これを機に思い切った若手リーダーの登用を進めることが望まれる。また、快適な生活空間を含むインフラストラクチャーの整備に力を入れ、これによって欧米諸国から見ても真に魅力的な研究機関に発展すること、さらに、アジア地域の研究者との実質的で長続きのする研究交流を推進することが期待される。

共同利用研のあり方：

分子研の本来の目的の一つは、大学だけでは果たせない研究交流、人事の流動を促進することにあった。しかし、国立大学のエージェンシー化の流れが始まり、大学の事情が流動的な方向へ向いそうな現在、共同利用研としての分子研のあり方については率直に云って十分な見通しをもつことができない。ヨーロッパの各国とくにヨーロッパ連合に加盟の国々はいろいろな形での提携や共同作業を模索しつつあるように見える。この際はその動きをよく把握して参考になり得るものは取り入れる努力をしてみるのもよいのではないか。

委員 C

(1) 当該研究系の研究分野での分子研の役割、寄与と位置付け

当該研究分野での研究はレーザーを駆使した分光と関連する基礎科学（基礎化学、物理）が中心となっている。その面で、短期間の特定のテーマの研究が主流である分子研内の他の研究系とは異なり、長期的な視野を持った基礎的な研究を行うという使命を持っている。このような基礎科学の研究は、将来の分子科学に重要な寄与と位置付けを持っている。現在のこの研究系は少数のメンバーであるにもかかわらず、世界の最先端に行く研究がなされていると思われる。

(2) この分野の国内国外での研究分野としての重要度

この分野は国内、国外を通して現在最も重要な研究分野の1つである。例えば、当該研究系で推進している反陽子ヘリウムの研究は独創的で、我が国が誇る研究の1つである。またレーザー冷却を駆使した研究は分子科学においてますます重要になってくることが予想されるが、当該研究系で推進しているヘリウム原子のレーザー冷却の研究は日本で唯一のものであり、特に励起状態の冷却原子の衝突に関する立派な成果をあげている。

(3) 今後この分野の発展はあるか、どのような方向か

この分野の発展は従来以上に非常に期待できると思われる。特に原子や分子の運動を光や特異な環境のもとで制御することで、より高分解能に物質の状態を知ることができる。さらに、このような制御は新しい分子の生成（たとえば分子研の当該分野で行われている反陽子ヘリウムのようなエキゾチック原子分子の研究）などの新しい研究が期待できる。また、レーザー冷却などの新しい技術を用いた超低温下での分子分光、化学反応は分子科学の基盤となる今まで得られ難かった重要な知見をもたらすことが期待される。

(4) 分子研の当該研究系が今後、どのように進むべきか

上述したように当該研究系は分子研の中で、レーザー分光を基盤とした長期的な基礎研究を行うといった特異的な存在で、分子を化学の観点から研究する他の多くの研究者の中で、唯一物理学的な視野に立った研究が行われている。分子研全体のバランスから、この分野の研究者がもう少し多くなることを望みたい。

将来構想

(5) 分子研の共同利用機関としての現状と、将来への提言

分子科学における各種データをより充実し、これらの中心地となり、外部から用意にアクセスできるようにしていただきたい。また、上述のように、現在化学が中心となっている分子研の分野の枠を多少広げ、物理学、生物学の分野の分子科学者の増強を望みたい。

(6) 分子研に対する建設的批判、提言

良い研究所は若い研究者にとって魅力のある研究所である。優秀な若い人材を集めるには人事公募に内部からの研究者も応募できるようにしてはどうか。

4-2-3 国外委員の評価

原文

Report for Prof. Kato

The main scientific activities of Professor Kato are twofold:

(i) Site selective spectroscopy in the solid state applying Raman Heterodetection of Magnetic Resonance:

This elegant technique was already invented by Professor Brewer in 1983 at IBM in San Jose and has been exclusively applied to rare earth impurity ions in inorganic crystals until Professor Kato's work. The method combines radio frequency with optical frequencies in order to produce coherent states in atomic ions and by detecting the beating between the laser frequency and the anti-Stokes Raman signal produced in the system one is able to derive high resolution splittings in the Mhz range. While Brewer's group investigated the hyperfine splittings of the Pr^{3+} ion, Professor Kato extended this work to study the La^{3+} ion in two ways. First he tried to derive the splittings of the $^3\text{P}_0$ levels which are of the order of about 1 Mhz. Since the jitter of his laser is of the order of 1.5 to 2 Mhz he could not succeed for this study. However, most interestingly, he was able to find new signals in the range between 2 and 5 Mhz which he could interpretate to the contribution of different sites of the La ion relative to the Pr ion by calculating the magnetic dipole interactions.

A real breakthrough, however, was certainly the application of this technique to molecular crystals. By converting the technique in going from the ground state to the electronic state by the optical step and then using the radio frequency he could study high resolution splittings in the excited state in a molecular crystal and could measure for the first time the triplet exciton in 1,4-dibromonaphthalene using this technique. This led to an excellent publication in *Phys. Rev. Lett.*

(ii) Study of the molecular and electronic structure of radical ions of fullerenes and metallofullerenes by EPR and ENDOR measurements:

Particularly the investigations of metals inside the carbon cage and the chemical properties of such systems as a whole and as related to their chemical reactivity are of great general importance. By high field pulsed ESR he could study the metallofullerenes Sc@C82, Y@C82, and La@C82. Of special interest are also his studies by varying the size of the cage (C76 to C90) and the work on La in the two isomers of C82. Pulsed ENDOR measurements on these systems round up these investigations.

Further studies performed in Professor Kato's group are:

(iii) Double resonance spectroscopy using two phase-locked lasers:

The technique has already been set up and there will be very interesting experiments being done related to dephasing processes in excited molecules or phase controlled reaction dynamics in the future.

(iv) State correlated Raman spectroscopy for the elucidation of phase transitions:

Professor Kato has started with investigations of the orientational ordering in the ferro- and antiferroelectric liquid crystal molecule MHPOBC.

Both approaches (iii and iv) are of high scientific interest.

Report for Prof. Morita

The scientific work of Professor Morita and his group is related to fundamental physical problems mainly in the field of (i) laser cooling and trapping of neutral atoms, (ii) spectroscopy of atoms and ions in liquid helium, and (iii) laser investigations of an antiproton-helium compound, which he calls "atomcule." Their results have been published mostly in the leading physics journals *Phys. Rev.* and *Phys. Rev. Lett.*

To (i):

The main experimental achievement clearly is the construction of a magneto-optical trap (MOT) for metastable helium-3-atoms. While there has been several demonstrations of laser trapping of the bosonic isotope ^4He , laser trapping of the fermionic isotope ^3He has never been demonstrated before. By confining ^3He and ^4He in their respective MOTs, the Morita group was able to measure the ionization rate coefficients for Penning collisions between two cold He atoms and could therefore study the difference in cold collision dynamics. The interpretation of the isotopic difference is not trivial but could be interpreted by considering the various ionizing channels and the degree of degeneracy which is different for $^4\text{He}^* + ^4\text{He}^*$ and $^3\text{He}^* + ^3\text{He}^*$. Fairly good agreement between the experimental values of the ionization rates for $\text{He}(2s\ ^3S_1) + \text{He}(2s\ ^3S_1)$ collisions could be obtained whereas the agreement is not so good for $\text{He}^* + \text{He}^*$ collisions in the presence of laser light. This outstanding work could be published in *Phys. Rev. Lett.* There is a great challenge to use particularly the ^3He trap to perform Bose-Einstein condensation of fermionic atoms. Most impressive is the experimental set-up which contains a home-made single-mode cw ring LNA laser.

To (ii):

They have measured some excitation and emission spectra of Mg and Ca in liquid ^3He in order to observe interesting phenomena

which arise from quantum features differing between liquid ^3He and ^4He . In this context they have presented a new model of exciplex formation between Mg and He and found that this model is more suitable for understanding the dynamics in the studied transition than the bubble model used earlier.

Also very interesting results were obtained from the Yb^+ ions in liquid helium which were produced by laser sputtering. A double resonance excitation from the $^2\text{S}_{1/2}$ into the $^2\text{P}_{1/2}$ and $^2\text{P}_{3/2}$ states showed sharp emission only from the $^2\text{P}_{1/2}$ state because of fast relaxation from the $^2\text{P}_{3/2}$ to the $^2\text{P}_{1/2}$ state. The frequency shift as well as the linewidth in the observed double line structure for the D2 excitation spectrum could be explained by a theory involving a vibrating bubble model.

To (iii):

Most of the papers published during 1996 until 1998 of Professor Morita's group were on laser investigations of antiproton helium compound, an unusual species which is the first long-lived exotic atom containing hadrons other than normal protons and neutrons. On this new compound ("atomcule") laser spectroscopic investigations were performed in order to study its properties and dynamics. Of particular interest is their report on the first observation of laser-induced resonant annihilation. This work has been performed at CERN together with nuclear physicists.

Report for Prof. Kitagawa

The scientific achievements of Professor Teizo Kitagawa and his group in the field of biomolecular science are outstanding. The research activities of this group cover a very widespread area ranging from the development of special Raman techniques including picosecond time resolved resonance Raman (TR^3) spectroscopy and the construction of coherent light sources required for their particular research, up to a great many of very thorough studies of problems in biochemical science. It would be too much to summarize comprehensively all the work done by this group during the period from 1996 to 1999. In the following only a few selected investigations which were performed in Prof. Kitagawa's laboratories and which are regarded to have the highest scientific impact will be summarized:

- (i) In a very exciting contribution to „*Science*“ he reports on the direct observation of cooling of heme upon photodissociation of carbonmonoxy myoglobin. The formation of vibrationally excited heme and its subsequent vibrational energy relaxation has been monitored by applying picosecond anti-Stokes Raman spectroscopy yielding a vibrational relaxation time constant of 1.9 ps for the CO-photodissociated heme. This most important study allowed the direct observation of the vibrational energy flow through the protein moiety and to the water bath.
- (ii) Another most important work, which has been published very recently in *J. Chem. Phys.*, is related to the intramolecular vibrational redistribution (IVR) and intermolecular energy transfer (IET) in the (d,d) excited state of nickel octaethylporphyrin (NiOEP). While comparable work has been performed before for small molecules, this is the first detailed quantitative study of the time evolution of the two processes (IVR, IET) for large molecules in solution. By successfully applying picosecond TR^3 -spectroscopy the group demonstrated that their technique is very powerful to study the mechanism of vibrational energy relaxation.
- (iii) Very impressive work of the group – published in „*Biochemistry*“ – is also their study on the two quaternary structures of hemoglobin (Hb), called T (tense) and R (relaxed), which correspond to the low-affinity and high-affinity states, respectively, and whose typical structures are seen for deoxy and CO-bound forms, respectively. They examined the Fe-His bonding of α heme and the intersubunit interactions at the $\alpha 1$ - $\beta 2$ contact of α^{NO} -Hbs under various conditions with EPR and UV resonance Raman (UVRR) spectra excited at 235 nm, respectively. In particular, they present UVRR spectra for normal NOHb, the half-

ligated α^{NO} - β^{deoxy} , and the mixed ligated α^{NO} - β^{CO} in the presence and absence of an effector. From these studies they could derive valuable information on possible correlation between the Fe-His bonding of a hemes and intersubunit interactions at the α 1- β 2 interface for the quaternary structure change.

- (iv) Applying time-resolved (0.1 to 5 ms) resonance Raman difference spectroscopy Professor Kitagawa investigated the mechanism of dioxygen reduction catalyzed by cytochrome c oxidase (CcO), the terminal enzyme of the respiration chain of aerobic organisms. While extensive efforts have been made previously to elucidate the reaction mechanism of this enzyme using time-resolved absorption, cryogenic absorption, EPR, and non-time-resolved resonance Raman spectroscopy mainly by other groups, it has now been shown that the above mentioned technique applied by Prof. Kitagawa, is uniquely powerful for elucidation of the reaction mechanism of CcO, since only this technique is able to detect the vibrations of dioxygen and its reductive intermediates bound to the catalytic site during the enzymatic turnover. Their results —published in *J. Am. Chem. Soc.*— open a new page in understanding the mechanism of dioxygen reduction by CcO and its coupling with proton pumping. In a subsequent publication in the same journal, they explored the role of one of the four redox active metal centers (Cu_B) in the proton-pumping function of CcO by making use of time-resolved IR measurements.

Besides the above mentioned five papers which are of particular general interest and which rank as outstanding scientific achievements, Professor Kitagawa published another 41 papers in highly recognized journals during the last three years. He applies sophisticated experimental instrumentation to study a wide range of topical problems in the field of biomolecular science and fast dynamics of photoproducts in solution phases. The very high level of science performed in his laboratories has won worldwide recognition and I am sure that also other colleagues working in the field of Raman spectroscopy would join me to regard Professor Kitagawa as one of the leading scientists in the area of time-resolved Raman spectroscopy of biochemical molecules.

訳文

加藤助教授のグループに対する報告

加藤助教授のグループの研究成果は大きく二つに分けられる：

- (i) 磁気共鳴のラマンヘテロダイン検出による固体中のサイト選択分光

この手法は1983年にIBMサンノゼ研究所のBrewerによって創始されたものであるが、その応用はこれまで無機結晶中の不純物希土類イオンの分光に限られていた。この方法はラジオ波とレーザー光とを組み合わせる原子イオン中にコヒーレント状態を作り出し、そこからの反ストークス光とレーザー光とのビート信号を検出することによってMHzレンジの高分解能分光を可能にするものである。Brewerのグループはこの方法によって Pr^{3+} イオンの超微細構造の研究を行ったが、加藤助教授のグループはそれを La^{3+} イオンの研究に拡張した。まず最初に、僅か1 MHz程度しかない 3P_0 状態の分裂を観測することを試みたが、レーザーの周波数ジッターが1.5–2 MHz程度あったためこれは不成功に終わった。しかしこの実験では、非常に興味深いことに、2–5 MHzレンジに新しい信号が見出された。これは、磁気双極子相互作用の計算から、 Pr イオンの場合とは異なったサイトの La イオンからの寄与であると解釈することが出来た。しかし、最も画期的なことはこの方法を分子結晶に応用したことである。すなわち、この方法を逆ラマン型に転用することによって分子結晶の励起状態の超微細分裂を高分解能で分光することができ、その結果1,4-dibromonaphthaleneの三重項エキシトン初めて観測することができた。この傑出した研究は *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。

- (ii) EPRおよびENDORによるフラーレンおよび金属内包フラーレンのラジカルイオンの分子・電子構造の研究

炭素ケージの中の金属の研究やこのような系全体の化学的性質およびそれらの金属の反応性の研究は一般に非常に

重要である。加藤助教授のグループは高磁場パルスESRによって金属内包フラーレン Sc@C_{82} , Y@C_{82} , および La@C_{82} の研究を行った。特に興味深いことは、炭素ケージの大きさを変えて研究したこと (C_{76} から C_{90} まで), および C_{82} の二つの異性体について La を調べたことである。パルスENDORによる測定はこれらの研究をさらに深めた。

その他の研究：

(iii) 位相ロックされた2台のレーザーを用いた二重共鳴分光

この方法のための装置は既にセットアップを終えており、励起状態の分子の位相緩和過程や位相制御された化学反応に関する興味深い研究が将来期待される。

(iv) 相転移の解明のための状態相関ラマン分光

加藤助教授のグループは、強磁性および反強磁性液晶 MHPOBC における方向整列性の研究を始めている。

両研究ともに非常に科学的興味の持たれるものである。

森田助教授のグループに対する報告

森田助教授およびそのグループの研究は、主として (i) 中性原子のレーザー冷却・トラップ (ii) 液体ヘリウム中の原子・イオンの分光 (iii) 反陽子ヘリウム化合物 (atomcule) のレーザー分光研究というような基礎物理学的問題に関するものである。それらの研究結果のほとんどが世界的に評価の高い物理学雑誌である *Phys. Rev.* 誌および *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。

(i)に関する報告：

主たる実験的な成果は準安定ヘリウム 3 原子の光磁気トラップ (MOT) の達成である。これまでにボゾンであるヘリウム 4 のトラップはいくつかのグループで行われてきたが、フェルミオンであるヘリウム 3 のトラップは全く例がない。さらに森田グループでは、 ^3He と ^4He とをそれぞれのトラップに閉じこめて、冷却された原子同士の衝突によるペニングイオン化の速度定数を測定し、両同位体における衝突過程の差異を研究した。その差異の解釈は簡単ではないが、 $^4\text{He}^* + ^4\text{He}^*$ 衝突と $^3\text{He}^* + ^3\text{He}^*$ 衝突とで異なるイオン化チャンネル数と縮退度を考慮することによって理解することができた。この解釈に基づくイオン化速度の計算値と実験値とは、レーザー光が存在する場合の衝突ではそれほど良い一致は得られていないが、レーザー光が存在しない場合すなわち $\text{He}(2s\ ^3S_1) + \text{He}(2s\ ^3S_1)$ 衝突の場合はかなり良い一致が得られた。この傑出した研究は *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載されている。この ^3He トラップを用いるとフェルミオン原子のボーズ・アインシュタイン凝縮という大きなチャレンジが可能であろう。自作のリング型単一モードLNAレーザーを含めこの実験の実験装置には強い感銘を受けた。

(ii) に関する報告：

森田グループは、液体ヘリウム中の Mg および Ca 原子の励起スペクトルおよび発光スペクトルを測定し、液体 ^3He と ^4He とで異なる量子性に起因する興味深い現象を観測した。彼らはこの観測結果の解釈において、液体ヘリウム中に Mg と He とのエキサプレックスが生成しているというモデルを提案し、このモデルによって観測された遷移のダイナミクスを従来の単純なバブルモデルよりもうまく説明できることを示した。

レーザーパッキングによって液体ヘリウム中に生成された Yb^+ イオンについても非常に興味深い結果が得られている。 $^2S_{1/2}$ 状態から $^2P_{1/2}$ および $^2P_{3/2}$ 状態へのレーザー励起に対して $^2P_{1/2}$ 状態のみから狭いスペクトル幅の発光が見られた。これは $^2P_{3/2}$ 状態から $^2P_{1/2}$ への速い緩和が存在しているためである。それぞれのスペクトルに見られた周波数シフトや線幅およびD2線の励起スペクトルに見られたスペクトルの分裂は、振動するバブルのモデルによって説明することができた。

(iii) に関する報告：

1996年から1998年にかけての森田助教授のグループの論文の大部分は反陽子ヘリウム化合物のレーザー分光学的研究に関するものである。この極めて希な化合物は、普通の陽子や中性子以外のハドロンを含んだ初めての長寿命エキゾチック原子である。彼らはこの新しい化合物(atomcule)の性質やダイナミクスを調べるためにレーザー分光学的研究を行ったわけであるが、レーザー誘起消滅の初めての観測に関する報告はとりわけ興味深い。この研究はCERNにおいて原子核物理研究者とともに行われたものである。

北川教授のグループに対する報告

生体分子科学の分野における北川禎三教授およびそのグループの研究成果は傑出している。このグループの研究成果は、ピコ秒時間分解共鳴ラマン(TR³)分光をはじめとする特殊なラマン分光法の開発や彼らの研究に必要なコヒーレント光源の製作から生体分子科学における非常に多くの徹底した研究まで、極めて広い範囲にわたっている。したがって、このグループの1996年から1999年までの全ての研究を分かり易くまとめるのはたやすいことではない。このため、以下では、北川教授の研究室において行われたもののうち最も大きなインパクトを持つと思われるもののみを選んで総括する。

- (i) 「*Science*」誌に発表された非常にエキサイティングな論文の中で、carbonmonoxy myoglobinの光解離におけるヘムの冷却の直接観測を報告している。振動励起されたヘムの生成およびそれに続く振動エネルギー緩和をピコ秒アンチストークスラマン分光法によって観測し、COが光解離した後のヘムの振動緩和時間として1.9ピコ秒が得られた。この最も重要な研究成果は、蛋白の一部を通り抜けて水溶媒に至る振動エネルギーの流れを直接的に観測することが可能となったことを意味する。
- (ii) もう一つの最も重要な研究は、nickel octaethylporphyrin(NiOEP)の(d,d)励起状態における分子内振動再配分(IVR)と分子間エネルギー移動(IET)に関するものであり、これはごく最近*J. Chem. Phys.*誌に発表されている。同種の研究は小分子に関しては以前に報告されているが、溶媒中の大きな分子に対してこれらの二つの過程(IVR, IET)の時間発展を定量的に詳しく研究したのは初めてである。この論文では、ピコ秒TR³分光法を上手く適用した彼らの手法が振動エネルギー緩和のメカニズムの研究に極めて有効であることを実証して見せている。
- (iii) ヘモグロビン(Hb)の二つの4次構造に関する研究もまた非常に興味深い研究であり、それは「*Biochemistry*」誌に発表されている。それらの4次構造はT(tense)およびR(relaxed)と称されるが、それぞれ低親和性、高親和性の状態に相当していて、それらの典型的な構造はそれぞれdeoxy型、CO-bound型に対して見られている。彼らは、様々な条件下の α ヘムのFe-His bondingおよび α^{NO} -Hbの α 1- β 2サブユニット間の相互作用をそれぞれEPRと波長235 nmの励起光を用いた紫外共鳴ラマン(UVPR)スペクトルで調べた。とりわけ、イフェクターが有る時と無い時の両方に対してノーマルなNOHb, half-ligated α^{NO} - β^{deoxy} およびmixed ligated α^{NO} - β^{CO} のUVPRスペクトルが測定されたことは特筆される。これらの研究から、4次構造変化に対する α ヘムのFe-His bondingと α 1- β 2界面におけるサブユニット間相互作用との間の相関に関する有益な情報を引き出すことができた。
- (iv) 時間分解(0.1-5 ms)共鳴ラマン差分分光によって北川教授のグループは、好気性生物における呼吸鎖の最終酵素であるcytochrome c oxidase(CcO)の触媒作用によって引き起こされる酸素還元反応のメカニズムを研究した。これまでこの酵素の反応メカニズムの解明には、時間分解吸収法、極低温吸収法、EPR、あるいは非時間分解共鳴ラマン分光法などを用いて多くの努力が払われてきたが、北川教授によって用いられた上述の方法がCcOの反応メカニズムの解明のためには唯一有効であることが示された。すなわち、この方法だけが、酸素分子の振動や酵素

始動時に触媒サイトに結合している酸素分子の中間状態の振動を検出することができるのである。この研究の結果は *J. Am. Chem. Soc.* 誌に掲載されているが、CcO による酸素還元反応メカニズムおよび脱酸素還元過程とプロトンポンピングとのカップリングのメカニズムの理解に新しいページを開くものである。また、同じ雑誌に引き続いて発表された論文では、時間分解赤外分光測定により、CcO のプロトンポンピング機能における 4 つの酸化還元活性金属中心 (Cu_B) のうちの一つの役割が調べられている。

上に挙げた特に興味深くランクの高い 5 つの論文の他に、北川教授は過去 3 年の間に 41 報の論文を世界的に評価の高い科学雑誌に発表している。このグループは高度な実験装置を駆使して生体分子科学や溶液中の光反応生成物の高速ダイナミクスの分野における広範囲な問題を研究している。北川教授の研究室で達成された研究成果のレベルの高さは世界に良く知られており、北川教授が生体分子の時間分解ラマン分光の領域における世界の第一人者の一人であることはこの分野の誰もが認めるところである。

4-3 電子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月15日

委員 濱口 宏夫（東大院理，教授）
大野 公一（東北大院理，教授）
西 信之（分子研，教授）
藤井 正明（分子研，教授）

オブザーバ 鈴木 俊法（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成11年12月13日～23日

委員 Professor Klaus Müller-Dethlefs (Department of Chemistry, The University of York)

4-3-1 点検評価国内委員会の報告

電子構造研究系では、この3年間に2名の教授と1名の助教授の交代があり、基礎電子化学研究部門では研究内容にも大きな変化があった。溶液の研究とクラスターの研究を結び付けるような新しい研究と言う立場から西信之教授が、レーザー分光技術と光電子分光や赤外分光を組み合わせた新しい手法による電子構造の研究という立場から藤井正明教授が、また、これからの新しい研究分野へ対応し、金属クラスターの電子構造、機能物性の研究を行うべく佃達哉助教授が着任した。鈴木俊法助教授は、分子線手法とイオンや電子の運動エネルギー分布画像解析手法、更に超高速レーザー分光法とを組み合わせる反応動力学への精緻なアプローチを行っている。このような人事によって電子構造研究系では、孤立分子や溶液、そして表面の孤立分子という対象に加え、新たにクラスターという分子集合体を研究の対象として捉え、集団の中の分子の性質、動態、構造変化などを追求して行く研究が展開されることになった。以下に、委員会メンバーが電子メールを通して議論を重ねた幾つかの点について記述してみたい。

[大学と研究所そして系という組織]

C（所内）： 大学との区別化が可能な研究をどのように進めて行くかは、分子研の持つ大きな問題の一つです。電子構造研究系のように、個々の研究グループの専門的な研究内容は微妙に違っていても、全体としてみると共通性が高いテーマを持ったスタッフを揃えた集団の中では、それぞれのグループが内容的にも技術的にも活発な交流を持ち、科学的好奇心を刺激しあって最先端の結果を出すことができます。このような環境の実現という意味では、現在の大学には見られない研究体制をとっていると言えるでしょう。特に、それぞれのグループに属する若い研究者の密な日常の交流を更に活発にするような環境の整備を考える必要があると思います。

A（所外）： 大学は、学生と共同で進める研究においては、学位論文指導という制約から、一定期間内に学位論文としてまとめることが要求されることと、技術者・研究者養成のためのトレーニングも兼ねる課題が望ましいということなどが、研究所での研究課題設定と決定的に異なります。前者の条件から失敗できない面があると同時に、とくに学士論文やときには修士論文でも、アカデミックには失敗して単なる練習に終わっても許される場合があります。大学には、このような教育的な制約があり、また、工作室や機器センターなどの研究支援体制においても、一般に大学は研究所と比べて、貧弱な環境にあります。こうしたことを考慮すると、自ずと研究所の使命がより鮮明になるはずですが、先に提出した「意見書」では、こうした大学の状況との比較はほとんど行いませんでした。結論をいいますと、研究所では、教育や人

材育成といった側面は度外視し、失敗をものともせず、可能性を求め、技術の粋を尽くし、ブレークスルーに挑戦することが肝要ということになるでしょう。

- B (所外): 大学と研究所で行われるサイエンスに違いがあるはずがありません。目指すサイエンスは同じであるが、それを実現するための実行手続きが異なり得るということでしょうか。大学では実行が難しい研究が分子研ならば可能であるという状態が分子研にとって最も望ましいのではないのでしょうか。また、分子研では系と言う組織が特徴の一つとなっていると思います。この点で、私の意見は、Cさんの意見と一致しています。
- D (所内): 分子研はいわゆる「研究所」とも異なっており、総研大の学生も在籍し、また、助手でさえ6年任期です。心構えとして「失敗をものともせず、可能性を求め、技術の粋を尽くし、ブレークスルーに挑戦」というのは重要でしょうが、大学院生、助手に対しても責任を持つ事を考えると「教育や人材育成といった側面は度外視し……」とは思えません。やはり、分子研は大学に近い組織と私には思えます。ある時、分子研はポスドクを教育しているのだ、という方が居りましたが、その方がまだ現実に近いように思います。
- E (所内): 分子研では大学ではできない研究を行うという意味は、大学では買えない高価な装置で実験することではない、と思っています。何年も鳴かず飛ばずになっても挑戦する研究姿勢を持たねばならないと思います。一方で、総研大学生は、ゼロから出発し3年間の内に博士論文にまで到達せねばならないという過酷な時間的制約を負っており、余り挑戦的な課題を与えることができないのが現状と思います。冒険的な課題は、職員自身の研究にしか設定できません。この問題は、分子研が総研大の一翼をも担うという二重構造の本質的なジレンマに起因しており、それ故に、いろいろな意見があるのは当然ではないのでしょうか。一方、系に属する研究グループの交流に関してですが、長い間グループ間の合同セミナーが立ち消えになっている事が指摘されます。研究活動で国際的に闘わねばならない我々は、近い相手と研究に対する議論を尽くすことが大事ではないのでしょうか。系には創造的な学問の雰囲気を充満させることが大事で、このような「研究上の交流」はそのために必須ではないのでしょうか。
- D (所内): 研究者同士の交流は重要です。研究者交流による触発ができれば分子研に在籍する大きな魅力になるはずですが、現状ではほとんど有効に機能してないと思います。研究者の交流はグループ間セミナーのような堅苦しいものではなく、インフォーマルに別のグループの人間と「これ、どう思う?」と自由に意見交換(?)できることが重要だと考えています。そのような雰囲気が現状では不十分だと思い、私も促進するよう心がけています。

[研究室の規模]

- E (所内): マンパワーの問題は常に我々のジレンマです。しかし、分子研の研究員増員は事実上困難だと思います。助手や技官の数は減る一方ですし、博士研究員の数も惨めなものです。また、現在の社会状況の中で、日本国内で人材を集めること自体が容易でないと思います。当面、少人数という与えられた環境の中でどうやって国際的に通用する研究を行うかという戦略(テーマの選択)が必須と思われます。すなわち、この人数ではできる研究とできない研究があるのではないのでしょうか。
- A (所外): 現状の規模では、労働集約型の研究は不適當であり、アイデアと技術の粋を集中する先端的課題への挑戦が最適であると思います。これは次の研究戦略とも関係しています。

- D (所内): 現実的対処として重要なご指摘と思います。人数が少ないので現実問題、推進できるテーマを選ばざるを得なくなっています。一方、現在の規模は分子研設立当時よりもスタッフ数が減少していることもご理解頂きたいと思います。以前は教授グループは助手2技官1, 助教授グループは助手1技官1だったと思いますが、現状では助手1というケースもあります。分子研は昔から人数が少ないことが問題と言われていたはずなのに、現実にはグループ数の増加に従って逆の動きをしているわけです。残念ながら総研大は1学年12人定員であり、博士の進学者数が少ない現状では必ず入学してくるとは期待できませんし、助手とは意味合いが異なります。人数が多ければ良いとは思いませんが、いわゆる国立研究所や理研などと比べても小規模すぎると思います。また、大学では教官1名で1研究室と言うことも有り得るわけですが、教育義務と引き替えに学生と協調作業ができます。分子研の研究室規模や総研大併任/助手任期を含む独特のスタイルは、いわゆる研究所とも大学とも異なるため、私は制度的な中途半端さを強く感じる点です。
- B (所外): 研究グループによってその規模が大きく異なっても良いのではないかとというのが私の意見です。

[研究戦略]

- C (所内): 分子科学研究所は創設後25年を迎えようとしており、この間、分子科学の大きな進歩に貢献してきました。分子科学自体も大きな変貌を遂げており、特に理論計算と実験との協同作業の必要性が益々高くなっています。特に、電子構造の立場からのクラスター研究には高度な分子軌道法計算が不可欠であり、また、動力学研究にとっては、量子力学的解析を高度な理論に基いて行わねば、新しい概念の発見という道には辿りつけないと思います。周辺分野である大気化学、溶液化学、固体物性、分子生物学などの研究者との交流、特に、共同研究を通じて、これらの分野における本質的な問題を電子構造の立場から解明しようとする挑戦が可能となり、真のブレイクスルーが生まれるのではないのでしょうか。様々な理論計算手法が、次第に汎用化されつつあり、計算機の急速な進歩によって、10年前には考えられなかった大きな分子あるいは集合系の精密な計算も夢ではなくなってきました。このような状況は、実験を主体とする電子構造研究系の各グループの研究の戦略設計や展開に少なからぬ影響を与えています。しかし、一方で、予想可能な結果を出す事よりも、予想を超えた発見こそ、真のブレイクスルーではないかということ、我々は肝に命じておく必要があると思います。先端の理論を取り入れる事により、理解がいつそう深まるのも事実ですが、もっと未知な領域に飛び込めば、新しい発見の可能性は飛躍的に増大する訳です。これは、相当の困難を伴いますが、研究所ではこのような未知に近い領域への挑戦が必要ではないのでしょうか。研究者の視線が、広い興味と深い洞察力を伴って、まだ見ぬ真理へと向けられていれば、研究所は質の高い研究者集団として成果をあげることができると思います。
- A (所外): クラスターという構造自由度の極めて高い系を扱うために、従来からの実験手法のみからでは有意な議論を展開するのに困難が伴うという事情は、皆が認めることだと思います。ただし、その解決策は、
- 1) 新種の実験手法の開発と応用
 - 2) 実験データの新しい解析法の開発と応用
 - 3) 理論計算法の開発と応用
- のように、計算だけではないように思います。より広い視座に立って研究戦略を練って欲しいと思います。なお、新概念の樹立を目標に置くときに、必ずしも、手法や技術の粋を極めるのではなく、これま

で着目されていないことに新たな取り組みを進める際には、かなり荒削りな手法でよいこともあります。ただ、このようなプリミティブなアプローチは、お金や研究支援体制ではるかに劣る環境の大学などに、ゆずっていただく方がよいかも知れません。

- D (所内): 近年の理論計算の進歩・有効性はだれしもが認めるところで、理論家との共同研究も重要になってます。一方、新たな実験手法の開発は新領域の開拓につながる可能性があり、広い視点で独自の方法論を展開する事の重要性はご指摘の通りと思います。その意味でもアイデアを試行する際のしきい値を低くする様、心がけることも重要と思います。
- E (所内): 実験が「値」の測定を目的とするなら、計算によって、より少ない労力でそれが得られるようになった時、実験の役割は終わると思います。重要な実験は、その時点で最も深い我々の理解(理論)を検証し、欠けている新しい視点(概念)を提案するものはずです。前者においては、最高の理論、計算との比較を行って、解明されたこととそうでないことを峻別し、次の新しい研究の方向を示すべきです。後者においては、新しい個性的な視点が示されれば精度などどうでも良いと思います。「予想を超えた発見」の「予想」とは、言い換えれば優れた理論と計算であり、直感ではないはず。少数多体系の研究も、理解の検証と新視点の提供にどれだけ寄与しているかで、実験の真価が明確になる時代が来たのだと思います。これは、小さな分子の研究で過去に起こったことと同じことのように思えます。
- B (所外): “ 予想可能な結果を出す事よりも、予想を超えた発見こそ、真のブレークスルーである ” に大賛成です。ただし、計算化学との関連については、個人的には疑問に感じます。計算から意味のある予想外の結果が出ることはありえないからです。もし計算から予想外の結果を得たとしても、それは単にモデルが正しくないか近似が十分でないかなどの理由で却下されるのがオチです。その点が実験と計算の大きな違いです。

4-3-2 国内委員の意見書

委員 A

分子科学研究所は、国内共同利用研究機関として設置されたものであるが、国際的に急速に発展している分子科学分野において、我が国の研究体制を大学等では対応しえない極めて高度な国際的水準で整備し、さらには世界をリードする水準へと高めることを、その主要な使命としてきた。電子構造研究系は、発足の当初より、高い水準でこの分野の発展に貢献してきており、教授・助教授ともに世代交代した現在においても、分子科学研究所に課された使命を、きわめて高い水準で維持発揚するに相応の陣容を備えていることは喜ばしい。しかしながら、今日では、大学等においてCOE等の各種大型予算の獲得が可能となり、国立共同利用研の存在意義と使命の根拠が薄れつつある。また、大学の独立行政法人化が検討され大学の研究体制の柔軟な拡充が可能になるという情勢に鑑み、大学ではなしえない使命を分子科学研究所に求めることは従前より困難になりつつある。こうした情勢の中で、分子科学研究所においては、既存の学問体系にとらわれずに、新分野の形成につながる研究領域を果敢に開拓する役割を集中的に担うべきであろう。分子科学研究所の使命を新研究領域の開拓に集約すれば、現在の研究体制はこれに適していない。研究の方向が挑戦的になればなるほど失敗の危険は増加する。研究単位が小さければ、失敗は即その単位の滅亡を意味する。命を賭すほどの研究者魂こそ重要とはいうものの現実にその勇気を各研究者に強いることは無理であろう。挑戦的課題に多大な設備投資や労力投入をそれほど要さない理論研究系とは異なり、実験研究系では、研究単位の拡充こそが失敗を恐れない挑戦を大胆に展開するための唯一の解決策である。

西グループは、溶液構造について独自の視点から国際的にこの分野の研究をリードしており、研究組織を拡充して広範にこの研究を展開することが望まれる。新規な現象認識と概念形成を課題にする限り、精緻な水準に至らない側面は避けがたい。今後も瑣末な精密化に拘泥せず、溶液構造の分子科学の基盤を樹立し、新規な現象認識と概念形成を含む研究を発展させていただきたい。

藤井グループは、着想のよい研究を多数めざしているが、研究組織が小さいため十分に推進できていない点ばかりである。超解像レーザー顕微鏡の開発を共同研究で進めているが、分子科学の新領域開拓と合目的な新技術開発の2足の草鞋は、現在の研究組織では無理が伴う。研究室の歴史がまだ浅いだけに現状はやむを得ないと思われるが、上で述べた研究体制の拡張がすぐに実現できないとすると、課題を精選して集中的に研究を展開することが急務であろう。

鈴木グループは、革新的な画像観測技術を駆使して化学反応素過程研究の新領域の開拓に勢力を集中していることは評価できる。理論だけでは解明の難しい現象を精密に観測できるようにすることによって、理論と実験の詳細な比較を可能にし、化学反応系の挙動を予測できる理論の開発を促すことは、実験的分子科学研究の重要な課題である。さらに実験的研究技法の根幹をも独自に開発できれば、よりスケールの大きい挑戦的研究を展開できると期待できる。

委員 B

西グループは、クラスターレベルでの分子間相互作用という大きなテーマのもとに、液体/溶液の部分構造という旧くて新しい、そして化学にとって必須な問題に取り組んでいる。低波数ラマンスペクトルの解析から、水とアルコールの混合液体の部分構造が、水とアルコールそれぞれに固有な部分構造に分解されるという仮説を提出し、この問題の新しい切り口を提示した。最終的な検証には、低波数ラマンスペクトルを与える部分構造モードの特定を含め、さらなる研究が必要であると思われるが、議論の出発点としてこの仮説の果たす役割は極めて重要である。今後の発展、とくに動的な視点がどのように導入されて行くのが注目したい。藤井グループは、イオン化検出による超音速自由ジェット中の振動分光により、分子や分子クラスターの構造とダイナミクスを調べている。この手法は藤井グループ独自のものであり、従来の手法では到底得られなかった数多くの極めて興味深いデータが集積されている。しかし、それらの解釈は今後さらに深化させる余地があるように思われる。その過程で、何らかのブレークスルーの糸口が見つかることを期待する。鈴木グループは、光電子、光イオン化種などの2次元画像検出により、超音速自由ジェット中の分子の反応素過程を詳細に調べることを目指している。独自の実験装置を設計・製作し、他のグループの追随を許さない精緻な実験に挑戦する研究姿勢は高く評価できる。理論が最も得意とする小さな自由分子を対象として、理論のより高いレベルでの検証に焦点を置く方向と、機能性分子などやや大きな分子を対象として、従来得ることが不可能であった素過程に関する新しい知見を得る方向の二つの可能性が提示された。筆者は後者の方向により、何か予想外の実験結果が得られることを期待する。

電子構造研究系の3グループの研究レベルが、国際的に見て一流の水準にあることは疑いない。それは、国際的に評価が確立している論文誌に、過去数年にわたって継続的に論文が発表されていることから窺われる。これまでに得られた研究成果が、文字通り画期的というレベルに達しているとは言い難いが、今後画期的成果につながる可能性を十分にはらんだ研究が行われているということは間違いない。これらの研究が相互にどのような関係にあるのか、また「電子構造」というキーワードでどう括れるのかという点に関しては、検討の余地がある。新任の助教授も含め、研究系としての重点をどこに置き、それに向かってどのような体制をとるのか議論することが必要であると考える。

分子研全体を見ると、個々の研究グループの健闘が目立つ一方、全体としての姿が見えにくくなっている感が否め

ない。Heisenberg が言ったように、「部分」をいくら集めても「全体」にはならない。分子研は、独立の研究所であるが故に、その存在理由を明確にするための「全体」像を強く求められている。設立時における狭義の分子科学から、次々に間口を広げて広義の分子科学の担い手となった現在の分子研において、どのような「全体」像が成立し得るのだろうか。分子研内の研究者のみならず、外部にいて分子研と協力する立場にある分子科学者にとっても、極めて重要な問題である。筆者は、大学の理学部的なスタンスで、「基礎分子科学」の研究に邁進する研究所であってほしいと願う。昨今の時限プロジェクト研究には馴染まない、知的好奇心に基づいて自然の根源を問う研究を支援する中核機関としての分子研であってほしい。そのためには、分子研の顔となるべき有力な研究グループを育成して（場合によっては人員配置の再構成を行って）、他を圧倒するような基礎研究業績をあげることにより、基礎研究における分子研の存在意義を強く訴えてゆくことが急務であると考え。

最後に今回の外部評価に携わった感想を一言述べたい。ヒアリングの予定時間は1時間であったが、どのグループの場合もその予定を大幅に超え、ヒアリングというよりはディスカッションの様相を呈した。内容はいずれも筆者にとって有益かつ楽しいものであった。今後、研究者がこのような外部評価に携わる機会が増えて行くものと予想される。研究内容等に関する十分なディスカッションに基づき、「自分ならこうする」という意見を peer review という形で述べることは、評価される側にとってはもちろん評価する側にとっても有益である。その意味で、我々研究者は外部評価の機会を積極的に活用して行くべきであると思う。ただし、外部評価をあまり頻繁に行うのは好ましくない。筆者は、5年ないし7年に一度程度が適当であると考え。

4-3-3 国外委員の評価

原文

Professor K. Müller-Dethlefs

Department of Chemistry

The University of York

Report on my review of the Department of Electronic Structure

Dear Professor Kaya

It was my privilege to visit the Department of Electronic Structure at the Institute for Molecular Science from 13 to 23 December 1999. During this short visit I had the pleasure to hold interviews with Professor N Nishi, Professor M Fujii and Associate Professor T Suzuki. The discussions with the faculty of the Department of Electronic Structure were held in a cooperative atmosphere and allowed me to get deep insight into their past, present and future research activities. I would like to express my gratitude to all of them for their openness in our discussions and for their full cooperation that allowed me to prepare this review in a rather short time.

The Department of Electronic Structure

The Department is fairly small, however, it covers quite a broad range of state-of-the-art research. Since the last report by Professor Carl Lineberger two new Full Professors have been appointed following the retirement of Professors Hanazaki and Yoshihara. Professor Nobuyuki Nishi moved to IMS from Kyushu University in April 1998 and Professor Masaaki Fujii joined IMS from Waseda University in April 1997. These appointments follow the well established tradition of the Institute for Molecular Science to always search for the best available candidate in *open competition*, and not to promote internally from Associate Professor to Full Professor. Both Fujii's and Nishi's appointment has clearly been a remarkable success story for the Department and IMS. Both

Professors show very high originality and innovative experimental concepts in their research. Within the rather short time past since their appointment they have established new state-of-the-art scientific fields at IMS that can compete on an international level. The same can be said about the scientific achievements of Associate Professor Toshinori Suzuki (at IMS since 1992), who has gained a remarkable international reputation in spite of his young age. In my view the Department of Electronic Structure represents those aspects of modern science that I feel should be enhanced; modern and competitive fields of research, and open view of science and scientific achievement, and guiding of research associates, post doctoral fellows and students through scientific ideas, innovation and achievement and not through autocracy.

The research in the Department excels in a variety of fields that are currently of high international interest: Intermolecular interactions at cluster level, bridging the gap between the isolated molecule and the condensed phase, molecular beam studies of intramolecular vibrational energy redistribution, excited state and ion spectroscopy of large molecules and clusters, microscopy below the diffraction limit, and chemical dynamics studied by time resolved laser spectroscopy, and fragment and photoelectron imaging techniques. The experimental activities of all three research groups reviewed rely heavily on the use of sophisticated detection methods to study molecules and clusters in molecular beams and liquids. This necessarily involves the day-to-day use of lasers, with a particular emphasis on the picosecond and femtosecond time scale. Much of the short-pulse laser equipment has to be shared between the groups, leading sometimes to a shortage of measurement time, for instance on the ps two-colour laser system. Just shortly before my arrival this laser system broke down, causing a major disturbance of a part of Fujii's research activities.

Generally it can be said that the research activities of the Department are at an internationally competitive level. Publication output in international high quality scientific journals is excellent. All three group leaders have received invitations to give talks at international conferences. The research associated, postdocs and PhD students find in the Department an intellectually stimulating and scientifically challenging environment. To maintain this level, the Department needs a very high level of funding to be able to expand and maintain its laboratory equipment and laser facilities. All three groups have attracted very substantial external funding, which is a clear sign of very high recognition. The external funding contribution should, however, not be seen as a replacement for IMS funding. The research activities of the Department require a very high level of research infrastructure.

I also noted during my visit that both Full Professors have quite enormous administrative duties. These duties are often extremely time consuming and scientifically counterproductive. I do not see why IMS must have so many committees and why they always have to be chaired by a full professor. How important it is not to be overloaded by administrative duties is clearly evident when looking at the Associate Professor position. As Associate Professor, it is possible to concentrate completely on research. Associate Professor T Suzuki presents us with a very convincing success story. His research is internationally acknowledged, his research had innovated the use of imaging techniques in chemical dynamics. I feel the level of support from IMS was just right for him, so I do not, of course, propose here to increase the administrative duties of Associate Professors. I think the system at IMS is very good, and rightly so, for an innovative Associate Professor and I would recommend to keep it like that.

Another problem relates to student numbers in the Department. Student numbers, considering the resources and the potential research projects could easily be tripled or quadrupled. This is a very difficult problem to solve, but one way forward might be to have joint professorial appointments with Universities. Also it would be a good investment to increase the number of studentships available from IMS substantially. These should then be open to competition to all groups at IMS.

Now some more general remarks for the principal discussion which should focus on the following point: Is IMS within all its Departments able to maintain the scientific leadership in Molecular Science in Japan and is it able to compete at the highest level

internationally? The answer is related to technical support, infrastructure, internal and external funding and administration. A lot of technical support and technical resources are now very much localized UVSOR facility and the Laser Center. It might be better to localize some of those resources in the most productive research groups. In contrast to the earlier times at IMS, when a full professor at IMS had two research associates, one technical associate and often at least one more postdoc, the situation in the Department of Electronic Structure is now that for two Professors and one Associate Professor there are four Research Associates (H. Kohguchi, Y. Inokuchi, T. Nakabayashi, M. Sakai), one Postdoc (Saeki) and one Technical Associate (H. Katayanagi). Though in my view external funding is very important as a proof of competitiveness, IMS as a Center of Excellence should provide sufficient funds for infrastructure and scientific personnel so it will be able to compete with the personnel structure of the big universities. The universities have the advantage of student throughput; IMS should provide an adequate number of research associates, technical associates and postdocs. This would also further enhance the opportunities to obtain external funding.

In summary, all three research groups in the Department of Electronic Structure are innovative and original in their research and their research is internationally recognized. The groups are too small, in particular Fujii's and Nishi's group. An increase in the number of research and technical associates would be a very good investment. Most important is an increase in student numbers by attracting high quality chemistry and physics graduates. The two Full Professors are also overloaded by too many administrative duties. One way forward to solve this problem would be to provide the Director-General of IMS with the administrative infrastructure, through reorganization of the Administration, to reduce the overall administrative burden of IMS and Department of Electronic Structure faculty drastically.



訳文

K. ミューラー デスレフス教授
ヨーク大学化学教室

電子構造研究系の評価の報告

茅 教授 殿

1999年12月13日から23日に分子科学研究所電子構造研究系を訪れるのは、私にとって名誉なことでした。この短い滞在中に西教授、藤井教授、鈴木助教授のインタビューを持てた事を嬉しく思います。電子構造研究系の教授・助教授との議論は協調的な雰囲気の中で行われ、彼等の過去、現在、未来の研究活動への深い洞察が可能となりました。私は、打ち明けた議論を行い、短期間の間にこのレビューを作成することに協力的であった彼等全員に感謝の意を表したいと思います。

電子構造研究系

この系は少人数であるにもかかわらず、非常に広い分野に渡って最先端の研究を行っています。前回のカール・ラインバーガー教授による報告以後、花崎、吉原教授の退官に伴って、2名の新しい教授が任命されました。西教授は1998年4月に九州大学から分子研に移り、藤井教授は1997年4月に早稲田大学から分子研に加わりました。これらの人事は、公募による競争の中で最良の候補を探し、助教授を教授に内部昇進させないという分子科学研究所の十分に確立された伝統に従い行われました。藤井(教授)および西(教授)の任命は、明らかに、系にとっても分子研にとつ

ても素晴らしい成功であると思います。両教授は、その研究の中に独創性と斬新な実験構想を示しています。既に、着任後の短期間の間に、国際的に競争力の有る最先端の研究を立ち上げました。同じ事が、(分子研に)1992年着任の鈴木俊法助教授の学問的な業績に対しても言えるでしょう。彼は、その若さにもかかわらず、素晴らしい国際的な評判を得ています。電子構造研究系は、私が現代科学に重要と感じている次のような要素の好例であると思います。すなわち、最新の競争の激しい研究領域に取り組み、科学研究と業績に対して公平な目を持ち、助手、博士研究員あるいは大学院生を、上下関係によってではなく、科学的着想、技術革新、研究成果によって導いています。

この系は、国際的に高い興味を持たれている様々な領域において卓越した成果をあげています。それらは、孤立分子と凝縮相とを結ぶクラスターレベルでの分子間相互作用、また、分子間の振動エネルギー再分配や大きな分子やクラスターの励起状態やイオンの分子線を用いた分光学研究、回折限界以下の顕微鏡観測、時間分解レーザー分光法、そして解離断片や光電子の画像観測手法などです。私が今回評価した三グループの全ては、分子線の中、或いは液体中の分子やクラスターを調べるための高度な検出手段を必要としています。レーザー、特に、ピコ秒 フェムト秒レーザーの日常的な使用は不可欠です。超短パルスレーザー装置の多くを、幾つかのグループで共同利用しなければならないでしょう。これはまた、実験時間を短くしてしまうことにもなるのですが。ちなみに、ピコ秒2色レーザーシステムは、私が来る直前に故障してしまい藤井(グループ)の研究活動の一部の大きな障害となってしまいました。

総じて、この系の研究活動度は国際的な競争力を備えた水準にあります。国際的に高度な学術雑誌への発表状況も立派です。三つのグループのリーダーもそれぞれ国際会議で招待講演を行っています。助手や博士研究員、大学院生も、この系が知的刺激に富み科学的な挑戦を起こさせるような雰囲気を持っていると感じています。この水準を維持するために、この系は多額の研究資金を得て、その実験装置やレーザー設備を更に充実・維持することが必要です。実際、3グループの全てが大きな外部資金を獲得しています。これは、外部からの高い評価の証でしょう。外部資金の獲得は、しかしながら、決して分子研での内部からの研究費のサポートを犠牲にするような事態を招いてはいけません。この系の研究活動には、所が充実した研究基盤を与えることが不可欠なのです。

私の滞在中に気がついた事ですが、両教授とも極めて多大な管理的な仕事を負っています。これらの仕事には、非常に長い時間を費やさねばなりませんし、研究活動にとっては非生産的です。分子研がどうしてこのように多くの委員会を持っているのか、また、何故、教授が委員長を務めなければならないのか解りません。管理的な仕事が過大にならないようにすることが如何に大切かは、助教授を見れば、極めて明白です。助教授は、完全に研究に専念することが可能だからです。鈴木俊法助教授は、文句無しの成功例です。彼の研究は国際的にも評価され、化学動力学の研究に革新的な画像手法を導入しました。彼に対する分子研の援助は、まさに適切だと思います。従って、ここで、助教授の義務をこれ以上増やすべきだとは申し上げられません。私は、分子研のシステムは非常に良いと思います。創造的な助教授に対しては、間違い無く良いのです。このシステムを維持されるようお勧めします。

もう一つの問題点は、系の中の学生数に関する事です。学生数は、研究設備や実施可能な研究プロジェクトを考えると、3倍あるいは4倍であっても良いはずですが。これは、大変難しい問題ですが、一つの改善策は、(研究所の教授・助教授が)大学の教官を兼任することでしょう。そして、分子研が提供できる奨学生の数を大幅に増やすことも有効でしょう。無論、奨学生は、分子研の全てのグループ間での開かれた競争に供せられるべきです。

さて、次のような極めて重要な問題について、所見を述べたいと思います。分子研の全ての系が、日本の分子科学における指導的立場を保ち、且つ、国際的に最高のレベルで競争してゆくことができるのでしょうか？ その答は、技術面でのサポート、経済的構造的な研究基盤、内部あるいは外部資金、および運営に依存します。分子研の分子研内の技官による支援体制とその資源は、UVSOR施設やレーザーセンターに片寄っています。これらの一部を、最も活発な

研究グループに集中するのも良いかもしれません。教授が2名の助手と1名の技官と時には複数の博士研究員を持っていた分子研の創設当初に比べて、電子構造系では今や、2名の教授と1名の助教授に対して、4名の助手（高口博志、井口佳哉、中林孝和、酒井誠）と1名の博士研究員（佐伯盛久）、1名の技官（片柳英樹）という状況である。私の意見としては、外部資金は競争力の証しとして大変重要ではありますが、分子研はセンター・オブ・エクセレンスとして充実した研究基盤と大学の研究室と競争できるだけの研究人員が持てるように、研究者に予算を与えるべきです。大学は学生のもたらす研究生産能力によって分子研よりも有利な立場にあります。ですから、分子研は適切な数の助手、技官、そして博士研究員を研究者に提供しなければなりません。それがまた、外部からの資金を導入する機会を増加させることになるでしょう。

要約しますと、電子構造研究系の3グループは、いずれもその研究において革新的、独創的であり、国際的に評価されています。ただ、グループはいずれも小さく、特に、藤井グループと西グループは余りにも小さすぎます。助手と技官の増加は研究面で良い結果をもたらすでしょう。最も重要なのは、能力の高い化学と物理の院生を集める事によって学生数を増やすことです。二人の教授はあまりにも多くの管理的仕事の負担が多すぎます。この問題を解決する方策としては、運営組織の再構成によって、所長の運営を助ける組織を設け、分子研の、そして電子構造研究系の教授・助教授の事務負担を劇的に減らすことだと思います。

4-4 分子集団研究系

国内評価委員会開催日：平成11年11月26日

委員 木下 實（山口東京理科大，教授）
鹿兒島誠一（東大院総合文化，教授）
小林 速男（分子研，教授）
薬師 久彌（分子研，教授）
オブザ - バ 中村 敏和（分子研，助教授）
米満 賢治（分子研，助教授）
井上 克也（分子研，助教授）
山下 敬郎（分子研，助教授）
鈴木 敏泰（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成12年1月8日

委員 Professor Fred Wudl (University of California at Santa Barbara)

4-4-1 点検評価国内委員会の報告

分子科学研究所創設以来25年の間に分子集団関連分野の学問領域は著しい発展を遂げ、現在では分子物質は物性分野において酸化物とともに主要な物質群と見なされるようになった。我国の分子物質の物性研究は長い伝統をもっているが、その研究領域は近年、物性理論から合成化学に跨る一大分野を形成するに至っている。分子科学研究所における関連分野の研究は我国内外から高い評価を得ているものと思われ、分子科学における本分野の重要性は大きく、今後一層の発展が望まれる。

個々の研究についてはルーチン化したやり方だけではなく、掘り下げた深い仕事を生み出す努力をする必要がある。この点に関連して、前回の点検評価に際しても指摘されたことであるが、教官の研究環境、特に多忙さについての改善の必要性が非常に大きい。研究室の体制に関しては、助手、技官層の一層の充実が望まれるが、其れは一般的に非常に困難な事態である。特に最近、相対的な助手の定員数が減少して来て、転出した前任者の助手が残っている為に、新任教官が共同研究者を持たず、成果を挙げにくい状況が生じている事は問題である。一つの解決策として、博士研究員の充実が望まれる。

前回の96年度の点検評価の時点は、分子物質開発研究センターの設立直前に当たっていたこともあり、「分子物質開発研究センターを含めて、分子集団系全体として分子物質研究の新しい柱を立てる必要性」が述べられていたが、センターが当時構想したように機能しているかを点検し、可能な時期に改善していくことが必要である。分子物質開発研究センターはその設立の構想そのものがそれ以前の分子集団研究系の点検評価の中から生み出されたものであり、これは点検評価作業が研究系の将来の発展計画にとって極めて重要な役割を果たしてきたことを示すものでもある。また、外部の点検評価に関連して、これまで点検評価の際に指摘された問題点に対して、分子科学研究所としてどの様に対応し、解決しようとしてきたのか、あるいは、外部の評価に対してどの様に釈明し、それに対して反論、説明があったのかなどについて外部の研究者に判る形で示す事が重要である。

客員部門の役割に関しては、客員教官として分子科学研究所で実際に研究を行い成果を出す事の他に、研究会等を通して、研究分野の活性化に寄与するという側面とがあり、後者に関しては内部の教官の間ではその重要性が認識されているようであるが、外部の研究者からはむしろ前者について、「分子科学研究所に客員制度があるので出来た」と

いう成果が得られるような状況の実現が望まれている。

分子物質の研究分野における分子科学研究所に期待される役割の一つとして「興味深い分子物質のサンプルの供給」に関する役割がある。前回の点検評価に際して「分子科学研究所で良いものを作り、外部の研究者に広く供給するように」との指摘があった。現在では分子物質の物性分野では「物理」と「化学」が完全に融合しているが、なお測定試料を供給する化学者のやり方に二つの立場がある。即ち、興味を持つ研究者に無差別的に幅広くサンプルを供給する立場と共同研究者を絞り供給し研究を進める立場があり、測定試料の配布については「分子物質」に対する化学者と物理学者の認識の差が完全に埋まる段階までには至っていない事を示唆している。これは「物質開発」と「物性解明」のいずれの段階に重点を置くかという事とも関わっているが、特に分子物質開発センターに対しては今後とも外部より試料供給源としての機能が期待されるものと予想される。しかし、現実には各研究室が人員的にその役目を充分果たせる体制にはなく、対応が難しい状況にある。この問題は共同利用機関における分子物質研究の拠点としての役割との関連において継続的な課題となっていくものと思われる、何らかの具体的な対応が望まれる。いずれにせよ分子性固体について、合成から理論に亙る広い分野の研究者が集まれる場所は世界的に稀であって、分子科学研究所は世界的にも重要な位置を占めている。今後、物質科学としての「分子」の研究が益々重要性を増すものと思われるが、今後とも他分野に影響を与え続けられるよう 構成員が自ら考えるべき新しい時期にさしかかっている様に思われる。

4-4-2 国内委員の意見書

委員 A

世界的に見て、分子性結晶の伝導性・光学的性質・磁性の研究は、戦後急速に発展してきた分野であり、その中で日本の研究が果たしている役割は非常に大きい。しかも、この分野の成果は、いろいろな形で物性物理や化学の諸分野ばかりでなく周辺の学問領域にも大きな影響を与えている。分子科学研究所は設立以来、この分野の研究に力を注ぎ、顕著な業績を挙げてきた。とくに、設立当初有機あるいは分子性の伝導体・超伝導体の開発・研究、電子・陽子移動錯体の開発・研究、また有機強磁性体の開発・研究など一連の研究目標を定め、そのような目標に適った人材を集めて、互いに協力しながら研究を強力に展開してきた。その間に分子性結晶の超伝導体や有機強磁性体が開発され、研究が進められたが、そこで分子研が果たした主導的な役割は高く評価される。

現在、この分野の研究は、当初の目標をほぼ達成し一段落した時期のように思われる。この時期に、分子科学研究所がこの分野でどのような方向を目指しているのかが必ずしも見えていないのが残念な気がする。もちろん、これまでの成果を踏まえて、その延長上の研究もしなければならぬし、やり残してきたことを詳細に研究することも大切であり、そこから新しい問題が発展する可能性も高い。その意味では、次の発展への誘導期と考えた方がよいかも知れない。しかしながら、このような時期の研究は、前回の外部評価でも指摘されたようにルーティンな研究と見なされる。このようなルーティンな研究がよくないというのではなく、そこからの発展が期待されるという意味で必要である。しかし、世界的な視野から研究を主導する立場にある研究所では、ルーティンな研究を進める一方で、次のターゲットをどう考えているかを発信することも要求される。

分子集団関連研究分野には、理論も含めて7人の所員が関係しており、それぞれに多くの優れた発表論文があり、活発に研究を進めていることは高く評価できる。しかし、発表論文を拝見すると、若干の共同研究が見られるけれども、グループ間の交流は必ずしも十分でないような印象を受ける。世界的に見ても、一つの機関でこれだけの人員をこの分野に割り当てているところはほとんどない。それだけに、グループ間で相補的に協力しながら研究の日常的な交流を積極的に行い、効率のよい研究発展を図ることが望まれる。グループ間の日常的な交流を通して、研究所における

研究のあり方、あるいは現在のメンバー（近い将来の人事も含めて）で行えるこの分野の発展の方向などが見えてくるのではないかと期待している。研究所の研究室では、大学の研究室とは違う面があるはずで、その特徴を十分に活かして欲しいと思う。

このことに関連して、人事公募のあり方について「分子研レポート 98」の中の議論で、いろいろな考え方が述べられているのを興味深く読んだ。いずれの意見もそれなりに解るけれども、やはり研究の方向を決めるのは、分子研自身であり、分子研が何をやりたいかがあって、はじめてどういう人を求めようかとなるのが本筋ではないかと思う。それには、多くの人の意見を参考にしながら、現有のメンバーで常に提案・討論を繰り返し、自分たちで何ができるか、その時にこういう人材がいたらもっと能率が上がりそうだ、新しいことが生み出せそうだという観点から進めるのがよいのではないかと思う。研究所は、研究する大きな課題がなくなったら、存在意義を失うので、そのくらいの緊張感をもって研究を開拓して欲しい。このことは、研究分野についてもいえることで、場合によっては別の分野に乗り換えることも視野に入れて、広い立場から真剣に議論すべきことであろう。

共同利用に関しては、毎年相当数の施設利用・協力研究などを受け入れ、教職員の負担は大変なものであろうと思われる。利用する側からの意見になるが、共同利用を有効に機能させるには、まず上述のように研究所や研究室としての旗印がはっきりしていることが重要であり、考え方、測定法、機器などに何か特徴がなければならない。現在のように、どこの大学にも種々の機器が充実してきた段階では、何か特徴のある装置や機器が必要になるし、特殊な測定ができることが望まれる。とくに化学関係の場合には、市販の装置で大抵の測定は間に合うことが多いので、これはかなり難しい注文かも知れないが、共同利用機関では、可能な限り最高級の装置を設置するとか、大学で購入するときには省略せざるを得ないような付属品（オプション）を揃えるように心がける必要がある。その他、最近では極端条件下（超極端である必要はない）での各種測定が必要なことが多いので、このような需要にも対応できるように計画することが望まれる。

共同利用について、次に重要なことは、優秀なスタッフと支援職員であり、両者の時間的な余裕であろう。共同利用できた研究者に、単に測定や合成の便宜を提供するだけでなく、その結果について互いに十分な討論をする余裕が欲しい。事務的なことや雑務的なことをできる限り簡素化・機械化し、利用者との対応ではポスト・ドク、院生にも手伝ってもらい（もちろん、その成果は院生等の成果にも及ぶ）、そのうえで人員増を望む以外に、この問題を解決する名案はない。

これと関連して、客員制度がやや形骸化しているような印象を受けた。流動部門と同様に所内でも議論をしているのであろうが、客員部門のあり方、成果の帰属、発表の方法など検討して欲しい。

早いもので、私達分子科学を志してきた者が大きな期待をもって創立を見た分子科学研究所も、今年西暦2000年4月で25周年を迎える。分子研と付かず離れずで見守って来たが、その期待に応えてくれた分子研に拍手を送りたい。しかし一方で、分子研の第一世代が過ぎようとしているような気がしないでもない。時代の流れが速いだけでなく、学問の進歩も一段と加速されている現在、次なる新しい研究分野を設定することは容易ではない。しかし、研究することがなくなった訳ではなく、むしろますます難しくなり、挑戦しにくい課題が残されている。それだけに息の長い挑戦をする機会が訪れているともいえる。春秋に富む中堅・若手の人たちに、常に開拓者精神を失わずに、困難な課題に挑戦してもらいたい。

委員 B

(1) 研究領域の将来性と分子研グループの活動について

いまや分子性物質は、物性科学の中で酸化物とならぶ主要な物質群となった。これを象徴的にあらわしているのが、超伝導や強磁性をもつ分子性物質の合成・発見である。およそ物性科学の教科書に登場する物性現象で、分子性物質で演じられないものはないといっても過言ではない。それどころか、電子系の低次元性やフェルミ面に関するいくつかの物性現象など、在来の物質では知られていなかったあらたな物性科学の世界が広がっている。

これからの物性科学において分子性物質への期待は大きい。特に、新物性・物質の設計が今後の物性科学の主要な方向になると考えられ、この点で分子性物質は大事な役割をはたさなければなるまい。今後は「分子性物質でもできた」というだけでは評価されず、「分子性物質だからできた」といえる段階に進むことが要求されるであろう。

この分野での分子研の研究グループの寄与は大きい。研究成果においては、いくつかの全くオリジナルな成果があげられており、現在、世界で進行している主要な研究のかなりの部分は、分子研グループがその中心となっている。また、組織的・地理的な研究センターとしての役割においても、この分野における分子研は、世界的に主要でユニークな研究所として認知されている。

それでは分子研グループの研究の今後にまったく問題がないかといえば、もちろん、そうは言い切れない。研究には広がりや深さが求められる。まず広がりについては、物質開発を必須とする分子性物質の研究において、物性の精密測定を専門とする研究者との協力が必須である。その際に2つの態度がありうる。ひとつは、「来るものは拒まず」と、希望する研究者にはひろく試料を提供するやり方である。この方法の長所は、大事な発見を狭い範囲に閉じ込めることなく多くの研究者に公開できるので、切磋琢磨によって研究の発展が望めることである。短所は、多くの試料がブラックホールに落ち込んだかのように、試料の提供先から何の反応も返ってこないという危険があることである。もうひとつの態度は、試料提供先を選別して限定することである。これの長所と短所は、ちょうど、先のケースの裏返しである。この二つの態度のはざままで、場合に応じて適切な選択をすることが求められる。

つぎに、研究を深めるには、まず優れた理論家との共同が不可欠である。「分子性物質でもできた」から「分子性物質だからできた」に進み、物性科学の世界にその成果を残すには、物質や実験技術にとらわれない立場から、研究の成果を物性科学の体系の中に位置付けることが必要である。いっそう多くの理論家をまきこむことが望まれる。次に、研究成果の発表そのものに深さを印象付けることが望ましい。分子研グループの研究成果は華々しいので、論文誌以外にも多くの国際会議などで報告を求められる。その結果として、ひとつの研究にまとまった論文の形をもたせる暇がなく、他の研究者がその成果を参照・引用する際に、結局、どの論文が重要なのかを見極められない、ということがありそうである。これはあたら重要な成果を拡散させることになる。

(2) 共同利用機関としての現状と将来への提言

研究資金の増大のおかげで、いまや多くの大学・研究機関では（昔に比べると）機器が充実してきている。このため多くの研究所で、かつて果たしていた機器センターとしての役割が消滅してきており、分子研も例外ではない。また語弊を恐れずに言うならば、設立から25年を経て、研究者集団としての役割も変容してきた。設立当初は関係者の間に緊張感と一抹の不安が共有され、研究所としての成果をあげることに邁進されたであろう。これが現在の分子研の大きい成果に結びついたに違いないが、これからは、そのような運命共同体的な一体感とは、質的に異なったものが、求められるのではなからうか。それは研究所が「所」という組織としての成果をめざすのではなく、一つの構想を持った研究者がある期間、集中的に研究を進めるための「器」の役割を果たすことである。この点において、分子研が堅持してきた任期制は、今後いっそうその重要性が強調されなければなるまい。

すでに述べたように、研究の広がりや深さを得るためには共同研究が必要であり、分子研グループの中にはその仕組みがすでに用意されている。これをいっそう活性化することはもちろん必要である。しかしながら「協同」は義務で

なされるものであってはならない。所内のグループ間の協同が必然的に生じることが、もっとも望ましい。これにこだわることなく、所外のグループとの協同も同様に重視されるべきであるが、もっと望ましいのは、ある期間、外部の協同研究グループがそっくり所内グループとなることであろう。分子研が現在用意している客員制度の運用を、さらに工夫することによって実現できるはずであるが、これをきっかけとして、外部にポストと予算の柔軟な運用を働きかけることが必要であろう。それが可能になる条件が整ってきているのではないか？

(3) 点検評価について

最後に、点検評価制度そのものについて、若干の思いつきを記しておきたい。今回の点検評価に際して、「分子研リポート」に掲載された前回の点検評価の報告書を拝見した。しかし、そこに指摘、提案されていることに対して分子研がどのように考えるのかは公表されていない。説明や反論・釈明などをし、オープンに対応したほうが内部的にも外部的にもよい結果を生むのではなかろうか。

4-4-3 国外委員の評価

原文

Report on Seven Groups of Research on Molecular Solids

Fred Wudl (University of California at Santa Barbara)

January 15, 2000

Introduction

On January 8, 2000 I interviewed the groups of Yakusi, K. (Department of Molecular Assembly), Nakamura, T. (Department of Molecular Assembly), Kobayashi, H. (Department of Molecular Assembly), Inoue, K. (Department of Applied Molecular Science), Yonemitsu, K. (Department of Theoretical Studies), Yamashita, Y. (Research Center for Molecular Materials) and Suzuki, T. (Research Center for Molecular Materials)

The premise that the IMS at Okazaki is clearly the premier center of research on molecular materials in the world holds true today even more so than it did at the time of the last review (1996). It is a unique institute, especially in a worldwide environment where institutes dedicated completely to the pursuit of fundamental research are decreasing in number.

Even though their size ranges only in 3 to 7 members per group, the scientists and their associates I reviewed are performing excellent research on various aspects of the science of molecular solids. The spectrum of interest of the research groups ranges in variety from organic synthesis to very high-level condensed matter physics theory.

The general impression is that all scientists are strongly motivated and their results are at the cutting edge of their respective fields. The main topics being explored are molecular semiconductors, metals, superconductors and ferromagnets. The overwhelming emphasis is on organic conductors. This is very likely historical as a result of the efforts of Prof. Hiroo Inokuchi, whose pioneering contributions were in organic conductors.

Recommendations

1. Science

Though organic superconductors based on the TTF family are still producing interesting condensed matter physics results, such as reentrant and coexisting superconductivity, I believe this may be the time to move on to other systems and, for example, give somewhat more emphasis to organic SEMICONDUCTORS. The only group studying some aspects of these is the T. Suzuki group.

In terms of chemistry, physics, and materials science; the semiconductors, whether small molecule or polymeric, are currently the most interesting systems. In that vein, one wonders if the “molecular fasteners” examined briefly by Professor Inokuchi, some time ago, should be investigated as possible TFT’s (thin film transistors).

2. Personnel

If one were to use similar research institutes in the United States as models (Lucent, IBM); then the size of the research groups is adequate, assuming that the groups of the young professors will grow to the size of the H. Kobayashi and Y. Yamashita groups. On the other hand, the groups at the Max Planck Societies (Institutes) are larger.

As already mentioned in a previous report (P. Cassoux, 1996), it is important for IMS to improve its student recruitment. This will help attract top Assistant and Associate Professors and will help the existing Professors carry out their research more expediently.

Summary

The IMS enjoys an excellent international reputation for the research performed on molecular solids. The only area which needs to receive more attention is the chemistry and physics of organic semiconductors, both as small molecules (TFT’s) or polymeric. There exist already several ties to international groups but to strengthen these, the establishment of a prestigious international fellowship for foreign graduate students to perform part of their thesis research at Okazaki and Japanese students to spend at least one year abroad should be established. This would be an additional mechanism to increase the student population at IMS.

訳文

分子性固体研究の7グループに関する報告

Fred Wudl 2000年1月15日

はじめに

2000年1月8日, 分子集団研究系の薬師, 中村, 小林, 相関領域研究系の井上, 分子基礎理論第四部門の米満, 分子物質開発研究センターの山下, 鈴木グループのインタビューを行った。

分子科学研究所が世界で第一級の分子物質の研究センターであるということは, むしろ前回の点検評価の時点(1996年)以上に, 明らかに今日でも真実である。また, 分子科学研究所は基礎研究を追求する研究所の数が減少するという世界的な状況の中でユニークな存在でもある。

グループの構成員のサイズは3から7名程度であるが, 私がレビューしたグループは分子性固体科学の種々の方面で非常に優れた研究を行っている。各グループの興味は有機合成から高いレベルの固体物理理論まで広がっている。

私の全般的な印象としては, すべての研究者は強いモチベーションを持っており, 彼らの研究結果はそれぞれの分野での先端的なものである。主なトピックスは, 分子性半導体, 金属, 超伝導体, および強磁性体であるが, 圧倒的に強調されているのは有機伝導体である。これはおそらく有機伝導体のパイオニアである井口洋夫教授の努力の結果による歴史的背景をもつものであると思われる。

勧告

1 科学

TTF 骨格を持つ分子より構成されている有機超伝導体では「リエントラントや共存的な超伝導」(reentrant and coexisting superconductivity)(訳註: 超伝導 絶縁体転移を示す有機超伝導体や, 反強磁性秩序と超伝導が共存する有

機伝導体の事を指していると思われる)などの興味深い固体物理上の成果が現在も得られているが、私は有機半導体のような他のシステムにそろそろ重点を移してもいい頃であると信じている。これに関連する研究を行っているのは鈴木グループのみである。化学、物理、および物質化学の分野において、低分子あるいは高分子の半導体は、現在最も興味深いシステムである。そのような研究の流れに関して、井口教授によって研究された“分子ファスナー”は、薄膜トランジスタとしての可能性を調査すべきではないかと思われる。

2. 人員

Lucent, IBMのようなアメリカの同様な研究所をモデルとするならば、分子研の研究グループの大きさは、若い教授・助教授のグループがいずれ小林、山下グループの大きさに成長すると仮定するならば、適当なものであろう。しかし、マックスプランクの研究グループはこれより大きい。

Cassoux教授が前回のレポートで述べたように、分子研にとって学生のリクルートを改善することが重要である。これはトップクラスの助手・助教授を引き付けるのに役立つし、すでに在籍している教授の研究を遂行するのにも役立つであろう。

まとめ

分子研は、分子性固体の研究において優れた国際的名声を得ている。より注目すべき唯一の分野は、低分子あるいは高分子の有機半導体の化学と物理である。海外のグループとのつながりがすでに存在するものの、これらを強めるため、外国人大学院生が博士論文研究の一部を分子研で行えるよう、また、日本人学生が最低1年間、海外で研究できるような国際奨学金を確立すべきである。これは、分子科学研究所での学生の数を増やすことにもつながるであろう。

4-5 相関領域研究系 + 錯体化学実験施設

国内評価委員会開催日：平成11年12月15日

委員 中村 晃（大阪大，名誉教授）
伊藤 翼（東北大理，教授）
渡辺 芳人（分子研，教授）
田中 晃二（分子研，教授）

国外評価委員面接日：平成11年8月26日～28日

委員 Professor John Dawson (Department of Chemistry & Biochemistry, University of South Carolina)

4-5-1 点検評価国内委員会の報告

(1) 現状の問題

相関・錯体化学の領域では新物質の創成が研究をリードしている。新しい発想による新物質の開発は新たな理論、物性あるいは物質変換を誘発する。相関・錯体の研究グループの規模の大きさから、新物質の創成のためには分子物質開発センターとの共同研究のみならず理論、測定との共同研究も極めて重要である。この分野において分子科学研究所が中心的な役割を果たすためには研究所全体が新物質創成の重要性を認識することが必要不可欠である。一方、全国レベルでの中型測定装置（NMR，EPR，Mass，CD，X線等）の改善により、相関・錯体が利用している装置は国内の主要大学と比べてかなり貧弱になってきており、新物質を合成した研究者が、その物性測定を全国の大学の中から共同研究者を捜して依頼する時代になりつつある。この状況は全国共同利用機関としての分子科学研究所の根幹に関わる問題である。

(2) 指向性と展望

分子科学研究所での相関・錯体では、その研究グループの大きさから流行の研究の追従は行うべきではなく、多くの分野に基本的な概念を与える分野、たとえば“資源・環境・情報”を分子レベルで化学的に具象化するテーマにチャレンジすることが望まれる。特に以下の分野はその重要性にも関わらず、化学的にはまだまだ未成熟であることから、分子研の限られた人数でも、独自の物質を開発し、その発想により突破口を開き、国際的に指導的な役割を果たせることが期待される。

- 1) 生体系が行なっている不活性小分子 (N_2 , CO_2 , CH_4 , O_2 , 飽和炭化水素化合物等) の代謝系への取り込み、ならびにイオンの濃度勾配 (H^+ , Na^+ , Ca^{2+} 等) を利用したエネルギー変換を化学的に具象化し、人工的な系でのシステム化。
- 2) ノナスケールに及ぶ金属錯体の集積化による錯体化学と無機化学の融合と新たな光学、磁性、伝導性材料の創成。
- 3) 不活性溶媒中で高活性な試薬を用いた合成反応から水系での温和な反応条件での合成反応への展開による環境およびエネルギー問題での分野の創成。
- 4) 高選択性・特異性を有する新規錯体触媒の開発。

(3) 研究体制及び設備

分子研の中でも特に、錯体化学実験施設での全国の大学との活発な人事交流は同施設の人事選考の妥当性を示している。一方、活発すぎる人事異動は施設としての研究の一貫性の欠如をもたらすことも指摘されている。この問題は現状の相関・錯体の研究規模が小さく、特定の分野で国際的に指導的な役割を担うためには、より大きな研究グルー

ブを形成させることが必要であることに起因している。新物質の創成を行うためには、人的なサポート体制の確立が是非とも必要である。ある程度の規模の研究チームを形成するためには、独自の研究を全面的に出し、高い資質を備える学生の興味を引き起こし大学から分子研へ目を向けさせることが重要であるが、分子科学研究所で行われている研究が、総研大の学生に大きく依存をする事態となれば、その存在自体が疑問視されかねない。現在、各省庁の研究所では独自の博士研究員枠を持ち、博士課程を修了した若手研究者が大学に比べて研究設備の整った各省庁の研究所で目的設定型の研究を行い、研究の大きな推進力となっている。一方、基礎科学センターとしての分子科学研究所における博士研究員の数は、COEに指定された現在でも、極めて少ない数に限られている。若手博士研究員が国立の研究機関で活躍する機会が増大することは、日本の学問の向上から喜ばしいかぎりであるが、21世紀を見据えた基礎科学の発展からは文部省の研究所こそ、十分な人的サポートが与えられるべきであり、次代の日本を背負う研究者は文部省が中心になり育てるべきであると思われる。

4-5-2 国内委員の意見書

委員 A

錯体化学実験施設について

1. 分子科学研究所錯体化学実験施設は1984年(昭和59年)に発足、以来約15年の歳月が経過した。多くの錯体化学研究者や院生がこの施設で研究を行い、さまざまな研究を展開してきた。その発足以来の活動を外部から眺めてきた一錯体化学者として、錯体化学実験施設のこれまでの足跡を眺め、所感を述べてみたい。紙数や時間の制限もあり、断片的且つ独断的なものになることをご容赦戴きたい。
2. この施設の発足の動機は、「錯体化学研究所」設立に向けたものであった。歴代の施設長他多くの諸先輩のこれまでの多大な努力にもかかわらず、残念ながら設立には至っていない。錯体研設立の構想は昭和39年には公式に文書化されている。その設立の理念の主たる部分は錯体化学実験施設の創設に際しても継承されてきた。すなわち、「施設」には、日本の錯体化学のセンターであると同時に、世界をリードする研究機関であること、大学の研究室では出来ないような高度な研究テーマに基づく研究を展開すること、共同研究を推進すること、人事交流の拠点となること、などが求められてきた。施設の設立以来15年を経過し、この間、沢山の錯体化学者や院生が錯体化学実験施設に所属し、新しい経験をし大きく成長・飛躍したことは意義深いことと評価できる。この間、施設長はじめ関係する諸先生方が施設の運営に払われた多くの努力に敬意を表し感謝したい。しかし、上記のような当初掲げた高い理念と比べてとき、この15年間の施設の活動にどのような評価が可能であろうか？ 多くの大型機器、豊富な研究費などをバックにさまざまな意味で日本の分子科学ををリードしてきた分子科学研究所の中心的な研究分野の活動状況と比べて 錯体化学実験施設では世界をリードするような研究が不断に展開されていたであろうか？ そのような分子科学研究所の一施設として誕生したメリットが生かされてきたであろうか？ 施設の活動が当初掲げた高い理念と比べて必ずしも十分ではなかったと感じるのは筆者だけではなからう。
3. 錯体研設立運動の母体は会員数が550名におよぶ「錯体化学研究会」であり、これとの関連で創設された「錯体化学実験施設」は、したがって、錯体化学研究会と無縁ではない。実際に、例えば、所外のメンバーの科研費による研究会を分子研で開催することなどは、施設発足当時は頻繁に行われ、錯体化学研究会は「施設」の活動を活発に support してきた。また、分子研研究会を錯体化学関連のテーマで企画する際、その案内が錯体化学研究会の会員誌「*Information Bulletin*」に記載されるなど、多くの研究会会員の参加を求めるような努力が払われてきた。このような「錯体化学実験施設」と「錯体化学研究会」との協力関係は、施設の発足の頃は極めて重要なことと捉えられ

そのような運営がなされてきたように思う。しかし,そのような配慮や意識は時を経るに連れて次第に薄れ,錯体化学実験施設の全国の錯体化学者への求心力は低下しつつあると筆者は感じている。

4. この15年間,大学では,学部改革や大学院重点化など高等教育や研究の場としての改革が進み,これに伴う大学院先端設備費,研究基盤重点設備費,高度化推進特別経費等の予算措置がなされた。また,科研費の充実や新しい大型研究のための新しいさまざまな研究種目が誕生し,大学に所属する教官の研究環境は設備面では施設発足の頃と比べ大幅に改善されてきている。今では,多くの錯体化学者が routine 的に必要とする単結晶 X 線回折計, NMR, 磁化率測定装置などは,多くの大学に設置済みである。このような状況の中で,共同利用施設としての錯体化学実験施設の在り方について十分な discussion がなされてきたであろうか?
5. 歴代の施設長は,例えば流動部門の人事などについて多くの時間や労力を費やしてきた。その真摯な努力に深い敬意を表したい。錯体化学実験施設の専任教官の人事異動は極めて活発に行われている。これは人事選考が適切に行われ,活発な人事交流が可能な優秀な人材が選ばれている結果と評価したい。しかし,上記のような錯体化学実験施設の運営にとってきわめて重要なさまざまな問題や施設の教官の研究活動の在り方について,外部の錯体化学者を含めた場で十分な議論がなされてきたであろうか? 錯体化学実験施設には運営委員会なる組織があり,そのメンバーには何人かの外部の錯体化学者も参加している。上記のようなさまざまな問題を議論するとすれば,公式には,おそらくこの委員会がその適当な場なのであろう。この委員会でどのような議論がなされてきたかについては筆者は十分には承知していない。的外れかも知れないが,この委員会がもっと高度に適切に機能し,施設長を強力に support する役割を果たすべきであったと思われる。物質科学における金属錯体の重要性は近年ますます認識され,新しい物質の開拓研究の必要性が増大している。錯体化学の今後の研究の推進すべき方向,これと関連する専任教官の人事問題,研究会開催や課題研究の提案などについてもできればこの委員会で率直な議論が展開され,錯体化学実験施設の在り方,あるいはまた,錯体化学研究会との関係などについて提言をするような活発な役割を果たして欲しいと考える。そのためにはこの委員会の役割や開催頻度について,制度的な改革が必要であろう。

錯体化学実験施設は近い将来分子研の一研究系へ組織替えを行うことが決定されその手続きを開始する予定と聞いている。組織の形態が変わってもその運営には,外部の錯体化学研究者が関わるとのことである。組織の形態変更を含め歓迎すべきことと考える。「錯体化学研究系」が分子科学研究所の中心的な役割を果たす組織として,ますます発展することを期待してやまない。

委員 B

分子研としての研究目標

設立された時点と分子研究の状況が著しくかわってきた。分子研が主に研究を展開している物理化学ではその対象がより複雑な物質(例えば,固体状態での複雑な電子移動や磁気相互作用,生体中の金属蛋白質での電子移動など)について行われるようになったと言えよう。同時に我が国の物理研究では「複雑系」のように化学や高分子化学の課題が「新しい物理」として研究されるようになってきた。また,生物では化学構造に立脚した「構造生物学」がトレンドとなり従来「生体高分子化学」の分野と思われていた領域が「新生物学」として広く研究されている。化学の新しい分野として有機金属化学が有機および無機化学の領域をつないで大きく発展したが,物理や生物の領域を取り込むものではなく,結果として化学の新しい領域は縮少しているとさえ感じられる。

現時点で,物理と化学の境界にある物質科学領域を見ると,世界中での高温超電導物質の研究から基礎的な電子-格子相互作用が解明されたが,これらに光が関わった固体での電磁相互作用の研究が将来の光コンピュータの開発を

めざして進められている。ここでは新しい電磁機能性物質の化学合成が重要な課題である。新しい「ものづくり」は合成のアイデアと技術の基礎の上に築かれるものであり、たとえば農業での「つち作り」から行う必要がある。少数の天才だけではできない面が多い。一般に、このような研究は成果が直ちに出不いので基礎の確立した研究所や大学の研究グループのみが参加可能である。その点、分子科学研究所のような所は優れた基盤を持っているので、機能性の「ものづくり」には国内での拠点と思われる。このような物質として各種の遷移金属を中心にもつ「d-p 軌道共役系」が興味ある物性を示すと大いに期待されている。遷移金属化学の研究を行ってきた錯体化学実験施設はこの新しい「ものづくり」の場所としてこれまでの実績を生かしてゆくのが最適と考える。

有機化学と生物学との繋がりは最近更に緊密となり、20年前には成熟したと思われた「生理活性天然物の化学」は再び見方を換えながら注目されている。たとえば、我が国では薬学部においてこのような薬用天然物の化学合成が盛んに行われている。また、金属イオンを含んだ有機天然物は新しい分野として発展してきたが、金属側から見ると「複雑な錯体」なので生物無機化学という分野を生んでいる。ここでも複雑構造の大分子が次々と合成されている。

現代の化学研究では、測定機や計算機の大幅な進歩の結果、他の多くの分野と同様、計算機端末の前にすわりこんだ研究者ばかりとなり、化学の独特の研究法つまり、化学反応を用いて精密合成を行う化学者が減少している。これは化学が我が国において将来物理と生物に飲み込まれ弱小分野に落ちる兆しとも見られる。分子研として化学の先頭に立ち、将来の発展を約束された化学独自の研究が望まれる。

錯体化学実験施設について

この数年間、専任の教授と助教授を新任したところが相次いで大学へ昇任され、現在活動しているのは田中グループのみである。職員も学生も少ないので大きな新領域を作って他のグループを寄せつけない状態にするのは困難であろう。田中教授は従って金属としてルテニウム、配位子として共役系を持つピリジン系にしぼって研究を展開され、新しい酸素原子移動反応を発見しエネルギー問題に重要な炭酸ガスに応用し、エネルギー変換系の創設を提案されている。これは独創性が高く今後の発展が期待される研究である。

相関領域研究系について

この系は分子研創立時に、有機および無機領域に国立の新研究所を設けるイニシアチブを取る場所として設定された。その後、有機では九大に「有機化学基礎研究センター」、無機では上述の実験施設が設けられ、設立時の計画は一応成功している。この25年の間に有機金属のような大きな新しい領域が確定したので現在では有機無機と区別するのは時代遅れとなった。有機と無機が完全に混じり合った新しい概念の研究系または研究所が必要と思われる。

渡辺グループの研究は生物有機および生物無機化学の領域の他、有機金属も含んで非常に活発に行われている。高度に触媒活性の金属酵素の中心を組み換えDNA法で合成した金属蛋白の迅速X線解析によって詳しく調べて、「蛋白質の持つ化学機能を人工的に増強」しようという重要な目標に向かって研究が展開されている。また、有機金属の分野でも水溶性の新しいイリジウム錯体を合成し有機合成触媒作用を検討している。このように有機 - 無機と生化学が渾然一体となった研究体制をとっていることは、今後の化学研究の典型と見られ大いに評価される。

4-5-3 国外委員の評価

原文

Review and Evaluation of the Research Programs of Professors Yuzo Nishida, Koji Tanaka, and Yoshihito Watanabe, Institute for Molecular Science, Myodaiji, Okazaki 444, Japan

Reviewed by: Professor John Dawson, Department of Chemistry & Biochemistry, University of South Carolina, Columbia, SC

29208 USA

Date of Review: August 26-28, 1999

Professor Yuzo Nishida

Professor Nishida is a Professor in the Coordination Chemistry Laboratories at IMS in the area of Synthetic Coordination Chemistry. He is studying the redox chemistry of inorganic metal complexes and, in particular, has focused his attention on the mechanism of dioxygen activation by copper, heme iron, and non-heme iron metalloenzymes. These enzymes are able to directly functionalize saturated hydrocarbons, converting alkanes to alcohols, as well as unsaturated hydrocarbons, converting alkenes to epoxides. In some instances, these metalloenzymes are able to carry out a much more extensive range of oxygen insertion reactions with varied substrates. The detailed mechanism of how the dioxygen is activated for insertion into unactivated substrates has long been the focus of research efforts in numerous laboratories around the world. The metalloenzymes that carry out these reactions generally form a dioxygen adduct with the reduced form of the metal. With dinuclear non-heme iron systems such as methane mono-oxygenase, addition of dioxygen to the di-ferrous form of the enzyme would effectively generate a ferric-peroxide adduct. With heme iron systems such as cytochrome P450, the initial dioxygen adduct of the ferrous state is further reduced to again effectively generate a ferric-peroxide adduct. Similar considerations can be applied to copper hydroxylases such as dopamine beta-monooxygenase. Dr. Nishida has focused attention on the electrophilic nature of the metal peroxide intermediate and has proposed the provocative idea that the interaction of this intermediate with bound substrate is necessary to proceed to generate the high valent metal-oxo adduct that has generally been assumed to be the critical intermediate in oxygen atom transfer reactions. This idea challenges the more generally held view that the substrate does not play a role in cleavage of the metal-bound peroxide. In a recent review article in *Trends in Inorganic Chemistry* (5, pp. 89-103 (1998)), Dr. Nishida has summarized all of the evidence that supports his new viewpoint. As always, to understand the mechanism of any reaction, one must assemble the facts and see whether they support the particular mechanism. Dr. Nishida's stimulating ideas will now need to be tested by others to see if they provide a more consistent interpretation of the facts than the more commonly accepted proposals for the mechanism of dioxygen activation.

Professor Koji Tanaka

Professor Koji Tanaka is the Director of the Coordination Chemistry Laboratories at IMS in the area of Functional Coordination Chemistry. His research is focused on the organometallic chemistry of carbon dioxide. In particular, his laboratory is investigating the activation of carbon dioxide by metal complex catalysts. A related research effort involves the study of energy conversion from proton gradients to electricity by metal complexes. Dr. Tanaka is a leading researcher in these areas and has published extensively in the top journals. He is a frequent participant at international meetings on these topics. The development of catalysts for the conversion of carbon dioxide to reduced one carbon derivatives such as formic acid, formaldehyde, methanol and methane is an extremely challenging goal. A related and equally demanding aim is to couple two molecules of carbon dioxide to form oxalic acid and other two-carbon derivatives. Dr. Tanaka has been able to accomplish substantial portions of these objectives and he has clearly developed and improved our understanding of the principles that control the chemistry of carbon dioxide. This should enable his laboratory to generate even better catalysts for these reactions in the future. One of the particularly challenging aspects of this research is the design of metal complexes that not only bind carbon dioxide, but which also suppress the evolution of the carbon monoxide to enable multi-electron reduction of carbon dioxide to proceed to the more highly reduced one carbon products listed

above. In the process of studying the metal complex catalyzed reduction of carbon dioxide to reduced one-carbon products, Dr. Tanaka has discovered some extremely interesting examples where the metal-bound carbon dioxide can be coupled to form oxalic acid. The development of catalysts for the use of carbon dioxide as a convenient one-carbon precursor to multi-carbon containing products represents a significant advance in organometallic chemistry.

Professor Yoshihito Watanabe

Professor Watanabe is a Professor in the Department of Applied Molecular Science at IMS. His research is focused on the development of a better understanding of the mechanism of dioxygen activation by heme enzymes such as cytochrome P450. Related studies involve the activation of hydrogen peroxide by peroxidase enzymes. While the majority of his research over the years has involved studies of heme iron systems, he has recently turned his attention to the study of non-heme iron dioxygen activation catalysts. He is a leading researcher in these research areas and has published extensively in the top journals. He has frequently been invited to speak at major international conferences in the area of bioinorganic chemistry including the Ninth International Conference on Bio-Inorganic Chemistry (July 1999, Minneapolis, MN USA) and at the upcoming Eleventh International Conference on Cytochrome P450 (August 1999, Sendai, Japan). One of the remarkable features of heme enzymes is that they catalyze a widely diverse set of reactions including oxidation and oxygenation reactions as well as the dismutation of hydrogen peroxide despite the presence of a common heme iron prosthetic group at the center of each enzyme. It has been demonstrated that the heme environment plays a critical role in controlling the chemical reactions that each heme enzyme catalyzes. This has opened up the opportunity to change the heme environment using site-directed mutagenesis in order to change the chemistry carried out by one heme enzyme into that accomplished by another. Dr. Watanabe's research group has been at the forefront of this effort and they have succeeded in converting myoglobin, a heme protein that normally only binds dioxygen reversibly without carrying out any chemistry with the bound dioxygen, into a peroxidase enzyme that oxidizes substrates. This is but one example of the long list of important accomplishments from the Watanabe lab over the past several years that have led to significant improvements in our understanding of the mechanism of dioxygen and peroxide activation by heme enzymes and related systems.

訳文

西田雄三，田中晃二，渡辺芳人教授の研究に関する点検・評価

(ジョン・ドーンソン，南カロライナ大学化学・生化学科)

西田雄三教授は，分子科学研究所・配位化学実験施設錯体合成研究部門の教授として，錯体合成化学の分野で研究を行っている。金属錯体の酸化還元反応，特に，銅，ヘム鉄および非ヘム鉄を含む酵素による酸素分子の活性化機構が研究の中心となっている。こうした金属酵素は飽和炭化水素のアルコールへの変換やオレフィンのエポキシ化等を行い，場合によっては，多様な基質への酸素の挿入を行っている。分子状酸素の活性化機構は世界中で研究されている課題である。酵素中心の還元型金属イオンは酸素分子と付加体を形成し，2核非ヘム鉄中心を有するメタンオキシゲナーゼ等の場合には，鉄 過酸化水素錯体を生成する。ヘム酵素であるシトクローム P450 は，2価状態にあるヘム鉄に酸素が付加し，引き続く一電子還元により鉄 過酸化水素付加錯体が生成する。西田教授は，金属 過酸化水素付加の親電子的反応性に着目し，蛋白の活性中心に存在する基質と過酸付加付の相互作用により，真の酸化活性種と考えられているO=Fe中間体が生成するという考えを提出している。この考え方は一般に考えられている基質非依存型過酸のO-O結合解裂機構に対する新たな提案であり，この提案を支持する証拠を含めてまとめた論文が *Trends in*

Inorganic Chemistry 5, 89-103 (1998) に掲載された。反応機構についての理解は、実験事実の積み重ねとそれを支持する機構の探索が必要である。西田教授の新規な提案は今後、多くの検証が必要となると考える。

田中晃二教授は錯体化学実験施設長として、錯体物性化学の分野で研究を行っている。研究の中心課題は、二酸化炭素の有機金属化学であり、二酸化炭素を金属錯体により活性化する反応を研究している。関連する課題として、プロトンの濃縮勾配により、金属錯体の反応エネルギーを電流へと変換する反応を研究している。この分野では田中教授は世界的な研究者であり、最高水準の論文誌に研究成果を発表している。またこの分野に関する国際学会にひんぱんに出席している。二酸化炭素をギ酸、メタノール及びメタン等へ還元的に変換する触媒の研究は非常にチャレンジングな課題である。また2分子の二酸化炭素の2量化によるオキザロ酢酸等の生成反応の研究も望まれる。こうした課題に対する田中教授の貢献は大きく、二酸化炭素の反応性制御の原理的な理解を深いものにしており、将来的には有効な触媒系の展開へとつながることが期待される。本研究の課題で重要な点は二酸化炭素を効率的に結合するのみならず、一酸化炭素の発生を抑え、多電子還元を行う金属触媒の設計である。一連の研究で、田中教授は金属 二酸化炭素付加体がオキザロ酢酸を生成する非常に興味深い発見を行っている。二酸化炭素を多炭素化合物合成のC1源として利用する触媒の構築は、有機金属化学の発展にとって極めて重要である。

渡辺芳人教授は関連領域研究系の主幹教授であり、P450等のヘム酵素による酵素活性化の分子レベルでの解明を中心に研究を行っている。同様な反応としてペルオキシターゼ類による過酸化水素の活性化についても検討を行っている。近年の渡辺教授の研究の中心はヘム蛋白質であったが、最近是非ヘム系への展開も計っている。渡辺教授は当該分野の国際的リーダーの一人であり、高水準の学会誌に論文を発表しており、生物無機化学の主要な国際会議（第9回国際生物無機化学会議、ミネアポリス、1999年7月の第11回シトクローム P450に関する国際会議、仙台、1999年8月）の招待講演者となっている。ヘム酵素の多様性、すなわち酸化および酸素添加、過酸化水素の分解がヘムという共通の補欠分子族により達成される点が興味を持たれ、活性中心周辺のアミノ酸の環境が機能制御に関与していることが示されている。このことから、部位特異的アミノ酸置換により、酵素機能の変換の可能性が出てきた。渡辺教授のグループはこうした研究の先頭に立っており、酸素の可逆的脱着をおこなう蛋白質であるミオグロビンを基質酸化を行うペルオキシターゼへと変換することに成功している。これは渡辺教授のこれまでのヘム酵素や関連系による分子状酸素や過酸化水素の活性化機構に関する重要な研究成果の一端にすぎない。

4-6 極端紫外光科学研究系

国内評価委員会開催日：平成11年12月12日

委員	尾嶋 正治 (東大院工, 教授)
	佐藤 幸紀 (東北大科学計測研, 教授)
	難波 孝夫 (神戸大院自然科学, 教授)
	田中健一郎 (広大理, 教授)
	渡辺 誠 (東北大科学計測研, 教授)
	宇理須恆雄 (分子研, 教授)
	小杉 信博 (分子研, 教授)
オブザーバ	黒澤 宏 (分子研, 教授)
	田原 太平 (分子研, 助教授)
	見附孝一郎 (分子研, 助教授)
	長岡 伸一 (分子研, 助教授)
	福井 一俊 (分子研, 助教授)
	鎌田 雅夫 (分子研, 助教授)
	繁政 英治 (分子研, 助教授)

国外評価委員面接日：平成11年11月8日～9日

委員 Professor Ingolf Lindau (SSRL, Stanford University)

4-6-1 点検評価国内委員会の報告

(1) 極端紫外光科学研究活動の現状

UVSORは16年前に運転を開始し研究活動を展開して以来、国内外の高い評価を得てきた。その活動は、大別すると、ケミカルマシンと称されるごとく、設置時の主目的である分子科学研究への応用と、物理、生物、医学、光学の幅広いユーザの共同利用への応用に大別される。これまでの成果を振り返った時に気付く大きな特色は、一つは、分子科学という特定のフィールドに的を絞ることにより、この分野での国際的リーダーシップを勝ち得ることに成功したことと、第二は、挿入光源や赤外光源を装備した高性能な装置かつ、小型で使いやすい装置であり、また、他の施設では許可されない、あるいはやりにくいような化学的実験もでき、放射光利用研究のすそ野を拡大するうえで、大きく貢献してきたことである。専任部門の最近の成果は、研究所内における系の存在感と放射光装置の必要性をアピールする柱となるもので、内殻励起領域の高分解分光(小杉)、放射光による物質創製とナノ科学(宇理須)、放射光とレーザーの同時照射分光(見附、田原)である。また、分子科学応用の研究について、気体分子の励起蛍光分光、しきい電子分光などは過去において分子科学をリードするうえで大きな貢献をした。有機固体、無機固体、固体表面の角度分解光電子分光、各種のイオン電子コインシデンス分光、赤外吸収分光、オージェフリー励起ダイナミクス、直入射領域での各種分光、顕微光電子分光などの研究は、主として界面分子科学流動研究部門およびUVSOR施設の教官や外部ユーザの方々の努力によるところが大きい。所内専用ビームラインによる分子科学研究は大きな特色である。これは、所内スタッフおよび、目的を同じくする外部研究者との協力研究によって研究がなされている。先に述べた、使いやすさの特色を最大限に生かせる結果、化学というマイクロサイエンスの分野でユニークな新しい分野を開拓するうえで成功してきたと考えられる。ただし所内専用ビームラインの研究は、スタッフの人事異動にともなって、所外

研究者のテーマとなるため、所内、所外の区別は固定されたものではない。なお、所内スタッフの研究において、より高輝度の光源を必要とする部分については、他施設を利用して高度化を計っている。共同利用研究としての大きな成果は、人工衛星搭載用X線望遠鏡ミラーの評価、生物の軟X線顕微鏡撮影、各種フラーレンの構造解析、各種光学素子の評価、膜形成エッチング反応応用、などである。なお、UVSOR施設の光源に関する研究で特記すべきものとして、自由電子レーザーの開発の研究がある。

(2) 現状の問題点など

- (a) UVSOR光源自体の老朽化対策が必要である。また、より高輝度の光源を使う必要のある研究が増加している。
- (b) 光源の低エミッタンス化で外部と競争しても意味がない、実験ステーション装置の高度化、ユニークなアイデアの発案などで勝負する方向が今後は重要であろう。
- (c) 施設のみならず、研究系のスタッフの数も、一グループあたり、グループリーダーを含めて1-2名と少なく、研究効率の観点から問題である。
- (d) 分子科学での啓蒙期の役割は終わった、これからは、もっと多くの分子科学者が利用し、設置初期の目的である分子科学利用研究が、質量ともに活発に展開されることが望まれる。
- (e) 分光器開発など、よりよい光源を提供する仕事は重要なので、良い評価を与えるべきである。放射光+レーザーも今までとは異なる光源を提供できることに注目したい。
- (f) 流動部門について、現実に流動教官として来てみると非常に大変である。学生を連れてきて研究する費用が無い。もとの大学との併任ができると良い。
- (g) サイトスペシフィックの研究については、より選択性をあげる工夫など新しい特徴を追求することが望まれる。

(3) 研究の将来展望

- (a) 上記に掲げた外部ユーザの研究や所内専用ビームラインの研究を今後もさらに発展させることが望まれる。
- (b) ほとんどの研究に共通して言えることは、高フラックス化、特にアンジュレータをふんだんに使えるようになることで、研究の質が飛躍的に良くなることが明白である。
- (c) 近い将来、他施設において、第3世代光源がフル稼働の状況となることから、暫定的にも、これらの装置を借りて、飛躍の第一歩をふみだすことも重要と考えられる。
- (d) 現在取り組んではいないが、将来重要となる可能性のあるテーマとしては、クラスターの軟X線光化学、軟X線-赤外領域の顕微分光、生体物質応用、などが考えられる。クラスター研究は、実験スペースを広く取れるようになることが望まれる。また、クラスタービームのフラックスを上げる努力が必要である。
- (e) 有機物のマルチカラー、あるいは二重共鳴の研究も面白い。

(4) 装置の将来計画 - 極端紫外光科学研究系の見解 -

系・施設の研究者での討論以外に、今回の点検評価を含めた国内外の所外の専門家による点検評価を受け、将来計画についても有益な助言を得て来た。これらの経緯をもとに、以下のように考えている。

- (a) 現在世界最高水準にある、所内外のユーザの研究を維持しさらに発展させなければならない。しかし、UVSORはすでに建設後16年を経過し、近い将来装置の老朽化が顕在化することが明白ある。
- (b) 現在分子科学研究分野において非常にユニークな分野を開拓し、且つ国際的視野で高い水準にあるのは、装置が使いやすい、所内(分子科学)専用ビームライン制度を有する、さらに、所内の多様な分子科学研究者集団や、機構内の基礎生物学研究所、生理学研究所などの研究者との交流により新しい発想を得やすい、などの特色によるところが大きい。この長所を将来も発揮するために、機構内において、装置の高性能化の改造あるいは新装置の設

置を行う必要がある。

- (c) 装置の高性能化や新装置の設計においては、分子研の研究の特色を反映することに的を絞り、この点においては、むこう20年間ほど十分な性能を保証するものでないといけない。リングや分光器の性能を追求するだけでなく、マンパワーの確保や、現在の特色である使いやすさの保持も高水準な研究を展開する上で無視できない重要な課題である。
- (d) 設計については、上記の点と土地問題を配慮し、加速器の専門家のシミュレーションによって、第三世代に準じた高フラックス（アンジュレータが主）、できるだけ小型、ユニークな時間構造、ユーザーフレンドリ、などのキーワードを考慮した、新しい加速器設計概念を掘り起こすことが望まれる。
- (e) 装置の高性能化、あるいは新装置の設置の方針策定にあたっては、既存の装置の再使用可能部分の活用、これまでのビームラインおよび、実験ステーションの莫大な投資と、所内外の多数のユーザに蓄えられた知的資産を十分に活用し、コストミニマムを十分に配慮する必要がある。
- (f) 現有装置でも500 mA運転が可能であるが、そのためには前置ミラーの耐熱性の向上や、部分的な放射線遮蔽の向上が必要である。また前置ミラーなどをより平滑にし、表面散乱を抑制しフラックスを向上させることも大いに意味がある。

4-6-2 国内委員の意見書

委員 A

分子研UVSORは16年が経過したマシンであり、これまでに分子科学の発展に大きな貢献をしてきた。これは1つは分子科学にターゲットを絞った施設として運用するという戦略、もう1つは優れた施設研究者たちの努力によるものである。17年以上経過したPFとちょうど補完するような形で大きな成果を挙げて来たと思う。特に放射光・レーザー同時照射分光、内殻励起領域高分解能分光、放射光ナノ物質創製などで極めてユニークな成果が出ている点を高く評価したい。しかし、マシンの老朽化は否めず、またスタッフ、学生の数の少なさは驚きである。SPring8の速い立ち上がり、PF高輝度化、第3世代軟X線光源計画などの外部状況を考えると、今後の戦略が今一明確でないと思われる。分子科学として何をやれば世界でBigになれるのか、21世紀の分子研のミッションは何か、基礎生物学研究所などとの共同研究をもっと全面に出して「分子生命科学研究所」的にターゲットを広げるのか、その中で極端紫外研究系の役割は何か、などの問いに答えを出さなければならない。単に高フラックス化、使いやすさの追求、クラスター研究の重点化などでは、対処出来ない大きな課題である。是非、21世紀の分子科学をリードして行って頂きたい。

委員 B

- ・当該研究系の研究内容については、UVSOR施設の放射光を利用しているか否かに関わりなく、全体的には、分子科学として高度の質を維持した研究が行なわれているという印象を受けました。
- ・当該研究分野における分子研の特色を打出してゆく一つの方向は、分子研内でも十分に意識されているようではあります。やはり、放射光とレザの組み合わせによる研究を進展させてゆく方向であろうかと思えます。この点で、見附グループ、田原グループ、および鎌田グループの研究は新たな研究手法と新たな研究領域の開拓を目指して、放射光光源として現在のUVSORの利点を生かし弱点を克服するために非常な工夫と努力を重ねておられることが伺われ、大いに評価いたします。今後のますますの発展に期待します。
- ・UVSORにフェムト秒レザを組み合わせて、電荷移動、プロトン移動、異性化反応などの基本的な化学変換過程

を位相制御する研究も分子研に適したテーマではないでしょうか。このような研究には、現に田原グループで推進されておりますように、必ずしも放射光を用いる必要は無いかも知れませんが、放射光とレザを組み合わせることによる特色が生かせれば新しい研究分野が開かれると思います。

- ・分子の多様性に着目する研究も分子研の特色を打出す健全な方向の一つであると思います。この点から、有機分子、クラスタ、生体高分子、或いはそれらのイオンを対象に、放射光や放射光+レザを利用する研究を追求する方向を深めることも考えられます。例えば、大きな分子のイオン(正イオン或いは負イオン)を蓄積するリングやトラップを放射光実験に導入することなども有り得ると思います。ヨーロッパではインシュリン等に電荷を帯びさせて蓄積するイオン蓄積リングが建設されています。
- ・分子の内殻励起によるサイト選択的な解離反応の研究は、今後は、サイト選択性が生じるメカニズムの解明を深めてゆく方向と、サイト選択性を応用する展開的な研究とに分かれてゆくと思います。UVSORを用いる場合には、分子の多様性に着目した展開的な研究が適していると思います。
- ・小さな分子の光解離では、サイト選択性のメカニズムを追求すると、結局は選択制に限界があることの原因を追求することになります。それよりは、高分子や、長岡グループが計画しているような表面吸着分子などを対象とする応用的な研究の方が面白そうです。長岡グループの今後の発展に期待します。

光源施設として分光器を含めたビームライン光学系の性能を向上させることは放射光施設にとって不断に必要な努力でありますから、このような努力には十分な評価を与えるべきかと思えます。この点から、不等刻線平面回折格子分光器、SGMあるいはSGM、TRAIN、3mNIM等の導入を高く評価いたします。今後も、現在の電子蓄積リングの許す性能の限界まで光源としての性能を改良してゆく努力は重要であると思えます。

委員 C

平成11年12月12日に開催された極端紫外光科学研究系点検評価委員会で、研究活動の現状報告を受け、まず、スタッフの数が圧倒的に足りないことを痛感した。この状態で、それぞれが研究成果を上げており、これ以上を求めることは無理である。しかしながら、以下に記した意見を、今後の研究方針を定め、将来構想を構築する際の参考にさせていただきたい。

人的資源の有効活用と組織化が急務

基礎光化学研究部門では、国内外の研究者と活発な共同研究を行っており素晴らしい成果をあげているが、分子研独自の研究とは言い難く、新たな展開を期待したい。一方、反応動力学部門では、物質創製とナノ科学に関する研究の展開を試みており、放射光科学が今後進むべき一つの方向として魅力的ではあるが、学問的位置づけを明確にする必要がある。

分子科学の新分野を発展させることが極端紫外光科学研究系の本務である以上、両研究部門には、これまで進めてきた研究とは視点の異なった研究が求められる。個々の研究者が独自の研究を進めるのは当然のことであるが、UVSORの目玉となる研究成果を生み出すためのプロジェクトを関係研究者間で話し合ってみてはどうか。PFやSPring-8とは違ってユーザーが比較的分野の共通した研究者集団であるので、不可能なことではない。そのためにも、極端紫外光科学研究系が中心となって、少ない人的資源の有効活用と組織化に取り組んでいただきたい。

放射光分子科学の将来について

放射光利用研究は、多くの研究分野においてまだ成熟期に達しているとは言い難い現状である。分子科学の分野においても未開拓な分野が多く残っており、放射光利用研究は無数の可能性を秘めている。分子科学研究所では、その

ような未開の分野を切り拓く研究に挑戦していただきたい。新しい研究分野を開拓することと既存分野でのピークを出すこととは本質的に異なる。勿論、研究には連続的な側面もあるが、既存分野でのピークを追求する研究が新分野の開拓につながらないことは歴史の教えるところである。分子研ならではの独自の研究を目指さない限り放射光分子科学の行方は見えてこない。

委員 D

1. 極端紫外光科学研究系について。

分子科学研究所における研究活動の柱を担う部門として尚所内外から大いに期待されている部門であると思います。その期待の中で研究する研究者の使命は重大です。そもそも研究所設立は日本における分子科学を先導する中核的な役割を担う研究機関にするという使命にあったと思います。しかし、文部省を含む各省庁から比較的研究資金が出回るようになった昨今（サイエンスの基礎を支える部分への投入は尚充分ではないのは自明ですが）では大学における実験環境もかなり改善されて来たこともあって、分子科学研究所と競合する相手が幾つも出てきたように思います。そのような中で研究所が当初の使命をどの様に果たして来ているのか、回りから常に問われて続けています。系も例外ではありません。系の長所は研究所の極端紫外光施設（UVSOR）を専用して研究が展開出来るという点です。これは一般の大学に所属する研究者には望めない有利な地位で、この点を多に利用することが系の研究活動の高さを内外にアピールする上で重要であると思われます。この点に関して云えば、レーザーとの同時分光、分子メスとしてのUVSORの利用、ナノ結晶創生への利用、自由電子レーザー開発、等で高い研究水準を維持していると評価出来ます。今後とも系における分子科学の情報を世界に向けて発信するにはUVSORをフルに利用した研究が展開出来る様に系の人事を含めた対応が今後一層研究所に要請される処です。報告を受けて気になった点は、各グループのスタッフ数に濃淡があり、研究者が一人のグループがあるという点です。これは一時的な現象とは思いますが常に気を配って頂きたい点です。

2. UVSORについて。

ケミカルマシン（Chemical Machine）のうたい文句で運転が開始されてから16年になりますが使い易さの特長を最大限に生かしつつ他のリングでは得られない特色ある研究が行なえるリングとして利用されていると思います。分子メスとしてのUVSOR利用・レーザーとの同時分光・有機物の研究・赤外放射光の利用等がこれに相当します。近い将来の課題として気が付いた点を列挙します。

(1) 機構化に伴ない、

UVSORはこれまでの分子科学研究所専用施設の色彩から機構全体の財産であると言う色彩に順次移行して行かざるを得ない様に思われます。21世紀は光と生命の時代ともいわれていますからUVSOR利用については同じ機構内の生物・生命系の研究所との連携を常に模索してゆくことがUVSORに新しい側面を付与するという点で重要であると思います。その為には、系側に研究面でのチャンネルを持ち得る人材を配置する事も（系内に新しい分野の創設も含めて）選択肢の一つです。

(2) 光源の老朽化の中で、

世界の放射光施設と競争してゆく為にはUVSORならではの研究の特色を更に前に出すべきです。それらはレーザーとのドッキング、有機物系での利用、極低エネルギー領域での利用、等が挙げられます。

(3) UVSORの当面の対策。

第3世代のリングと競争しても意味がないでしょう。むしろ使い易さを前面に出し、低電子エミッタンスを要求し

ない実験を更に追求する方が得策です。そのためには観測系の光学系や真空の改良も視野に入れた蓄積電流の増大化が望まれます。

(4) UVSORの将来像

先行するVUV・SXリング計画の先行きが見えない現状では(常に新しい計画を保持しているのは重要であるが)分子科学研究所の新しいリング計画の可能性が高いとは思われません。そこで、各予算規模に応じた改良策を具体的に練って予算要求し、UVSORの手当を実現してゆく事が重要であると思われ(30億以内で実現出来る計画, 10億で出来る計画, 5億で出来る手当, 等の様に。これは(3)とも関連する点である)。

委員 E

極端紫外光科学研究系は創設後8年間、気体分子および固体表面上の光化学や有機固体の光物性など分子科学的な研究を大いに推進してきた。これには、専任部門の活動のみならず、流動部門の寄与が大変大きいと考えられる。特に、流動部門は明確な課題を持ち、装置作りから、実験の遂行、データの解析、研究の完成まで短期間で精力的に行い、新風を吹き込んだことが意義深い。さらに、研究系が独自のビームラインを持っていることも重要な点である。しかし、協力研究などで所外(国外を含む)の研究者と共同で研究を進展させるような面はまだ弱く見える。また、創設の目的であるUVSORの利用を通しての研究推進に関し、温度差がある様に見受けられる。このあたりは、今後さらに自己点検を行って頂く必要があろう。一方、加速器や施設利用のビームラインを受け持っている極端紫外光実験施設および外部ユーザーの研究活動も活発である。しかし、外部評価委員会においては、研究系と施設の協力関係について殆んど触れられなかったのは残念である。

UVSORは完成後16年を経過したことは事実であるが、適正な保守・改良を行えば原子核研究所のシンクロトロンを見る如く、加速器自体の寿命はそんなに短くはない(36年間)。これから光学系、検出器、測定装置などの高効率化に積極的に取り組みればもっと成果が上がるであろう。しかし、新奇なテーマに対し、それに対応するビームラインを建設できないことは否めない。この様な観点から現UVSORのupgradeや新しい光源も必要であろう。ねらうべき研究、人員、土地、予算、時期等を考えると色々な案があり得る。多くの人の討論により、それぞれの案をまず作り、それから各々の比較検討が必要であろう。もし、壮大な計画を立てるのであれば、分子科学者のさらなる利用、分子研の人員の大幅な振替、岡崎研究機構三研究所の協力および東海地区の大学、研究機関の協力が必須である。

今後の方向として、分子科学という分野を大きく捉え、分子科学の学問的な研究のみならず、実用に関する基礎的な研究も是非行って頂きたい。最後に具体的な研究課題として、現在私も開発に携わっているマイクロビームによる顕微分光を一つ挙げておきたい。

4-6-3 国外委員の評価

原文

EVALUATION OF THE DEPARTMENT OF VACUUM UV PHOTOSCIENCE

In a Letter dated July 27, 1999, Professor Koji Kaya, Director General of the Institute of Molecular Science, asked me to review the Department of Vacuum UV Photoscience. It was both an honour and a true pleasure for me to accept this invitation, in particular since I have followed closely the scientific work at UVSOR for the past 15 years.

On November 6, 1999, I was welcomed to Okazaki by Professors K. Kaya and T. Urisu. As part of the review process I had one-hour long interviews on Nov. 8-9 with nine professors: Prof. T. Urisu, Prof. N. Kosugi, Associate Prof. K. Mitsuke and Associate

Prof. T. Tahara from the Department of Vacuum UV Photoscience; Associate Prof. M. Kamada and Associate Prof. E. Shigemasa from UVSOR Facility; Prof. K. Kurosawa (from Miyazaki Univ.), Associate Prof. K. Fukui (from Fukui Univ.) and Associate Prof. S. Nagaoka (from Ehime Univ.) as visiting professors to the Department of Vacuum UV Photoscience on two-year terms. On Nov. 9 I also toured the UVSOR Facility and was informed about the capabilities of the machine and the different beamlines. Professor T. Urisu had organized a most efficient schedule that made my visit very productive. This was my third visit to IMS and it was rewarding experience to take part of the continued great scientific progress.

My overall judgement is that the quality of science is excellent, as evidenced by an impressive publication record of articles in the most prestigious international journals in physics and chemistry. Several factors contribute to this and also point towards important future developments and are the base for my recommendations. The quality of the faculty and the junior scientists are high. The more senior faculty members are internationally well-recognized and world leading in their respective research fields. The younger faculty members and young scientists are doing impressive, independent work and are very promising for the future. The addition of top quality young scientists has been a healthy development for the Department and will continue to be an important factor for the future. The research profile of the Department has been strengthened during the last few years and it will be a challenge to keep up the dynamic developments. From the interviews I was particularly impressed that every faculty member had both well-defined and ambitious plans, and a clear vision, for the future research. I took also notice of the many collaborations, both national and international. The Department has always been known for its successful collaborative projects. These have been further strengthened over the years and have added to the high reputation of the Department. I consider these collaborative activities, also including the visiting professor programs, workshops and symposia, of critical importance for a continued dynamic development of the future research in the Department. In addition to research at UVSOR, ongoing and planned activities at other synchrotron radiation facilities will strengthen future programs and should be encouraged.

The research within the Department is well focussed on molecular science issues related both to the gas and condensed phases. There has been a continual effort to take part in the development of new fields, a fact which is very healthy to keep the department in the research frontier. It includes studies of; nanostructures, radiation stimulated processes on semiconductor surfaces, mechanisms for formation of negative-affinity surfaces, dynamics of ionization processes, excited states and molecular fragmentation, dynamics of superexcited states, different orbital contributions to resonances, and dynamics of photochemical/photophysical processes on the femtosecond timescale, to mention a few fields. In my opinion, the Department is doing research in the most active areas seen from an international point of view and will be a major contributor world-wide to the advancements of these fields in coming years.

The UVSOR has a central role for most of the research programs within the Department. Over the years there have been considerable investments in construction and upgrades of beamlines, insertion devices, monochromators and end-station equipment. The free-electron laser (FEL) is unique and belongs to a few storage-ring-based FELs worldwide with tunability down to very short wavelengths. The combination of conventional lasers with synchrotron radiation (SR) is the heart of many successful pump-probe experiments at UVSOR. Also the in situ combination of SR with other analysis and characterization techniques, *e.g.* infrared spectroscopy and tunneling microscopy, gives the Department unique research opportunities. Most noteworthy is also the exceedingly strong coupling between advanced computer model calculations and experiments, and the laboratory experiments using state-of-the-art femtosecond lasers.

From the discussion above my opinion should have become clear, namely that the Department has a very strong base to remain competitive in broad areas of molecular science in the future. But there are two issues which in my opinion should be given close

attention. My overall assessment is that there is a shortage of manpower in terms of both technicians and junior scientists. This problem is further enhanced by the fact the scientific and operational staff at UVSOR is very small (but extremely efficient, skilled and hard working !!). Therefore there is a danger that some research projects may become subcritical in terms of manpower to be scientifically effective. The other problematic area, in my opinion, is the age of the UVSOR storage ring. UVSOR is a second generation SR source and has by all standards been a great success and a very productive facility. In the long term future it will not be a competitive source with the third generation of sources in full operation. This will have serious consequences for the research programs in the Department. Therefore I strongly recommend that planning starts as soon as possible to upgrade or replace UVSOR. I am fully aware that initiatives have already been taken but a carefully planned, systematic and vigorous effort is necessary. I believe that a strong and compelling case can be made for an upgrade/replacement because of the following reasons. There are so heavy investments in beamlines, optics, end-station equipment and auxiliary instrumentation that the cost for an upgrade/replacement of the storage ring is just a small fraction of the existing and useful investments. The investment in human resources and expertise are also very substantial. Of course, all these investments are there because of the successful research programs based on UVSOR and the central role UVSOR has for IMS. With the existing investments and well developed infrastructure for operating a SR facility IMS should be in an excellent position to argue that an upgrade/replacement of UVSOR is a very cost-effective way of proceeding with state-of-the-art research in Japan. In my opinion, research in molecular should continue to be the focus of the facility with an upgraded/replaced storage ring but careful consideration should be given to what extent the research can be broadened in certain areas and also involve an expanded research community outside IMS.

In summary, the Department of Vacuum UV Photochemistry can look back at many extremely important and successful research accomplishments over the years and is well positioned to keep a leading role in molecular science world wide in the future. The future prospects and challenges are there to be met and should be a great stimulant for the Department. Personally I will follow the research in the Department with great interest and high expectations.

Stanford, November 22, 1999



Ingolf Lindau

Professor

訳文

極端紫外光科学研究系の点検評価

分子科学研究所長である茅幸二教授より1999年7月27日付けの手紙において 極端紫外光科学研究系の点検評価を行うことの依頼を受けた。この招聘を受けることは、この15年間UVSORの科学的成果を注目し続けてきた私にとって、大変名誉かつ真に嬉しいことであった。

1999年11月6日、茅教授と宇理須教授により岡崎に迎えていただいた。点検評価プロセスの一環として11月8日から9日にかけて、9名の教官のそれぞれ1時間にわたる面接を行った。9名の教官はそれぞれ、系からの宇理須教授、小杉教授、見附助教授、田原助教授、および、UVSOR施設からの、鎌田助教授、繁政助教授および、2年間の任期の流動研究部門の黒澤教授（宮崎大学から）、福井助教授（福井大学から）、長岡助教授（愛媛大学から）であった。11月9日にはUVSOR施設を見学し装置や異なったそれぞれのビームラインの性能について説明を受けた。宇理須教授は

私の訪問をもっとも効率的なものとなるよう計画してくださった。これは私にとって3回目の訪問で、継続する偉大な科学的進展に参画するというやりがいのある経験であった。

私の全般的判定は、非常に威信のある物理、化学分野の国際的学術雑誌に論文が掲載されていることに証されるごとく、科学的業績の質は非常にすぐれているというものである。いくつかの要因がこの判定に寄与しており、重要な将来の発展を指摘している、そして私の勤告の基本ともなっている。研究系および若手研究者の質は高い。年長の研究員は国際的に良く知られておりまた、それぞれの研究分野において国際的リーダーである。若い研究員および科学者は印象に残る独自の仕事をしており将来が囑望される。トップクラスの若い科学者を系の職員として加えることは系の健全な発展であり、将来にわたって重要な要因であり続ける。系の研究状況は過去数年にわたって強化され続けてきたし、さらに躍動的な発展を維持し続けることは挑戦すべきことである。面接において特に感じたことは、すべての研究員が明瞭な野心に満ちた計画と明確な展望を将来の研究にたいして持っていることである。また、多くの国内、国外との共同研究を遂行していることも注目に値する。系は多くのその成功裏に終わった共同研究プロジェクトで知られている。これらの点はここ数年にわたり強化され系の高い評価に加わってきた。これらの共同研究の活動は、流動研究員制度、ワークショップ、シンポジウムなども含め系の将来の研究の躍動的な発展にとって本質的に重要なことである。UVSORでの研究に加えて、他の放射光施設での進行中および計画中の研究活動は将来の系の計画を強化するものであり推奨すべきものである。

系内の研究はガス系および凝集系の両方に関連して、良く分子科学の問題に焦点が絞られている。新しい分野を開拓する絶え間ない努力がなされており、系が研究の最前線に保持し続けられているという健全さの事実である。いくつかの分野について言えば、ナノ構造の研究、イオン化過程の動的挙動、励起状態および分子の解離、超励起状態の動的挙動、共鳴への異なる電子状態軌道の寄与、光化学、物理過程のフェムト秒時間スケールでの動的挙動などの研究である。私の見解では、系は国際的観点から最も活発な研究分野において研究を展開していると言え、今後この分野における発展において、国際的レベルでの主たる寄与者となることであろう。

UVSORは系内のほとんど多くの研究プログラムにおいて中心的役割を担っている。何年にもわたって、ビームライン、挿入光源、分光器、およびエンドステーションの建設と高性能化にかなりの投資がなされてきた。自由電子レーザーは個性的で非常に短波長まで波長が可変と言う意味で国際的にも数少ない蓄積リング挿入型のものである。放射光と通常のレーザーを組み合わせる研究はUVSORで成功したポンプ-プローブ実験の代表的な成果と言える。また、SRと他の分析手法、例えば、赤外分光やトンネル電子顕微鏡などの組み合わせは系にユニークな研究機会を作り出している。また、先端的な計算機のモデル計算と実験結果との結合や高度なフェムト秒レーザーを用いた実験室での研究も最も特記するに値するものである。

以上のことより、私の意見は明瞭なごとく、この系は将来にわたって分子科学の広い分野にわたって競争力を保持できる強力な基盤をすでに有していると言える。しかし、私の意見として、注意を喚起したい二つの重要な問題がある。全体的な評価として、技術者と若い研究者層でのマンパワーが不足している。この問題はUVSOR施設の研究者や運転スタッフが非常に少ない事によってさらに深刻さが増幅されている(ただし、彼らは非常に能率的であり且つ熟練しており、良く働いている)。したがって、いくつかの研究プロジェクトがマンパワーの点で、有効な科学的成果を達成するために必要な規模を下回る危険性がある。私の見解として他の問題点はUVSOR装置の老朽化である。UVSORは第二世代の放射光光源で、平均的な水準から言えば、極めて非常な成功を収めてきており、非常に生産性の良い施設であった。長期的な将来展望において、しかし、フル稼働になった第三世代光源とは競争力をもたない。このことは、系の研究プログラムにおいて深刻な結果をもたらすであろう。したがって、私はUVSORをより高性能なものに改造す

るか、新しいものにおきかえる計画を出来るだけ早くスタートする必要があると勧告する。第一歩はすでに踏み出されていると思われるが、しかし、注意深く組織的にかつ精力的な努力が必要とされることを強く感じた。以下の理由で、高度化あるいは新装置導入について強い、説得力のある状況を作り出せると信じている。ビームライン、光学系、エンドステーション装置、および高性能な装置など、すでに相当な額の投資がしてあり、これらの現在有効に働いている投資に比べ、光源装置の高度化あるいは新設のコストはほんの一部にしかすぎない。人的資源およびその専門家教育になされている投資もまた非常に、かつ本質的に重要である。もちろん、これらのすべての投資は、UVSORの優れた研究プログラムおよび、UVSORが分子研において中心的役割を担っていることにもとづいている。これらの現存する投資と放射光装置を良好に動作させるに必要な基盤設備にもとづけば、分子研は、日本において最先端の研究を推進する上でUVSORの高度化あるいは新設は非常に経済的な道であると主張できる有利な状況にある。私の意見としては、高度化あるいは新設においても、分子科学研究を施設の目標とし続けるべきであろう。しかし、所定の分野でどの程度まで研究を拡大できるか、および、分子研外部の広い研究共同体をどの程度まで取り込めるかについては注意深い検討が必要である。

総体的に、振り返って、極端紫外研究系は過去何年間にわたり多くの極めて重要な研究の成功を達成してきており、将来においても国際的な分子科学の分野において指導的役割を保ち続けるであろう。将来への展望や挑戦は適切なものであり、系への大きな刺激となっている。私としても、系の今後の研究を大きな興味と期待を持って見守りたい。

スタンフォード，11月22日，1999

インゴルフ リンダウ

教授