4. 点検評価と課題

4-1 極端紫外光実験施設(UVSOR)

4-1-1 Bradshaw 博士による点検評価

極端紫外光実験施設(UVSOR)の現状と高度化計画について外国人評議員の Bradshaw 博士(Max-Planck プラズマ物理学研究所科学担当所長)の評価を受けた。以下にその報告書を掲載する。

なお,評価を受けたのは高度化計画が認められる前であった。

The UVSOR facility: a short appraisal

Introductory remarks

UVSOR is known mainly in the international community for its fine work in molecular photionisation, photochemistry and macromolecular physics. The author of this brief survey, a former scientific director of BESSY with research interests in molecular photoionisation and surface science, has been familiar with the research carried out at UVSOR for many years, but visited the facility itself for the first time during his stay at IMS from $21^{st} - 24^{th}$ October 2001.

Status of the beam lines

The machine has four straight sections two of which are used for insertion devices—a linear undulator (BL3A) and an undulator for circularly polarised light (BL5A), which is also used as an optical klystron for a free electron laser experiment. BL3A is equipped with an irradiation facility as well as with a constant deviation SGM used for the study of dissociative multiple photoionisation, unique among synchrotron radiation facilities. On BL5A there is a highly flexible SGM with an energy range of 5-250 eV which is used for high resolution spin- and angle-resolved photoemission studies of solids and surfaces. More insertion device beam lines are planned following an upgrade of the machine which is discussed below. There is also an impressive monochromator park on the bending magnet beam lines, including a further eight grazing-incidence monochromators and two crystal monochromators. A variable line spacing PGM has just finished trials on a bending magnet beamline (BL4B). Altogether there is a total of twenty measuring stations, including normal-incidence monochromators and beam lines for white light and IR. Eleven of these stations are used by outside users, i.e. by scientists from institutions other than IMS.

A brief overview of the research programme

It is not possible in such a brief account to do justice to the extensive research programme. The examples of world-class research work chosen by the author in the following are necessarily subjective and certainly influenced by his own research interests, as well as by some of the very fine talks he heard at a symposium held during his visit.

Both fluorescent decay and laser-induced flourescence have been used to study the photofragmentation of molecules such as

H₂O, OCS and CH₃CN following excitation with UV synchrotron radiation as well as to characterise the fragments. Similarly, the coincidence techniques PIPICO and AEPIPICO have been employed to study fragmentation in core-ionised CF₄, CD₃OH and CH₃CO, CD₃CN, respectively. The latter study was particularly interesting in that two-body dissociation with rearrangement was found to accompany N 1s resonant Auger decay to give CD2+ and DCN+ alongside the "normal" products (C2D3+ and N+) and (CD3+ and CN⁺). Similarly exciting is the increased level of understanding of core level photoabsorption of diatomic molecules acheived by both new experiments and theory. In particular, a very simple experiment has recently been conceived for the new variable linespacing PGM in which two identical detectors register the photoion current at 0° and 90° to the E vector of the incident synchrotron radiation. Since the absorption cross section will be largest when the transition dipole is aligned parallel to the E vector the anisotropy in the ion distribution will reflect the symmetry of the excited states. Thus for a linear molecule it is possible to distinguish between final states of π and σ symmetry. In the case of core level excitation of N_2 a previously unidentified state of π symmetry was found at 419 eV in the region of the σ shape resonance. Recent calculations by the same group show that this could be a bound state involving a triple excitation. Combined synchrotron radiation and laser experiments are likely to play a more important role at UVSOR in the future: The technique has already been used to study the time dependence of photo-induced phase transitions in inorganic systems as well as of the surface photovoltage (SPV) effect in semi-conductors. It was found, for example, that both for the GaAs(100) surface and for a GaAs-GaAsP superlattice that the laser-induced photoelectron core level shift is due to the SPV and that its decay can be observed on a microsecond timescale. Beamline BL6A2 has been upgraded for experiments of this kind and combined with a facility for photoemission investigations on surfaces with a spatial resolution in the micron range. A deeper understanding of the preparation and properties of Si surfaces has also been obtained, in particular of the hydrogen adlayers resulting from etching techniques. Infrared reflection-absorption spectroscopy played an important role in these measurements. Single crystal surface science studies at UVSOR have also shed new light on the chemisorption of simple molecules on metal surfaces. For example, it was shown that N₂O adopts a lying-down geometry on the Pd(110) surface and already dissociates at about 120 K, giving rise to several N₂ desorption states and leaving oxygen on the surface. Studies of the electronic structure and molecular orientation of polymer films continue at UVSOR, if not with the same intensity as in the past. Recently, angle-resolved photoemission and NEXAFS have been used to show that the heterocyclic pendant group in poly(9-vinylcarbazole) exhibits a larger average tilt angle at the surface than that expected on the basis of random orientation.

Planned upgrade and future emphasis

As is now widely known, an undulator is a periodic magnetic struture, or insertion device, which is inserted into the straight section of a storage ring, causing the electron (or positron) beam to oscillate transversally about its prescribed orbit. The intense beam of radiation produced in the forward direction is strongly peaked at one wavelength on account of the quasi-coherent addition of the radiation emitted from the points of maximum excursion. UVSOR is a so-called second-generation synchrotron radiation source which was planned and constructed at a time when the principle of the undulator was already known, but essentially untested. Third generation sources built in the last ten years are those which contain a large number of straight sections for undulators and wigglers. These, rather than the bending magnets, then provide the most important sources of synchrotron radiation on the storage ring. (The periodic excursions from the orbit are larger in the wiggler due to a stronger magnetic field and there is no quasi-coherent addition of the emitted radiation.) UVSOR has currently two undulators and a short wiggler with superconducting magnets which is intended as a "wavelength shifter."

A modification to the lattice of the storage ring ("upgrade") is currently in the planning stage. This will create—without changing

the circumference—four new short straight sections which can also be used for insertion devices. The new lattice can be created by

 $replacing \ all \ the \ separate \ quadrupole \ and \ sextupole \ magnets \ of \ the \ old \ lattice \ with \ "combined \ function" \ magnets \ which \ have \ both$

quadrupole and sextupole fields. The bending magnets would remain unchanged. A further attractive feature of the upgrade would

be the lower emittance (27 nm-rad as opposed to 165 nm-rad) which is an important factor in obtaining high spectral resolution and

high photon flux on the various monochromators installed on the beam lines. The use of specially constructed in vacuo undulators

with gaps as narrow as 10 mm will give access to the photon energy range up to 500 eV with the first and third harmonics. The short

length available (1.5 m) for the undulators in the new straight sections means that the flux and pseudo-monochromaticity will be

somewhat lower at these photon energies than on storage rings with electron energies in the 1-2 GeV range. However, UVSOR will

still become competitive in this important soft x-ray region where very exciting work is currently being performed at facilities such

as MAX II (Lund), ALS (Berkeley), ELETTRA (Trieste) and BESSY II (Berlin).

At the same time, the author of this report is of the opinion that it is very important to maintain, and to expand, the undulator

capacity for photon energies from 10 to 100 eV. Storage rings with electron energies of the order of 750 MeV optimally provide first-

harmonic undulator radiation in this photon energy range. The last few years has seen a reduction in the number of such facilities

 $available\ world-wide.\ BESSY\ I\ has\ been\ closed;\ Super-ACO\ in\ Orsay\ will\ suffer\ the\ same\ fate\ when\ the\ construction\ of\ SOLEIL$

begins; MAX I is used as part of the injection system for MAX II; the ISSP ring in Tokyo has been dismantled; further, it is not clear

how long the UV ring in Brookhaven will remain in operation. UVSOR has the unique opportunity—particularly with the upgrade—

of becoming the prime facility world-wide offering undulator radiation of very high spectral brilliance in the far UV up to 100 eV

primarily for experiments in surface and solid state physics, for fundamental photoionisation studies (e.g. in the inner valence

region) and for photochemistry.

The scientific programme already has many highlights, a few of which have been described briefly above. In line with the mission

of IMS the main thrust of these activities lies in photochemistry (including surface photochemistry), molecular photoionisation and

polymer science. However, there are several areas, particularly in surface and solid state physics, which are not as strongly represented

as they could be, even though UVSOR has a very good monochromator park. (After the upgrade it will no doubt improve further!)

This imbalance is all the more surprising since the ISSP ring is no longer in operation and one might have expected that outside users

particularly in the area of solid state physics would have shown greater interest in coming to Okazaki. It therefore seems necessary—

parallel to the implementation of the upgrade—to recruit new users or to initiate new activities at IMS itself in areas such as high

energy and high angular resolution photoemission, spin-polarised photoemission, high spatial resolution photoelectron microscopy

and photoelectron diffraction. This would establish UVSOR as an important multi-disciplinary, and internationally unique, facility

with its most important areas of research focussed on the far UV.

M. Bradshaw

Garching, November 2001

UVSOR 施設についての短い評価

序

UVSORは分子の光イオン化、光化学や大きな分子の物性物理を主として詳細に研究する施設として国際的に知られている。以前、私は BESSY 施設の科学担当施設長の職にあったときに分子の光イオン化と表面科学の研究に興味を持っていたので、UVSOR で行われていた研究には長年、馴染みがある。しかし、施設を実際に訪問したのは2001年10月21日から24日、分子研に滞在したときが初めてである。

ビームラインの現況

光源は4つの直線部を持ち、そのうち2本は直線偏光アンジュレータ(BL3A)と円偏光アンジュレータ(BL5A)に利用されている。後者は自由電子レーザーのためのオプティカルクライストロンとしても使われている。BL3Aは世界の放射光施設を見ても例がない照射ラインと定偏角球面回折格子分光ラインの2つを備えている。後者は解離性多重光イオン化の研究に利用されている。BL5Aには固体や表面の高分解能スピン、角度分解光電子分光研究のために5-250eVをカバーする非常に自由度のある球面回折格子分光器がある。後述するように光源の高度化のあとにもっと多くの挿入光源ビームラインが計画されている。また、偏向磁石ビームラインには8基の斜入射分光器や2基の結晶分光器など印象深い分光器群がある。不等間隔刻線平面回折格子分光器も1基、偏向磁石BL4Bビームラインにあり、今、最初の試行実験が行われているところである。直入射分光器や白色光や赤外線のビームラインを含めて全体で20基の実験ステーションがある。そのうち、11基のステーションが外部利用者(つまり、分子研以外の組織の研究者)によって施設利用されている。

研究プログラムの概観

広範な研究プログラムをこのような短い説明で評価することはできない。以下で私が選んだ世界水準にある研究例は、滞在中に開かれたシンポジウムで聞いた詳しい発表の中の数件と私自身の研究の興味に従ったものである。

真空紫外励起による H_2O , OCS, CH_3CN などの分子の光断片化の研究やフラグメントの同定に蛍光脱励起とレーザー誘起蛍光が用いられている。同様に ,内殻イオン化された CF_4 , CD_3OH , CH_3CO , CD_3CN の断片化の研究のためにPIPICO や AEPIPICO のコインシデンス法が用いられている。後者では CD_3CN の N1s 共鳴のオージェ脱励起において C_2D_3 + と N+ とか CD_3 + と CN+ のような通常の 2 体解離の生成物の他に分子内転位を含む CD_2 + と DCN+ という 2 体解離が起きることが見つかっており , 特に興味深い。

同様に新しい実験と理論によって 2 原子分子の内殻吸収の理解が増していることにも感嘆した。特に , 新しい不等間隔刻線平面回折格子分光器を利用して非常に単純な実験が行われている。その実験では入射光の電場ベクトルに対して0°と90°の角度でイオン電流を測定する 2 つの同じ検出器を用いている。遷移双極子が電場ベクトルに平行になったときに最も吸収断面積が大きくなるので , イオンの分布の異方性が励起状態の対称性を反映することになる。このようにして線形分子の励起終状態で , の対称性の区別が可能となる。 N_2 の内殻励起で , 形状共鳴の領域の 419 eV あたりにこれまで知られていなかった 対称性の状態が発見された。同じ研究グループの計算によって 3 電子励起を含む束縛状態であることが示された。

放射光とレーザーの併用実験は将来,UVSORでより重要な役割を果たすように思える。すでに併用実験は無機系の光誘起相転移や半導体の表面光電位効果(SPV)の時間依存性の研究で行われている。例えば,GaAs(100)表面とGaAs-GaAsP超格子の両方でレーザー誘起光電子内殻準位シフトが SPV によること,その緩和時間がマイクロ秒のスケールであることが見つかっている。この種の実験のためにビームラインBL6A2の性能向上がなされ,ミクロン領域の空間分解能の固体表面光電子分光装置がつながっている。Si 表面の形成と性質,特にエッチング法から水素吸着相,についてのより深い理解も得られている。この種の測定には赤外反射・吸収分光が重要な役割を果たした。UVSORでは単結晶表面の研究によって金属表面上の単純な分子の化学吸着に関して新しい知見を与えている。例えば N_2 OはPd(110)表面に寝て吸着するが,約120 K ですでに解離し,いろいろな N_2 脱離状態を与え,酸素が表面から出ていくことが示されている。ポリマーフィルムの電子構造と分子配向の研究は昔と同じ力の入れ方ではないにしても,これまでずっと UVSOR で続いている。最近,角度分解光電子分光と NEXAFS を使ってポリ(9・ビニルカルバゾール)のヘテロ環状ペンダント基が無秩序に配向したときに予測される角度よりも大きな角度で表面に対して傾いていることが示された。

高度化計画と将来の強化策

今広く知られているようにアンジュレータは周期的な磁気構造を持っており、電子蓄積リングの直線部に挿入デバイスとして挿入される。そして、電子(あるいは陽電子)に対して、定まった軌道を横方向にうねらせる。前方進行方向に出る強い光ビームは、電子のうねりの最大振幅の各点から放出される放射光の準干渉的な重ね合わせによって一つの波長に強いピークを形成するようになる。UVSORはいわゆる第二世代のシンクロトロン放射光源であり、アンジュレータの原理は知られていたものの、実機テストが全く行われていなかった時代に計画され、建設された。最近10年間に作られた第3世代光源はアンジュレータやウィグラのための多数の直線部を含んでいる。偏向磁石よりもむしろ直線部の挿入光源が蓄積リング放射光として最も重要な光源となっている。(ウィグラーではより強い磁場のために軌道からの周期的な振幅が大きくなり、放射光が準干渉的に重ね合わさるわけではない。)UVSORは2つのアンジュレータと波長シフトのための短い超伝導ウィグラーひとつを備えている。

蓄積リングのラティスの改善("高度化")は現在,計画段階にある。周長を変えることなく4つの短直線部を作り出し,それは挿入光源にも用いることができる。古いラティスに使われている分離型の4極磁石と6極磁石の全部を4極・6極複合機能磁石で置き換えることで新しいラティスが作られる。偏向磁石は不変である。高度化のより魅力的な特性は低エミッタンス化(165 nm-rad に対し27 nm-rad)であり,低エミッタンス化はビームラインに導入されている多様な分光器で高いスペクトル分解能と高い光フラックスを得る場合の重要な要素である。10 mmまで狭いギャップを許す特別仕様の真空封止アンジュレータの利用によって,3次と5次の高調波を使って500 eVまでの光エネルギーまで可能となる。新しい直線部のアンジュレータ用に1.5 mの短直線が利用できる。このアンジュレータは電子エネルギーが1~2 GeV 域の蓄積リングに置いた場合よりもフラックスや擬単色性において若干低くなる。しかし,この重要な軟 X線領域では非常に魅力的な研究が現在,MAX II(Lund),ALS(Berkeley),ELETTRA(Trieste),BESSY II(Berlin)などの施設で行われており,UVSOR も軟 X線領域で競争力を持つことになろう。

同時に私はアンジュレータの性能を 10 から 100 eV の光エネルギーで発揮させることが非常に重要であるという意見を持つ。750 MeV クラスの電子エネルギーを持つ蓄積リングはアンジュレータの 1 次光としてこの光エネルギーの

領域を得るのに最適である。最近数年間,世界を見渡すとこのような施設の数が減少してきている。BESSY I は閉鎖された。Orsay の Super ACO は SOLEIL の建設が始まると閉鎖の運命が待っている。MAX I は MAX II の入射器として部分的に利用されるようになった。東大物性研リングは撤去された。さらに Brookhaven の UV リングの寿命もどのくらいあるか,はっきりしない。UVSOR は主に表面や固体物理の実験,基礎的な光イオン化研究(例えば,深い価電子領域において),光化学のために真空紫外から 100 eV で非常に高輝度なアンジュレータ光を提供する世界的な主要施設となるという他施設にない機会(特に高度化が行われたら)を有している。

すでに研究プログラムは多くの成果を生み出しており,その一部の概要は上述したとおりである。分子研の使命に沿って,研究活動の推進力は表面を含む光化学,分子の光イオン化とポリマー科学にある。しかし,いろいろな研究領域がある。特に UVSOR に非常に優れた分光器群があり(高度化後は疑いもなくさらに改善される!),やれば可能であるにも関わらず,あまり強化されていない表面および固体物理においてそうである。さらに,物性研リングがもはや運転しておらず,特に固体物理の分野の研究者が岡崎に来ることに大いに興味があるはずと予想できるので,このようなバランスの欠けた状態に一層驚かされた次第である。そのため,高度化の実現と並行して,高分解能なエネルギー・角度分解光電子分光,スピン分解光電子分光,高空間分解能光電子顕微鏡や光電子回折のような領域で新しい利用者を呼び込むか,あるいは分子研内部で新しい研究活動を生み出すことが必要のように思える。このことでUVSORは真空紫外域に的を絞った研究の中で最も重要な研究分野を受け持つ学際的で国際的にも無比の定評ある施設になるであろう。

4-2 外国人研究者による点検評価

4-2-1 Hochstrasser 教授による評価

__ 原文

June 27, 2001

Professor Koji Kaya Director General Institute for Molecular Science Okazaki National Research Institutes Myodaiji, Okazaki 444-8585 Japan

Dear Professor Kaya:

I have read through the reports of IMS research on spectroscopy and photoinduced processes. It made very interesting reading and I was very impressed with the scope of the IMS effort. I could make specific statements about some projects but I don't think that would serve you much purpose. The research is often excellent and there are some internationally outstanding components in traditional branches of molecular science and in the areas of new materials, photochemistry and biophysical sciences. While the quality and breadth of science in IMS is exceptional when the projects are taken on an individual basis, there are major programmatic areas where IMS could take international leadership in a broader sense.

Based on my reading of the IMS Annual Report I want to mention three areas of possible development where a wide variety of spectroscopic and photochemical methods will be absolutely necessary in order to make significant advances. Some aspects of these fields are represented already but do not appear, at least from my reading, to be main thrusts. These areas are: molecular scale devices; biodynamics in the post-genomics era; and the physical chemistry of the environment.

The last several years have witnessed a revolution in polymer electronics, fullerenes and carbon nanotubes, self-assembled monolayers, metallocene catalysts, combinatorial libraries, nanocrystals, and many others. Some of these discoveries have already made it into commercial products. However, shouldn't we as molecular scientists be moving toward molecular scale devices? This shift requires learning how to optically detect and change the properties of individual molecules in condensed phases, to control nanocrystals and mesostructured materials on the molecular scale, to demonstrate single electron devices, and fabricate molecule-sized elements with sufficient complexity to allow internal propagation of information, as well as communicating to it with nanowires, laser beams, or by other means. Molecule scale based research will involve studies of quantum phenomena, size and scaling laws, electronic structure, phase diagrams, kinetics and thermodynamics of self-assembly, surface and interface effects, surface attached molecules, unique structured nanocrystals, cluster-assembled matter, mesoscopic and mesoporous structures, fluctuations and collective phenomena, digital properties of single molecules, thermal fluctuations, and kinetics for single objects vis-à-vis ensembles. Probe molecules need to be designed for efficiency, stability, control of coupling between units having simultaneous readout, designer architectures and self-replication. I note that IMS has excellent projects in the field of molecular nanotubes, ionic interactions, soft materials and molecular self assembly.

Molecular science is beginning to face the challenges presented by regulatory networks; in my view it can move toward the

chemical bond understanding of functional genomics and molecular biology. This move will require more knowledge of the storage and transfer of energy and information, networking, information distribution, molecular motors, genomics, special properties of soft materials, and mechanisms of self-assembly. It was molecular scientists who made possible the field of structural biology whereby the structures of the molecules and assemblies that are essential to life are obtained at atomic resolution. In the future the achievement of molecular scale moving pictures of complex biological processes will generate significant technological and conceptual progress that will also greatly advance other fields of chemistry and materials science. For example, various approaches to rapid time resolved diffraction and spectroscopy over the widest possible range of time scales are needed. Single molecule imaging methods combining optical tweezers, confocal and near-field microscopy, and AFM are permitting the observation of individual proteins, motors, photoreactive molecular systems and assemblies belonging to a variety of length scales undergoing change over many orders of magnitude of time. A number of different dynamic scanning tunneling microscopies and multidimensional spectroscopic analogues of NMR in the terahertz, infrared and optical regime can greatly extend our knowledge of structural changes. Of course the basic chemical processes of molecular science are involved, such as electron transfer, proton transfer, energy transfer, structural control of barrier crossing, tunneling and elementary reaction dynamics, nonlinear dynamics, self-assembly and the dynamics of water. Many of these phenomena are already studied at IMS especially in areas related to creative applications of vibrational spectroscopy to questions in structural biology. However the influence of the post-genomic challenges are not yet evident. We need the development of tools for the investigation of single cells, biological sensors, micro electro-mechanical systems, for rapid processing of structural information, and for creating a molecular biology laboratory on a single chip.

Last but not least, the chemistry of the environment also requires an understanding of fundamental mechanisms at the molecular level, through developments of heterogeneous reactions, kinetics at the interface between solids, liquids and gases, and a fundamental understanding of radical-molecule reactivity.

I hope this discussion proves useful and could at least form the basis for your discussions of new directions and needs in molecular science. I very much enjoyed meeting you last month.

Sincerely yours,

Robin M. Hochstrasser

Donner Professor of Science

2001年6月27日

訳文

親愛なる茅教授

分子科学研究所における分光と光誘起過程についての研究レポートを読ませていただいた。たいへん興味深いレポートで,分子研の幅広い努力の成果にたいへん感銘を受けた。いくつかの研究に関して具体的な意見を述べることはできるが,それはここで求められていることではないと思う。分子研で行われている研究にはすばらしいものがあり,分子科学の伝統的な領域や,新物質,光化学,生物物理科学の分野において,国際的に傑出しているといえるものがある。個々の研究としてみた場合,分子研でおこなわれている研究の質と広がりはすでに例外的にすばらしいといえるが,より広い意味で,分子研が国際的に指導的役割を果たすことのできる計画分野があると思う。

分子研アニュアルレポートを読んだことをもとに 発展する可能性のある3つの領域について言及したいと思う。こ

れら領域の進展のためには、いずれも多様な分光学的・光化学的な研究手法が絶対に不可欠であろう。これらの分野のいくつかの側面についてはすでに述べられているが、少なくとも私がレポートを読んだ範囲では、いまだ主として推進されているとは見受けられない。これらの分野とは、分子スケールのデバイス、ポストゲノム時代の生体動力学、そして、環境の物理化学、である。

過去数年にわれわれは,高分子エレクトロニクス,フラーレンとナノチューブ,自己組織化単分子層,メタロセン触媒,コンビナトリアルライブラリー,ナノ結晶をはじめとする多くの革新を目の当たりにした。これらの発見のいくつかはすでに製品化に結びついている。しかしながらわれわれは,分子科学者として,分子スケールのデバイスへ向かって進むべきではないのだろうか? それを行うためには,凝縮相にある分子の一つ一つを検出しその性質を変える方法や,ナノ結晶や分子スケールの中間構造をもつ物質を制御する方法や,単電子デバイスを実現する方法を学ばなければならない。内部での情報伝達が可能となるのに十分な複雑さをもつ分子サイズの素子を作ったり,また,それとナノワイヤー,レーザービーム,あるいはその他の手段でやりとりしたりする方法を学ばなければならない。分子スケールに基盤をおく研究は,量子現象,サイズとスケール則,電子構造,相図,自己組織化の速度論と熱力学,表面と界面の効果,表面吸着分子,特殊な構造をもつナノ結晶,クラスター集合体,メゾスコピック・メゾ空孔構造,揺動と集団現象,単一分子のデジタル的な性質,熱揺動,統計集団にあい対する単体の速度論の研究を含むであろう。プローブとなる分子は,効率,安定性,同時読み出しをもつユニット間結合の制御,デザイナー構造,自己複製化という観点で設計される必要がある。分子ナノチューブ,イオン相互作用,ソフトマテリアル,分子自己組織化の分野で,分子研は傑出した計画を持っていることを書き留めておく。

分子科学は制御ネットワークによって提示された挑戦的問題に直面しつつある。私の見るところでは,それは機能 的ゲノム学や分子生物学の化学結合レベルでの理解へと向かう可能性がある。この動きは、エネルギーや情報の蓄積 と移動,ネットワーク化,情報の分配,分子モーター,ゲノム学,ソフトマテリアルの特別な性質,自己組織化のメ カニズムに対するさらなる知識を要求するだろう。分子科学の研究者たちこそが構造生物学を可能ならしめたのであ り、そこでは生命に本質的な分子や組織の構造が原子の分解能で得られているのである。将来、複雑な生物学的過程 を分子スケールでの"動く絵"として見ることができるようになるならば,それは重要な技術的・概念的進歩を生み 出すだろう。またそれは化学や物質科学の他の分野をも大いに発展させるであろう。たとえば、きわめて広範囲な時 間スケールをカバーするような高速時間分解回折法・分光法へのさまざまなアプローチが必要になる。光ピンセット, コンフォーカルや近接場顕微鏡, AFM などと結びついた単一分子イメージング法によって, 多様な長さのスケールを もち、また何桁にもわたる時間スケールの中で変化する、個々のタンパク質、モーター、光反応分子システム・集合 体の観察が可能になってきている。いくつかの異なる動的 STM やテラヘルツ・赤外・光学領域での NMR の類似物で ある多次元分光によって、構造変化に関する知識を大いに広げることが可能である。もちろん、電子移動、プロトン 移動,エネルギー移動,障壁越えの構造による制御,トンネル現象,素反応ダイナミクス,非線形ダイナミクス,自 己組織化、水の動力学などの分子科学の基本的な化学過程も含まれる。これらの現象の多くは、とくに構造生物学の 問題に対する振動分光学の創造的な応用に関する分野で,すでに分子研において研究されている。しかしながら,ポ ストゲノム的な挑戦的課題の影響は未だ明確に現れていない。われわれは、単一の細胞、生物学的センサー、微小な 電気-機械システムを調べる手法や,構造の情報を高速処理する方法や,また単一チップ上の分子生物学的ラボを作 るための方法を開発しなくてはならない。

最後に,これも大事なことであるが,環境の化学もまた,不均一系反応の開発,固体・気体・液体の界面の速度論, ラジカルと分子の反応性の基本的な理解を通じて,分子レベルでの基礎的メカニズムの理解を要求している。 私はこの議論が役に立つこと,少なくとも,分子科学の新しい方向やニーズに関するあなた方の議論の基盤になり うることを願っている。先月,あなたにお会いできて大変楽しかった。

ロビン M. ホッホシュトラッサー

4-2-2 Lineberger 教授による評価

原文

January 3, 2002

Professor Koji Kaya

Director General

Institute for Molecular Science

Okazaki National Research Institutes

Nishigonaka 38

Myodaiji, Okazaki 444-8585

JAPAN

Dear Professor Kaya:

It is my very great pleasure to report on my first visit as a foreign councilor, over the period December 1 – December 8, 2001. In your letter to me, you ask that I pay particular attention to the faculty of the Department of Electronic Structure, the Department of Molecular Structure and the UVSOR facility. In addition, you specifically ask me to comment on your new molecular nanoscience initiative. All of your faculty were extremely gracious and generous of their time in providing me all of the materials I needed to carry out this report in the four days available. It was a very stimulating visit, and I am delighted to report on the visit in the remainder of this letter.

Department of Electronic Structure

The activities of this department are an extremely well integrated and coordinated set of programs. The complementary nature of the various studies enhances all of them, and also provides for strong coupling with the theoretical group. Professor Nishi is very successfully carrying out a research program that extends from macro sized objects to small molecule dynamics in liquids. His new work on cluster molecular magnets is spectacularly good and may well lead to very useful results. His work on condensed phase dynamics and structure of clusters continues to be outstanding and recognized internationally. This work is complemented beautifully by the broad-based cluster studies of Professor Fujii, carrying out a broad series of programs of infrared and visible ultrafast dynamics in selected molecular clusters. The work on time-resolved ion dip spectra with infrared excitation is spectacularly successful, and will certainly be emulated in many locations. Although Professor Fujii is carrying out many projects, they are all quite interesting and successful, and he has the energy to devote to each of them!

Also of special note in this Department is the program of time resolved photoelectron imaging studies originated by Associate Professor Suzuki. His very clever use of rotational coherences to obtain important alignment-free dynamical information on an ultrafast timescale is extremely clever and has caught the broad attention of the international dynamics community. Professor

Suzuki is a frequent lecturer on reaction dynamics at many major conferences and institutions throughout the world. He is the central figure in the strong Japanese program in molecular reaction dynamics. He is also extremely dedicated to the education of students and his broader roles as a scientist.

Associate Professor Tsukuda is a relative newcomer to IMS, but I have known much of his work in gas phase and cluster science that was carried out with Professor Kondow. In a short time at IMS, Tsukuda has assembled a remarkable tandem time of flight mass spectrometer to study metal clusters that have been dispersed in liquid phases, and he has also begun characterization of transition metal clusters encapsulated within dendrimers. This work, now in its infancy, seems to me to be one of the very important future directions of cluster science, and ties in beautifully with the earlier work of Tsukuda and with the work of his collaborators at IMS. Overall, he represents an outstanding addition to the faculty of IMS.

Department of Molecular Structure

Professor Okamoto is establishing a very exciting new program to carry out near-field optical spectroscopy with femtosecond resolution. He has some very exciting ideas to carry out studies of energy transfer in nanostructures, studying transient species ultrafast resolution. In a very competitive field, his ideas stand out as very promising and innovative. This work, which is just now bearing the first fruits of success, represent an important and significant addition to IMS and will play a key role in your new studies of nanomaterials.

Professor Kitagawa continues to be a world leader in the application of time resolved resonance Raman spectroscopy to important biophysical problems. He continues to be active in a remarkably broad area of problems. The work on ultrafast dynamics of myoglobin and the structures of reaction intermediates in Cytochrome c_3 oxidase are especially noteworthy. By judicious use of collaborators and finding ways to obtain sample materials, he has been extremely successful in applying state-of-the-art physical methodologies to important problems in biophysical chemistry.

Associate Professor Kato has established an important reputation for himself and for IMS in his studies of fullerene chemistry. In newer work, I find his high-field ESR studies of endohedral fullerenes encapsulated by two metalloporphyrins connected by rigid hydrocarbon groups to be especially interesting and exciting. These systems provide a rigid framework for the interaction for three spatially separated, high-spin systems, and can provide direct information on important chemical interactions. His very new work on Raman spectroscopy of relaxation in liquid crystals holds great promise and fits very nicely into the new materials initiatives at IMS.

Associate Professor Morita is carrying out very interesting and exciting fundamental studies of trapping metastable helium atoms using doughnut mode laser beams, and studying atoms and ions in liquid helium. The studies of excitation of metal atoms in liquid helium provide a very important contrast to the corresponding studies in finite He clusters, and the studies of fine structure changing collisions of atomic ions with molecules provides important new insight into anisotropic interactions. The trapping and cooling ideas are very, very clever and innovative; it is unfortunate that Professor Morita's group has been so small, for it is very difficult to compete in this area with a small group.

UV Synchrotron Radiation Group

The UVSOR facility was commissioned about 20 years ago, and has been one of the very significant second-generation UV light sources. During its existence, there have been a large number of important studies, in the gas phase and especially in solids, carried

out using this facility. However, this is a second-generation light source, and it will become increasingly non-competitive as third-

generation light sources are come on line, and fourth-generation sources are on the design drawing boards. While I understand that

numerous (unsuccessful) attempts have been made in the past to upgrade this facility, it now sounds like there is a reasonable chance

to carry out a significant upgrade of this light source. Such an upgrade is absolutely essential, if this source is to remain competitive

and to carry out gas-phase experiments or pump-probe experiments. Professor Kosugi provided a very thorough and interesting tour

of UVSOR facility, and showed me the detailed plans for the upgrade of this facility and the programs for synchrotron research at

IMS. While there are clearly important and exciting scientific objectives, the upgrade remains critical for this facility to be

internationally competitive.

Nanostructure Science Initiative

Professor Nishi gave me a thorough and exciting summary of the prospects for this facility. As he explained, the emphasis of this

facility will be on the molecular aspect of nanoscience, taking the fullest advantage of the wonderful treasure of expertise at IMS.

This is a very important focus on nanoscience, rather than just nanotechnology or nanomaterials. As we continue in this exciting

new field, I am certain that it will become increasingly clear that molecular level understanding is the tool that will provide the

truly exciting new developments. In my opinion, IMS abundantly possesses the molecular-based scientific excellence that will

provide it a unique and important role in this important new area of science and technology.

Summary

Overall, I was extremely impressed with the high quality of the science and the faculty of the Institute for Molecular Science. The

Institute enjoys a well-deserved international reputation for excellence in its research in molecular science. The new faculty persons

and the new initiatives that you have proposed are directed appropriately, and promise to keep IMS as a world leading research

organization. The balance that you are attempting to strike between basic science and technology applications is a particularly

delicate and important one, and I am very pleased to see that IMS is prepared to address the central importance of molecular science

in all of these programs. That is the correct answer, and you deserve all of our appreciation for continuing to keep this focus for your

Institute.

I look forward to a return visit to IMS!

With best wishes,

W. Carl Lineberger

E.U. Condon Distinguished Professor

W. Carl Linebugar

of Chemistry and Biochemistry

Fellow of JILA

PS. I would be remiss to write you without expressing my deep appreciation for the outstanding job that Professor Toshinori Suzuki did in arranging my trip and the visits to IMS faculty. His dedicated efforts made it possible for me to see an enormous amount of IMS in four days, and I am very grateful to him.

______ 訳文

茅教授 殿

外国人評議員として初めての貴研究所への訪問(2001年12月1日から8日まで)について報告させていただくことを光栄に存じます。茅先生は私への手紙の中で,電子構造,分子構造,そして極端紫外光実験施設の教授に対して特に時間を割いて欲しいと依頼されました。また,分子ナノサイエンスについての新しい取り組みについて意見を求められました。教授陣の皆さんは非常に丁重かつ寛大に時間を割いて必要資料を提供して下さり,4日間という限られた(面接)時間で,報告をまとめることができました。この訪問は大変刺激に富んだものでした。その報告を以下に記すことを大変嬉しく思っております。

電子構造研究系

この系の研究活動は、極めて良く統合され組織化されています。相補的な性質を持った様々な研究が互いの研究を強め合うと共に、理論研究グループとの強い連携を生み出しています。西教授は、巨視的な大きさの物質から溶液中の小分子の動力学にわたる研究プログラムを展開し、大きな成功を収めています。分子クラスター磁石に関する彼の新しい研究は非常に優れた仕事で、将来有用な結果につながる可能性があります。彼の溶液中での分子動力学やクラスター構造に関する研究は、今後とも傑出した仕事として国際的に評価を受け続けるでしょう。そして、この仕事は藤井教授の多岐に渡るクラスター研究、分子クラスターに関する赤外及び可視域の超高速動力学の研究とも見事に補い合う関係にあります。藤井教授の時間分解イオンディップスペクトル法による赤外分光の仕事は大成功を収めており、間違いなく多くの研究機関で追随されることでしょう。藤井教授は多くの研究プロジェクトを抱えてはいますが、それらはどれも非常に興味深く成功してもいますし、彼は全ての課題について取り組める十分なエネルギーを持っています!

この系でもう一つ特筆すべきことは,鈴木助教授が開発した時間分解光電子画像観測法の研究プログラムです。回転コヒーレンスを利用して分子整列状態によらない超高速動力学情報を得るという彼の巧妙な手法は極めて独創的なものであり,反応動力学に関する国際的な研究者集団の注目を広く集めています。鈴木助教授は,世界中の多くの有力学会や研究機関において反応動力学に関する招待講演を頻繁に行っています。彼は,反応動力学に関する優れた日本の研究プログラムの中の中心人物です。彼はまた,学生の教育や科学者として果たすべき多くの仕事について非常に良く献身しています。

個助教授は比較的最近着任した分子研の新人ではありますが、彼が近藤 保教授と共に行った気相やクラスター科学の研究について、私は良く知っています。分子研着任後の期間は短いものの、個は、優れたタンデム飛行時間型質量分析器を組み上げ、液相で分散された金属クラスターの研究を行うと共に、デンドリマー内部に包接された遷移金属クラスターの分析を開始しています。この仕事は未だ始まったばかりですが、クラスター科学の極めて重要な将来の方向を示しているように私には思え、そしてまた個自身の以前の仕事と分子研の共同研究者の仕事を非常にうまく融合したものだと思っております。総合して、彼は傑出した分子研の新しい教授陣を代表しています。

分子構造研究系

岡本教授は、近接場光学分光をフェムト秒の時間分解能で行う新しい画期的なプログラムを確立しつつあります。彼は、ナノ構造体におけるエネルギー移動を研究するための素晴らしいアイディアを持っており、過渡的な分子種を高い時間分解能で研究しています。これは競争の激しい研究分野ではありますが、彼のアイディアは極めて有望で斬新なものです。この仕事は、まだ最初の成果を実らせつつある段階ですが、分子研にとって重要で意義深い新しい仕事であり、ナノ物質に関する研究で将来中心的役割を果たすものと思っております。

北川教授は、時間分解共鳴 Raman 分光を重要な生物物理学的諸問題に展開し、この分野を世界的にリードし続けています。彼は、非常に多彩な研究課題について活発な研究活動を継続しています。ことに、ミオグロビンに関する超高速動力学とチトクローム c_3 オキシダーゼに関する仕事は特筆すべきものです。思慮深く共同研究者の助力を借り、試料を得る方策を得ることで、彼は最先端の物理的方法論を生物物理化学の重要な諸問題に適用し、大きな成功を収めています。

加藤助教授はフラーレンの化学によって、彼自身にとっても分子研にとっても大変重要な評価を勝ち得ています。新しい仕事の中では、共有結合炭化水素鎖でつながった2つの金属ポルフィリンで包摂される金属内包フラーレンの仕事が非常に面白いと私は思っています。このような系では、かたい分子骨格によって空間的に分離された3つの高スピン系が相互作用するため、化学的に重要な相互作用に関する情報が直接得られるからです。また、彼のさらに最近の仕事である、液晶中での緩和に関するRaman分光は将来有望で、分子研の新しい物質探索の研究の方向とも良く合っています。

森田助教授は,ドーナツ型モードのレーザーを使って準安定へリウム原子を空間捕捉する非常に興味深く画期的な基礎研究を行っており,また液体へリウム中での原子やイオンをも研究しています。液体へリウム中で励起された金属原子に関する研究は,有限な大きさのヘリウムクラスター中での研究とは対照的で非常に興味深く,また分子との衝突による原子の微細構造間遷移の研究は異方性相互作用に関する重要な新しい知見を与えるものです。原子の捕捉法や冷却法に関する彼のアイディアは,極めて巧みなものであり独創的と言う他はありません。しかしながら,この研究領域では小さな研究グループで競争していくことは至難の業であり,森田助教授の研究グループがあまりにも小さいことは大変残念です。

極端紫外光実験施設

極端紫外光実験施設は約20年前に設立され,以来非常に重要な第二世代の紫外光光源の一つとなってきました。その間,この施設を使って,多くの重要な研究が気相や特に固相において為されております。しかし,この施設は第二世代の光源であり,第三世代光源が登場し第四世代が設計段階に入る状況となって,次第にその競争力を失っていく運命にあります。私は,過去にこの施設の性能を向上させるための数多くの努力が失敗に終わったことをお聞きしましたが,しかし,今はこの光源を改良できる可能性があるという印象を受けました。もし,この施設が競争力を維持し気相の研究やpump-probe 法の研究を行う計画ならば,このような改良は不可欠です。小杉教授には,極端紫外光実験施設の隅々まで御案内頂き,施設の詳細な改良や軌道放射光を使った研究活動について知ることができました。明らかに重要で面白いと思える研究目標が存在する限り,国際的競争力を持つために施設の改良は重要でしょう。

ナノ構造科学の研究計画

西教授から,この施設のすばらしい将来計画について詳しくお聞きしました。御説明によれば,この施設は特にナ ノサイエンスの分子的な諸問題に的を絞り、分子研が得意とする研究分野の素晴らしい蓄積を最大限に生かすという ことです。単なるナノテクノロジーやナノマテリアルよりも、ナノサイエンスに焦点を当てるというこの方針は極め て重要です。というのは、この新しい分野の研究が進むにつれ、分子レベルの理解こそが真に優れた革新的技術開発 を可能にすると認識されるだろうと,私は信じているからです。分子研は分子に関する優れたかつ膨大な研究成果を 有しており,それ故に,分子研は(ナノサイエンスという)大切な新しい科学技術分野において他所では真似のでき ない重要な役割を果たすことができると思っております。

総括

総合して、私は分子研の科学研究の質の高さとその教授陣に大変感銘を受けました。研究所は、分子科学における 卓越した研究に対して,それに相応しい国際的な評価を勝ち得ています。新しい教授陣や新しい研究計画は望ましい 方向に向かって進んでおり、分子研が今後とも世界をリードする研究機関であり続けることが約束されています。基 礎研究と応用技術の間でうまく釣り合いをとろうと努力しておられるようですが、これは十分注意を払うべき問題で あり大事なことです。私は、分子研が全ての課題の根幹にある重要な分子科学的諸問題について取り組もうとしてい ることを知り、大変嬉しく思っております。これは真に正しい選択です。研究所がこのような(分子科学)研究の焦 点を持ち続けることは、我々の高い評価に値すると思っております。

分子研を再び訪れる機会を楽しみにしております。

W. Carl Lineberger

追伸:私の分子研への訪問と教授陣との会合について御世話頂いた,鈴木俊法助教授に対して深い感謝の言葉を表し たいと思います。彼の献身的な努力によって、4日間という短い時間で分子研について極めて多くのことを知ること ができました。大変感謝しております。

<u>4-3 ワークショップによる点</u>検評価

4-3-1 日本チェコ合同セミナー (2001/3/12-13)

分子科学研究所は平成7年よりへイロフスキー研究所とカレル大学を中心とする分子科学研究グループとの間で国際共同研究を実施してきた。平成13年3月12日,13日に岡崎コンファレンスセンターにおいて分子科学に関する日本チェコ合同セミナーを開催した。チェコからは若手研究者を含む8名が参加し,日本からは13名(所内5名,所外8名)が参加した。セミナーでは1)励起分子複合体の動力学,2)励起状態分子の量子化学計算,3)イオンおよびクラスターの光化学反応,4)生体分子のラマン分光,5)溶液理論,6)光誘起分子内過程,7)分子磁性体,8)低分子・高分子固体の伝導性と光伝導性など分子科学における基礎的な課題について議論した。また,この分野を発展させるためには両国間の共同研究を継続してゆく事が重要であるとの合意を得た。この機会にカレル大学のJiri Horacek教授に分子科学研究所の理論研究系の研究活動に対する評価を書いていただいたので,原文と日本語訳を添付する。

______ 原文

Evaluation of the Institute of Molecular Science Okazaki, Japan

To evaluate scientific activity and scientific value of such an institution as IMS is an extremely difficult task. The activity of IMS is so broad and diverse that a single person hardly can even understand and appreciate everything what has been accomplished during the last few years. Since I am a theoretician, I will comment only on the work which has been done by the Departments of Theoretical Studies.

I personally highly estimate the theoretical work carried out at IMS in the following fields:

- · Studies of chemical reaction dynamics.
- · Studies of electron and positron scattering with molecules.
- Studies of water clusters and of molecular processes in atmospheric environment.
- All studies of the structure of proteins.
- · Non-adiabatic transitions and controlling of molecular processes including the process of molecular switching.
- · Application of ultra-fast nonlinear optical spectroscopy of molecules in condensed phase.
- Studies of chemical processes at liquid solid interface.
- · Studies of one-dimensional conductors.

All the contributions mentioned above are of pioneering nature and represent significant contribution to the development of science.

There is no doubt that IMS ranks among the leading scientific centers of the world. Its scientific activity is enormous, the members of IMS are active participants at any prestigious international conference as invited speakers or contributors of highly appreciated papers. Personally, I highly appreciate the fact that IMS is open to foreign visitors and a broad very efficient collaboration between IMS and many other scientific institutions of the world exists. This represents an enormous contribution to the development of not only basic science but also to the development of new technologies and new materials. I strongly recommend that IMS will continue to support the international collaboration.

I evaluate IMS as a highly efficient, productive and respectable institution continuously making significant contribution to the world science.

> Prof. RNDr. Jiri Horacek Institute of Theoretical Physics Charles University Prague Czech Republic

> > 訳文

分子科学研究所に対する評価

分子科学研究所の様に多岐に渡る研究を展開している研究所の研究活動を一人の人間が理解し評価するのは極めて 困難である。私は理論家の立場から理論研究系でなされた研究について意見を述べたいと思う。

個人的には理論化学系で行なわれている以下の研究を高く評価する。

- ・ 化学反応ダイナミックスの研究
- ・ 分子による電子および陽電子散乱の研究
- ・ 水クラスターの研究ならびに大気環境下の分子過程の研究
- ・ 蛋白質の構造シミュレーションの研究
- ・ 非断熱転移ならびに分子スイッチ過程をふくむ分子過程の制御の研究
- ・ 凝縮相における非線形分光学への応用
- ・液固界面における化学過程の研究
- ・一次元導体の研究

上に挙げた研究はすべて先駆的なもので、科学の発展に寄与するところが大きい。

分子科学研究所が世界の指導的な研究センターの中に位置するのは疑いの余地が無い。分子科学研究所の研究活動 はずば抜けており、分子科学研究所の研究者は著名な国際会議において活発な活動を行なっており、その活動は招待 講演や評価の高い研究発表となってあらわれている。個人的には分子科学研究所が外国人訪問者に対して開かれてお り、広範囲にわたって効果的に共同研究を推進している事を高く評価している。この事は基礎科学のみならず新しい 技術や新しい物質の開発にも大きく寄与している事を意味する。今後も分子研が国際共同研究を推進する事をつよく 勧める。

私は分子科学研究所が極めて有効で、生産的で、尊敬すべき研究機関として世界の科学の発展に貢献しつづけてい ると評価する。

> Jiri Horacek 理論物理学研究所教授 カレル大学 プラハ,チェコ共和国

4-3-2 教育研究基盤整備の新国際水準パラダイム構築に関する研究会(2001/12/27)

平成13年12月27日(木),標記研究会を岡崎コンファレンスセンターにおいて,分子研,日本学術会議化研連,日 本化学会将来構想委員会の共催で開催した。世話人は茅幸二分子科学研究所所長 野依良治日本化学会2002年度会長, 岩澤康裕日本学術会議化研連教育研究基盤小委員会委員長である。我が国が真に知的創造性と文化的資産を持った先 進国として今後も世界の尊敬を受ける地位を築き同時に人類の持続的発展に貢献するためには、大学、国研の果たす 役割は大きくそのための世界レベルの教育研究環境の基盤整備が急務である。教育研究環境整備に対しては、既存の 古い水準や考え方ではなく,今後50年の発展をにらんだ国際最高水準のグローバリゼーションの調査と新パラダイム 構築を視野にいれて,我が国の基盤整備の標準化を設定しなおす必要がある。講演者と題目は,有本建男(内閣府大 臣官房審議官)「政府から見た科学技術政策」, 山本明夫(早稲田大理工)「科学技術政策不在の国?」, 茅幸二(分子 研所長)「望まれる科学技術政策」, 黒田玲子(東大院総文化)「基礎科学と産学連携」, 北原和夫(国際基督教大教養) 「物理学での取り組み」, 植村 榮 (京大院工) 「京都大学桂キャンパス移転に関する諸事情」, 山田 悦 (京都工繊大環境 科学セ)「京都工芸繊維大学における ISO の取り組みと現状、改善、課題」, 北森武彦(東大院工)「物理化学・分析化 学における教育研究基盤の国際水準 現状とのギャップ」、鈴木啓介(東工大院理)「有機化学における教育研究基 現状とのギャップ」,田中正人(東工大資源研)「大学と国研の研究環境の現状」,福山透(東大院薬) 盤の国際水準 「21世紀の教育研究基盤の国際水準 米国と日本の大学の研究環境の違い」,岩澤康裕(東大院理)「教育研究基盤国 際水準化」である。講演および質疑のあと、自由討論を行った。講演は実に貴重な話題、資料提供が多く、また質疑 および自由討論は懇親会に持ち越す程活発であった。再度この課題で研究会を開く必要性と需要性が参加者全員の意 志として確認された。

4-3-3 無機金属化学の展望 全元素化学を目指して(2002/1/28-29)

平成14年1月28日,29日の両日にわたり上記のテーマに関する研究会を岡崎コンファレンスセンターにおいて開催した。評価委員として荻野 博(放送大学宮城学習センター),中村 晃(阪大名誉教授)の2名の先生に参加して頂き,20件の口頭発表を行った。所外から34名が参加し,所内からも多くの参加者があった。金属-炭素結合を持つ化合物は有機金属化学として,近年急速に発展してきた。また,遷移金属-典型元素間に配位結合を持つ化合物の化学は錯体化学として100年を越える歴史を持つ。しかし,古典的な錯体化学では想像もしなかったような新しい型の遷移金属-典型元素結合を持つ化合物が急増しており,従来の錯体化学・有機金属化学の分類にとらわれずに研究を進めることが求められている。錯体化学・有機金属化学の目指すべき将来はどこにあるのか,これから10年後,20年後には何がどこまで達成されているか,将来の無機化学はどうあるべきかを,新しい境界領域の開拓を目指して金属錯体の研究を展開している若手研究者を中心に,議論,意見交換を行った。