

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4回の外部評価が、5研究系、流動部門、分子制御レーザー開発研究センター、錯体化学実験施設及び統合バイオサイエンスセンターに対して実施された。分子科学の指導的立場にある2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、分子研が四半世紀以上の歴史を持つ現況、及び法人化を目前に控えた将況を踏まえ、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14年12月22日

委員	北原 和夫（国際基督教大理，教授）
	樋渡 保秋（金沢大理，教授）
	諸熊 奎治（エモリー大化，教授）
	永瀬 茂（分子研，教授）
	中村 宏樹（分子研，教授）
	平田 文男（分子研，教授）
	岡崎 進（岡機構・計算科学研究センター，教授）
オブザーバ	岡本 祐幸（分子研，助教授）
	谷村 吉隆（分子研，助教授）
	米満 賢治（分子研，助教授）

4-1-1 点検評価国内委員会の報告

(1) 理論分子科学の日本における役割

分子科学における理論の重要性は今や言を待たず、化学、物理、そして生物をもカバーする広い領域で不可欠のものとなって来ている。それにも拘わらず、依然として日本を代表する東京大学と東京工業大学の理学部化学科に理論の講座が無いことは、実に憂うべき現象である。過去における本点検評価において、毎回の如く国内外の委員から指摘されているにも拘わらず、依然として改善の兆候が見えない。更に、日本の理学部化学における理論の幅の狭さは、欧米の化学科における理論家の占める割合を考えると、先進国と呼ばれる国として誠に恥ずかしいことと言わざるを得ない。このような現状の中で、分子研の理論研究系の役割は大変大きい。

(2) 分子研理論研究系のあり方

理論研究系は、理論化学のグループとしては日本最大であり、化学と物理の出身者が入り混じるユニークな集団として、上記の様な日本の状況の中で、独自の発展をし、活躍していると評価して頂いた。外国の研究者にもその存在は高く評価されている。日本の大学の変革を切に望むものではあるが、それと同時に、分子研の理論系はなお一層の拡大・発展を目指しても良いのではないかと多くの意見が多く出された。これからは、今まで以上に世界に目を向け、世界の理論 COE としての発展を目指すべきであると。同時に、アジアの若手の育成に努力を傾けるべきである。一方、その為には、現実の様々な課題を克服する努力が必要である。残念ながら、依然として研究スタッフの数が少ない問題、ポストクや大学院生など若手を強く引き付けるだけの待遇と魅力の欠如の問題がある。総研大に入学するために改めて入学金を支払わなくてはならないこと、大学の21世紀COEプログラムによるポストク確保の影響、基盤研究所に比べて総研大の知名度が低い問題等などがある。理論系スタッフの一層の切磋琢磨も必要であろう。

(3) 計算科学研究センターについて

計算科学研究センターが統合バイオサイエンスセンターの設立と共に岡崎機構の共通施設と位置付けられたが、その歴史及び現状の利用者の実績から、分子科学における計算科学の拠点センターとしての役割と責務に何らの変更が齎されるべきものではない。勿論、分子科学を基盤としたバイオサイエンスとの境界領域における計算科学を支援していくことも一つの重要な使命である。いずれにしろ、全国に跨る幅広い分子科学の一般利用者への支援と共に、先端的な大規模計算を行う利用者の支援を両立させていくことが求められる。前者に対しては分子科学計算に関する幅

広いソフトの充実が必要であり、一方、後者については特別申請の枠組みを広げていく努力が必要であろう。いずれにしる、分子科学に特化した計算科学センターとしての発展が望まれ、その意味で世界のセンターを目指しても良いのではないであろうか。

(4) 分子科学研究所の将来について

上記(2)でも述べたが、分子科学研究所は今や世界にあまねく知れ渡り、その知名度は抜群である。分子科学研究所に招かれること、あるいは滞在することは、世界の分子科学者にとって箔のつく大変名誉なことと認識されるに至っている。その意味で、大学との連携を大切にして優れた人材を集め「高等学術研究機関」として益々発展すべきであり、現在の国際的環境を一層高め世界の COE となっていくことを願う。その為には、上でも述べた通り、色々な課題を克服して行かねばならない。岡崎コンファレンスの正式復活、ポスドク制度の柔軟化、大学院生の無償奨学金制度の確立(未来の科学を担う大学院生への生活支援が十分でないのは先進国として恥ずかしい限りである)、内部昇進を許さない分子研の人事制度の普及(大学の人事制度の改革が強く望まれる)、真の COE としての認知など国がもっと進んだ支援策を打ち出して欲しいものである。

4-1-2 国内委員の意見書

委員 A

分子研の意義

分子科学研究所理論部門・電算機室は、日本の理論物理化学の中心として創設以来機能している。特に、分子研で助手、助教授を経験した人々は、外の教育研究機関で活躍していることから、日本の理論物理化学をリードしてきていると言える。理論化学と理論物理の境界領域を研究するところとしてユニークである。外部の大学となると、物理学科が化学科となるので、教育する学生の傾向も異なり、また、同僚である教官の意識も、物理学科か化学科かによって違っているが、分子研ではそのバリアはない。欧米では普通であるのだが、統計力学、量子化学、原子分子物理などは比較的隣り合わせの分野なのであるが、日本では分断されていた。そのような中で、分子研の存在意義は大変大きいものがあり、現在では、大学でも、物理と化学のバリアは一般的に低くなってきているのではないだろうか。

人的交流

特に理論研究においては、人的交流は重要である。「分子科学研究所の概要」(「分子研レポート2001」p.45)によると、外国人研究者の数は、減少傾向にある。また、大学院生の数もトレンドとしては減少している。更なる活性化のためには、特にアジア地域から優秀な若手研究者、大学院生を招聘して、世界の分子科学研究所センターであって欲しい。アジア諸国でレクチャーを組織するなどして、積極的な若手のリクルート(広報)も行うと良いのではないかと。

研究分野

現在の分野はバランスが取れていると思う。客員部門は、客員部門に来てくれる研究者のサバティカルとして常時滞在できるように、早めに人事を決めておくのがよい。

「分子研レポート2001」にある岡本レポート(p.61-66)では、分子研が果してきた研究者の流動性について特記している。私も同感で大いに「分子研方式」を全国だけでなく、国際的にも広める必要がある。学会会議や学協会等で、もっと紹介されてよいと思う。教官のサバティカルについては、「行政的・教育的業務の免除」という意味でのサバティ

カルは意味があると思うが、長期に分子研を空けるよりは、分子研における交流の実を上げるほうがよいのではないかと、思う。

委員 B

a) 研究全般について

理論研究 4 部門（内容員 1 部門）で分子科学の研究分野を網羅するのは不可能であろう。各部門の教授、助教授が独立して研究を行なうスタイルを実行していることを考慮すれば研究分野の数は倍程度となる反面、各研究グループが小規模になる欠点を合わせ持つことになる。教授と助教授が協力して実質一つのグループを形成し、より大規模な運営の下でプロジェクト研究を遂行できる選択肢もあってもよいのではないかという気がしないわけでもない。現状でその必要性がないのであれば特段検討することはないのかも知れないが、今後の将来計画の議論の際にでも参考にしてみればよい。

分子科学に関する教育、研究を行なっている場所が日本の大学に極めて少ない現状の話（訴え）があったが、そうであるならば由々しき事態であるといわなければならない。皮肉にも、この事実がかえって分子科学研究所の存在する必要性を高めるのには役にたつのかも知れないが、事はそれほど単純でなからう。分子科学は物理学と化学に密接に関連しており、また近年では分子生物学とも密接に関連する境界領域の学問であることは多くの自然科学の研究者が認めるところであろう。境界領域の学問分野であるが故に分子科学の研究者（研究場所）がわが国に少ない現状の歴史的な根拠はわからないでもないが、分子科学は一方で自然（物質）科学の根幹を支える学問分野であり、現在わが国の科学技術基本計画の主要な研究分野であるナノ科学やライフサイエンスなどにも直接関連する重要な学問分野であることを考えるとこのようなわが国の国立大学の教育研究体制は改善されるべきである。大学と分子科学研究所の両サイドから真剣な取り組みが待たれる。

b) 研究者の研究活動

「分子研レポート2001，現状・評価・将来計画」に記載されている各研究者の研究活動から見て、各々の分野において世界に通ずる研究業績がでていることは間違いない。評価委員会では、個別評価の時間は設けられなかったが、本レポートでも十分そのことは伺い知れる。勿論、研究には十分ということは存在しないのであるから、更の上、上への研究を目指すことは必要であることは言うまでもない。研究所の使命である世界第 1 線の研究業績をあげるため最善を期待したい。分子科学研究所（理論系）の特長が明確になっているのかなっていないのか、言い方を変えると、研究所（理論系）としての先付けの研究目標（ミッション）があって、それに向けての研究なのか、それとも研究者の個人個人の裁量により方向を決め、結果だけで評価を行なうのか、このいずれであるかが不明である（多分後者であると推察するが）。理論系全体についての研究目標もすべきところは明確にする姿勢を期待したい。

c) 研究所全体について

ポストドクの確保について：国立大学および他の研究機関においてもポストドクの定員が大幅に増えつつある現状を考えると、今後は優秀なポストドクを確保するための新たな仕掛け（戦略）が必要であろう。それらは、研究条件であるとか、経済的条件であるとか、が考えられるが、やはり一番の決めては、分子科学研究所の有する研究のポテンシャルの高さを示すことであろう。ポストドクの満了後、望むようなところに就職できる可能性の高いところ（大学、研究所）に彼らの多くは必ず集まってくる筈である。ポストドク生もちろん日本人に限った話でもない。大いに優秀な（熱意のある）外国人ポストドクを採用したらよい。

大学院（総研大）生の確保について：ポストドクと同様、国立大学の大学院定員が大学院重点化政策後大幅に増えた

結果、全国規模で大学院生の確保が難しくなっている。分子科学研究所においても大学院生の確保については今後相当厳しいと予想される。ただし、留学生は別であるので、こちらに積極的になるのはよいかも知れない。いずれにしても、大学院生が学位取得後に研究する場所の問題として、分子科学研究者のニーズを増やす積極的な運動は必要な気がする。この問題を度外視して安定した研究所の将来像をもつことは不可能な気がする。

d) 計算科学研究センターについて

今日、既に、いずれの計算センターにおいても計算機の資源を提供（共同利用）する役割（サービス）が主任務であった時代から現在大きく変わりつつある。計算センターの役割がハードよりの研究者支援からソフトよりの研究者支援へ転換する必要がある。このためには、ソフト（プログラム）の移植のみならず、それを使った研究（シミュレーション研究）をはじめソフトの利用に関する技術支援、また並列計算などの計算機技術支援が必須である。これらの研究者の確保を強く期待したい。

委員 C

分子科学研究所理論研究系および岡崎国立共同研究機構計算科学研究センターの教授および助教授の研究に関する国内評価に参加した印象を述べる。

理論系には中村、谷村、永瀬、岡本、平田、米満の教授・助教授が、センターには岡崎教授がそれぞれ研究グループを作って活躍しており、センター助教授は公募中である。研究者（教授・助教授、助手、技官、国内外からの各種のポストドク、外国人客員教授・研究員、大学院生、その他）の総数は40余名で、これだけの専門の異なる分子科学理論研究者が数多く集まっている集団は、国内はもとより世界的にも例を見ない。研究のレベルは極めて高い。評価委員会の議論は中村主幹によって別途まとめられるとのことなので、ここでは私個人のいくつかの提案について述べたい。

過去の分子科学の歴史からも予想されるように、分子科学における理論の果たす役割は今後益々大きくなるものと考えられる。世界的にもトップの分子科学の研究所として、早急に分子研の理論研究を一層充実させる必要がある。現在分子研の理論研究グループの数は全体の約20%程度である。アメリカで研究のアクティビティの高い大学の化学教室で理論の割合は10 - 20%であり、質の高い大学ほどこの割合が高いことを考えると、分子科学の専門研究所としての分子研での割合は、現在むしろ低いと言える。今後ますます広がっていく分子科学の多くの領域をカバーするためにも、また重点領域の研究を集中的に推進するためにも、理論研究グループの拡充が望まれる。

これは理論系に限った事ではないが、分子研では研究グループあたりの研究者の数が少なく、それが十分な活動を妨げている事は従来から指摘されてきた。現在理論研究グループあたり研究者6名と言うのは、以前よりはやや改良されたとは言えまだ十分ではない。積極的にこれを増やす方策が求められる。その対策の一つとして外国の研究者や大学院学生を集中的に採用することが考えられる。今や世界的評判の高い分子研に来たいと言うポストドクや院生は沢山いると思われる。むしろ世界の頭脳を活用して研究を推進すると考えてはどうか？ 最近はいろいろな研究費で外国人ポストドクを雇う事ができるようになったが、これを積極的に活用してほしい。また、研究所としても対策を考えてほしい。博士課程大学院生に生活可能な給料を出すことは今や世界の常識であり、国内はもとより外国人大学院生にも当然これが必要である。これも研究所としての対応が欲しい。

もう一つ、理論研究系と計算科学研究センターで協力して、アジアの各国との積極的な協力体制を作ってみたらどうか。今や、中国、台湾、韓国はもとより、タイ、シンガポールなど多くの国で、分子科学理論研究は年々盛んになりつつある。世界的にも最も充実した分子研の計算施設と専門能力をアジアの各国に解放して、共同研究者の受け入れ、ワークショップやシンポジウムの開催、スーパーコンピュータの利用、大学院生の受け入れを行い、いわば“アジア”のセンターとして、アジアでの分子科学理論の発展に寄与してほしい。

計算科学研究センターについては、現在岡崎国立共同研究機構の共通施設となっているが、超大型計算機は分子科学の最も重要な“実験装置”の一つであり、計算科学は分子科学の最も基本的な研究分野である事を考えると、出来る事なら分子科学研究所に直属した方が好ましいと考えられる。

最後にごく個人的な感想だが、現在分子研理論系で電子状態理論計算(量子化学)のウェイトがやや少ないと思う。量子化学は分子科学理論の基礎であり、この分野が充実すれば、有機化学、無機化学、触媒化学、材料化学、生物分子科学など理論研究者の協力を必要としている“化学”全体により大きなインパクトを与えられると期待される。

4-2 分子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成14年11月13日

委員 永田 敬（東大院総合文化，教授）
梶本 興亜（京大院理，教授）
北川 禎三（分子研，教授）
岡本 裕巳（分子研，教授）
横山 利彦（分子研，教授）
森田 紀夫（分子研，助教授）
加藤 立久（分子研，助教授）

4-2-1 点検評価国内委員会の報告

所内委員C：法人化に向けて将来計画や法人化中期目標などを外部に示さなければなりません。その作成にあたり点検評価結果やこの座談会の内容を参考にさせていただきます。分子構造系がどうあるべきか、または、本日の点検評価インタビューを通して受けた分子構造系の印象をお聞かせください。

所外委員B：研究所として各研究系の特徴を区別して、役割分担などしていますか？

所内委員C：以前には各研究系の区別を明確にして、役割分担をしていました。しかし、最近の研究系間の垣根は取り払われる方向です。その傾向は新教授の公募文案にはっきり現われてます。

所外委員B：役割分担をしないことは良いことなのでしょうか？ 例えば分子構造系と電子構造系の区別や関係はどのように考えるのでしょうか？

所外委員A：昔の分子構造系は広田先生を代表とする分光学が中心でした。それに比べて現在のメンバーの研究はかなり異なる印象を受けます。しかし、どのグループも分子構造論を基礎として、対象物の特徴的な機能を引き出したり観測したりしている。そういう意味で分子構造系として違和感はありませんでした。電子構造系と何処が違うのかな？ と疑問に思いますが、異なる研究系と協力関係の下に、研究所全体として研究が発展すれば研究系の役割分担を区別する必要はないとおもいます。

所内委員C：分子科学自身が変化している現状で、現在の研究系・研究所がその変化にマッチしていますか？

所外委員A：現在の分子科学に研究所がマッチしているかを議論するためには、この研究所の分子科学に対する役割を考える必要があると思います。

所外委員B：分子研は研究者を育てることが役割だと思います。大学は研究者の卵である学生を育てるように。ですから修士課程を持つ必要はないと思います。ポスドク以上の若い研究者を育てるべきです。そのためには、日本国内外の研究者間はもちろん、研究所内の研究者同士のディスカッションが盛んであるべきです。

所内委員C：最近の大学評価において、それぞれのポジションにとって組織が有効に機能しているかという点を検討しますが、分子研はいかがでしょうか？

所外委員A：私の大学でも、大学院生にとって大学は有効に機能しているか？ という議論をしています。この研究所の場合は、若い研究者が外へ出てからどのくらい活躍しているかで、研究所が有効に機能したかの証拠になります。ですから、人事の回転が速いことは大変重要です。

所内委員C：分子研は上へのプロモーションを禁止していることが大変有効に働いています。

所外委員 A：最近分子研の教授の人選が若い層へシフトしています。このような若い教授の方々は、十年の後に新たに外へ出ていかれることを考えてはいかがですか？ 分子研で研究者を育てることを経験した後に、大学へ出て学生を育ててはいかがですか？ そうすれば教授人事の流動性も良くなるでしょう？

所内委員 C：そのためには教授に任期を付けても良いかもしれませんね。

所外委員 B：そうすると、分子研の教授の役割は何ですか？ 助教授は研究者として育てていけば良いが、教授にはどのような役割があるのでしょうか？

所外委員 A：これまで 既にアドミニストレーションの経験豊富な教授を採用するという人事も行われていますが、これからは2つの種類の教授人事が存在して良いのではないですか？ 研究の新領域を開拓するような若い教授がいても良いと思います。その反対に、アドミニストレーションに特化した教授人事をやっているはどうですか？

所内委員 C：過去に錯体施設でアドミニストレーションに特化した教授人事をやったことがあります。

所内委員 F：今後法人化に向けて、そのようなアドミニストレーションに特化した教授人事が必要になるでしょう？

所外委員 A：そのとおりです。

所内委員 C：分子研内の研究系のサイズは今のサイエンスにとって適切でしょうか？ 例えばバイオ研究にはもっと大きなサイズが必要ではないでしょうか？

所外委員 B：複数の研究グループ間でもっと密接な研究協力・関連を持ってはいかがですか？

所内委員 C：そういう意味では、東京工業大学は教授と助教授がお互いに合同のセミナーが開けるくらいの、かなり密接な関連を持っていますね。

所外委員 A：確かに各グループが小さいですね。スタッフを多くすべきですね。その時には10年プロジェクト計画の下2つ以上のグループの人事をまとめて行い、10年経ったら教授を含めて全員解散するようにしてはいかがですか？ 教授の流動性も上がりますよ。

所内委員 F：プロジェクト制はこれまでも導入されたことがありますが、「言うは易し行は難し」です。

所内委員 D：そのような流動性を伴った動きを加速するためには、全国的に流動性を上げる必要があります。

所外委員 A：その意味で、65歳定年制は流動性を上げると思います。つまり55歳でも教授として採れるわけです。

所内委員 C：その他にご意見はありませんか？

所外委員 A：ところで、JST など、文部科学省関係以外の外部資金を採る方は多いでしょうか？

所内委員 C：それほど多くはありません。

所外委員 A：研究所内でグループを作って、科研費 S などを目指してはいかがですか？

所外委員 B：分子スケールナノサイエンスセンターではアプリケーションを志向するのでしょうか？

所内委員 C：いえ、基礎研究をすべきです。

所内委員 D：やはり基礎研究が基本です。

所外委員 B：やはり分子研では基礎研究を目指して欲しいですね。しかし、財源や人事の面で基礎研究を目指しつづけることは困難を伴います。それを可能にするためには社会や学会に対して強いインパクトを与えていくことが重要です。

一 同：これから5年間で社会・学会に強いインパクトが与えられるか？ 今が正念場でしょう。

4-3 電子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成14年12月9日～10日

委員 佐藤 幸紀（東北大多元物質科学研，教授）

富宅喜代一（神戸大院理，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）

佃 達哉（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成13年12月3日（分子研レポート2001に記載）

委員 Professor W. Carl Lineberger (Joint Institutes for Laboratory of Astrophysics, University of Colorado)

4-3-1 点検評価国内委員会の報告

3年前に行われた点検評価国内委員会において、「大学と研究所そして系という組織」、「研究室の規模」、及び「研究戦略」の3つの項目について議論がなされ（分子研レポート'99）、幾つかの問題点が浮き彫りにされた。このような問題点の解決のための方策がどのように取られてきたかを本来は検討しなければならないが、今年度の点検評価は、15年4月に電子状態動力学部門の教授および助教授の同時転出が起こるといふ、研究所始まって以来の大きな変化を前にして行われた。また、今年度より、「分子スケールナノサイエンスセンター」に基礎電子化学研究部門の佃助教授が籍を移し、来年度春に残る専任教官は主幹のみという異常な事態を迎えることになった。このような事態を前にしての点検評価に内部委員が係わるよりも、今年度は外部委員の評価に徹した方が良いのではないかと意見が強く、外部委員による精力的なヒアリングをまる2日にわたって実行してもらい、佐藤委員と富宅委員より、西、藤井、鈴木、佃の4教官の研究活動に対する評価、および今後の系、特に電子状態動力学部門でどのような研究を展開すべきかという問題への提言を含めた報告書を頂いた。また、所内委員の中から、現在の分子研のグループ規模の最小化に対して、大きな危惧が示されていることも報告すべきであろう。

4-3-2 国内委員の意見書

委員 A

電子構造研究系では、溶液系から少数多体系にいたる広い対象にわたって研究課題が選択され、どの課題においても独創性の高い最先端の研究が行われ、選択された課題が分子科学にとって重要性の高い課題であることを示してきた。電子構造研究系は分子研において極めて重要な役割を果たしてきたと評価する。

西グループは、溶液の局所構造、溶液における分子会合状態という化学にとって極めて影響力の高い課題に取り組み、実験手法の斬新さも含めて従来の考え方に革新を迫る新たな仮説を提出してこの分野の研究を先導してきた。この研究の評価は、これまでの外部評価委員会で認められてきた通りであり、これまでの高い評価に全く同感である。最近では、遷移金属と炭素からなる新規の分子性クラスターを合成し、その磁性研究を展開している。クラスターのサイズが微小化（ナノ構造化）すると単磁区構成体となることを示し、分子磁石の可能性を開くことによって分子科学とナノ材料科学との結合を意図している。この研究は同グループの研究に新たな戦略性を与えている。

佃グループは、単分子膜で保護された金属クラスターという特異な複合分子系を取り上げ、クラスターの特質に立脚した新しい機能性複合分子の創出を目指している。サイズをナノスケールで制御した金属クラスターは、バルク金

属とは全く違った光学的，電氣的，化学的性質を示すことが期待され，同グループの磁性分子クラスターの開発と並んでグループとしての整合性が良く，このような新規ナノスケールクラスターの機能開発研究に大いに期待する。

藤井グループは，水素結合クラスター内での高速水素移動のダイナミクスを調べるために，紫外レーザーと近赤外レーザーを三段階で照射する高度のレーザー分光技術の適用に努力を重ね，独自のピコ秒時間分解振動分光法を開発し，水素移動ダイナミクスの新知見を得ている。水素結合系における水素（プロトン）移動は化学において必須な問題であり，個々の系における詳細な知見の積み重ねは貴重である。この意味から藤井グループの努力に敬意を表する。同グループが培った高度のレーザー分光技術は，所外との共同研究で進めているレーザー蛍光顕微鏡の開発に進展している。この開発は，レーザー分光技術と量子光学技術との結合によって光の回折限界を超える空間分解能をめざすもので，研究の戦略性の視点から今後の進展を興味深く期待する。

鈴木グループは，自製の画像観測装置を用いて，伝統的な二重微分散乱断面積測定分野における一つの到達点を標識した。三体衝突問題という基本問題に取り組んだという点からも，同グループの成果は国際的に非常に高く評価されている。精緻な実験と精緻な理論計算とのほぼ完全な一致を実証することによって対象系に関する散乱ダイナミクスに決着をつけたと云える。同グループの研究の完成度は極めて高い。しかしこのように完成度の高い研究の先にはどのような新領域が開かれるかという疑問が残る。とはいえ，問題決着型の研究と領域開発型の研究とは別物であり，両者の価値を軽々に比較すべきではないであろう。

電子構造研究系では，溶液系から少数多体系にいたる広い対象にわたって研究課題が選択されてきたが，鈴木グループを除いて，概ねクラスターの研究が行われてきた。しかし西グループが先駆的な研究で世界をリードしてきた溶液系の研究が，人員の少なさのために新たな展開が図れていないのではないかと気がかりである。クラスターへの偏りを若干修正して，この研究系にはやはり溶液系の研究で斬新な展開を期待したい。また，応用とか基礎とかにこだわらず，分子の動的過程を「制御」する研究，特に分子内或いは分子間に発生するコヒーレンス（量子波束）を光位相で制御する研究は，これからの分子科学に新たな局面を開くと期待される。このような研究は，当該研究系が培ってきた高度のレーザー技術を展開するのに相応しい課題ではないかと考える。

委員 B

電子構造研究系は，電子構造の観点から化学現象を分子論的に解明する研究分野であり，分子科学研究所の創設以来，実験研究系の主柱の一つとして重要な役割を担ってきており，その存在は国内外に広く認知されている。本研究系のスタッフは，この分野の最近の重要な研究課題となっている気相分子の反応ダイナミクスや励起分子の緩和過程，および，分子クラスターやナノクラスターの研究を進める中で，研究会の開催等を通じて本分野における分子研究の役割を充分果たしてきている。最近，電子状態動力学部門で人事異動があり人員構成は変わりつつあるが，研究系としてこれまで，分子および分子集合体の科学に対する充分な研究体制が敷かれてきた。本研究系の研究グループの規模は4グループとも所内では小さい範疇に入るが，その活性度は毎年出版されているアニュアルレビューに掲載された原著論文の多さで，充分計り知ることができる。

西グループは，クラスターを中心課題として，溶液化学で重要な液体／溶液の部分構造の研究と新しい機能性金属・有機複合クラスターからなる分子磁石の研究を進めている。溶液の構造の研究では，二成分系の混合状態をラマン分光等の分光法を用いて解析し，部分構造に関するユニークな研究を展開している。また分子磁石の研究では，金属原子を有機分子に埋め込み，金属原子間のスピン-スピン相互作用を制御することによって強磁性的な機能の発現をさ

せる試みを進めている。最近、新しい分子磁石化合物である CoC_2 クラスターの合成に初めて成功し、マトリックス中で磁石になることを見いだしている。今後、磁気的な性質の発現機構についてさらなる研究の展開に注目したい。

佃グループは、サブナノサイズの金属クラスターの触媒機能の発現機構の解明を目指して、クラスターの精密合成と評価のための質量分析器の開発に取り組んできた。最近では、チオール化合物に保持された Pd や Au クラスターの合成を行い、クラスターを取りまく単分子膜の構造特性の研究を活発に進めている。赴任後の研究の立ち上げをほぼ完了されたようであるが、今後、この分野で国際的な指導性を発揮するために、触媒反応の観点に加え、この種のクラスターの特長に注目した新しい境界領域を創出されることを望みたい。

藤井グループは、分子クラスターの未知領域の解明を目指して、化学で重要な反応系の超音速ジェット中での振動分光の研究を進めている。独自の時間分解振動分光を駆使し、特に、プロトン移動ダイナミクスの理解に大きく寄与している。また分子科学の技術を巧みに応用した 2 波長ファーフィールド超解像顕微鏡の開発も進め、原理検証に成功している。これらの方法をベースとした研究が、新しい研究の流れを創出する問題の発掘・提起に繋がっていくことを期待したい。

鈴木グループは、化学反応の動力学的解明を目指して、反応の全衝突過程と半衝突過程の両面から独創性の高い研究を進めている。前者のアプローチでは交差分子線法と画像法を組み合わせた装置を開発し、状態選択した回転非弾性散乱過程の解明を行っている。また、後者のアプローチでは、化学反応を実時間で観測する目的で、フェムト秒光電子画像観測装置を開発し、電子位相緩和や回転コヒーレンス等の素過程の究極的な理解に大きく貢献している。今後は、これらの手法を用いた反応性散乱の研究への発展が期待される。また、ナノスケールの液滴中での反応といったより複雑な系への取り組みも進められているが、上記の研究で培われた反応ダイナミクスの視点を踏まえた新しい切り口の研究の展開を期待する。

(この分野の国内、国外での研究分野としての重要度と今後の発展方向)

本研究分野では、基礎と応用の立場から、分子および分子集合体の化学反応をはじめとした種々の物理、化学過程を研究対象としており、分子科学の基礎研究の中心的な分野となっている。近年のレーザー技術や理論計算法等の研究手法の進歩とともに、この分野でも実験と理論の協同作業による研究が非常に活発に行われ、比較的簡単な孤立分子の化学特性の理解と予測が飛躍的に進歩してきている。最近では、非常に精密化したレーザー技術を駆使し、気相化学反応の量子制御を目指す研究も行われるようになってきている。また研究の視点はより複雑な系へと向けられてきており、クラスター等の分子集合体の表面や内部での化学反応、溶液内での反応ダイナミクス、超微粒子や固体の表面、界面での反応ダイナミクス等の今後解決すべき重要課題が山積している。他方、最近の生命科学の長足の進歩により、生命現象の分子レベルでの理解の重要性が非常に高まってきており、分子科学研究者のリーダーシップが不可欠となってきている。むろん、これらの研究課題は従来から取り組まれてきているものであるが、今後は、さらに新しい切り口の発見と新しい研究手法の開発を行いながら理解を一層深めていくことが、本研究分野の主要課題になると考える。

本研究系の電子状態動力学部門においてスタッフの総移動が予定されており、すでに教授候補者の公募が進められている気体反応に関連した分野の他に、もう 1 人の教授の専攻分野が懸案となっている。人事選考は、本来人物本位であるべきであるが、研究系の分野のバランスを考慮するとすれば、候補者の分野をある程度特定する必要がある。他の研究系と電子構造系の他部門の分野を勘案すると、液体中での化学反応の基礎と応用に関連した実験的研究分野が選択肢の一つとして挙げられる。溶液反応における溶媒和ダイナミクスの理解も今後さらに深化が期待される。またポリペプチドやタンパク質の構造、機能に果たす水和の動的役割も発展が期待される研究である。他方、溶液や固

体表面，界面での単一分子の反応の研究や制御した表面での反応研究も，今後さらに重要な進展が予想され，専攻分野の議論の対象になると考える。

(研究所への希望)

分子科学研究所は，設立後すでに28年となるが，設立趣旨を十分に全うし，分子科学研究の情報発信の源として国際的にも広く認知されてきている。また，この間，研究所を巣立った多数の研究者は，非常に多くの大学の基礎研究の現場において中心的役割を果たしてきている。このような基礎研究のメッカ的な存在は，今後の分子科学研究の発展と人材育成に不可欠であり，法人化後の分子研においてもその役割は大いに期待される場所である。所外の研究環境が大きく変遷してきている中で，創造的研究の場としての研究所の求心力をさらに増やせられるかどうかは，先見性と個性に富み，常に自然の新しい切り口を見出そうとするチャレンジ精神に溢れた人材が集まる場づくりにかかっていると思われる。人員増が絡むため困難を伴うと思われるが，所員が研究に集中できるサポート体制の強化にも大きな努力が必要である。また，研究所の存在感を一層高めるためには，以前から囁かれている所を代表する突出した研究の育成も，それなりの覚悟はあるが，視野に入れるべきではないかと思われる。所内研究者間の十分な情報交換と自然発生的でかつ建設的な研究構想の相互批判のもとで，組織化も可能と思われる。研究の発展性と性格に応じて，研究グループの規模が拡大できるような研究体制の柔軟さも，今後は必要かと思われる。助手，助教授クラスの若手の優れた研究者が集まってお互いに切磋琢磨し，研究に真の楽しさを見いだす魅力的な研究環境作りを分子科学研究所に切望する。

4-4 分子集団研究系

国内評価委員会開催日：平成14年12月17日

委員 石黒 武彦（京大理，名誉教授）
小島 憲道（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）
鈴木 敏泰（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成15年1月15日～16日

委員 Professor Peter Day (The Royal Institution of Great Britain)

4-4-1 点検評価国内委員会の報告

前回の例に従い今回の点検評価においても分子集団研究系および分子物性関連分野の研究グループの点検評価を茅所長の出席の下，上記のように合同で行った。委員会開催以前に，上記の6名の分子研メンバーに加え当日海外出張で欠席した畠田博一助教授（分子スケールナノサイエンスセンター）の7名に関する過去3年余（1999年以降）の業績リストと主要論文およびその研究内容についての適当な解説記事等の資料を点検評価委員に送付し，査読して戴いていたので，当日はこれを踏まえて分子集団および関連分野の活動状況について，評価，議論をしていただいた。

(1) 分子物性関連研究グループの評価の概略およびグループ間の協力について

分子研における分子集団および関連分野のグループの研究活動は国際的にも高い評価を受けており，審査対象となった7名のメンバーは一人一人独自の興味深い基礎研究を展開している。また，応用的な観点からも注目される研究も展開されている。このような概評がなされた後，当日の議論は主に分子物性系の研究グループは将来どの様に研究分野をリードして行くべきかという観点に集中して展開された。一方，分子研における分子物性関連グループの実績と将来への可能性に対する期待を反映しているものと思われるが，分子研の分子物性関連分野に関わる最近の変化は際だって大きく，前々回の点検評価が行われた1996年の時点では発足していなかった分子物質開発研究センターが1997年に発足し，今回の点検評価が実施された2002年には発足後5年を経て分子物質開発研究センターは分子スケールナノサイエンスセンターへと改組発展している状況である。また分子物性関連研究グループのメンバーに関しても，分子物質開発研究センター・パイ電子開発研究部門の山下敬郎助教授は2000年に東工大教授（大学院総合理工学研究科物質電子化学専攻）に転出し，同じ2000年に分子集団研究系分子集団動力学部門に着任した畠田博一助教授は分子スケールナノサイエンスセンターの発足に伴い，同センター所属となった。このような分子物性研究系を取り巻く激しい変化の流れにも関わらず，分子集団研究系および分子物性関連分野の研究グループはこれまで研究会活動などを通して研究系の枠を越えて緊密に協力してきた。これが今回の点検評価をこれまで同様，分子集団研究系の枠を越えて行っている理由でもあるが，今後はより活発に具体的な研究を通してグループ間で緊密な協力研究が更に進展することによって単一グループでは不可能な研究を遂行する事が望まれている。このためには，将来，分子集団関連グループの行っている共同的な研究活動を更に一層押し進め，現在の研究組織の枠を越えて有機的に協力出来る何らかの体制を実現する事が望まれる。

(2) 分子研に於ける分子物性関係の設備と研究グループのサイズについて

現在、分子スケールナノサイエンスセンターをも含めると非常に多くの分子研のメンバーが分子物質関連分野に関わるようになっているが、分子研の分子物質研究としてはより基礎的な研究を志向すべきであろう。また、かつての分子研の機器センターの所有していた物性機器は共同利用機関の物性評価機器としての役割を十分果たしていたのであるが、現在は高性能の物性評価機器が無くなり、殆どの機器が共同利用機関の機器としての役割を果たせていない。ナノ関連機器として大型の機器の導入の計画が進行中であるが、物理系の共同利用機関とは異なる、分子研としての求心力のある物性測定機器が何であるかを考え、その導入を図るべきである。

研究グループの規模に関しては、テーマを一つに絞れば、現在のサイズで十分効率よく研究を実施出来る場合もあり、また、教授のグループと比較的短期間に転出する可能性の高い助教授のグループの間、あるいは理論と実験などの間でも適正規模は自ずから異なるものと思われ一概には言えない。しかし、グループ内の研究者の流動性が大きい分子研では、少人数で複数の研究課題を実施せざるを得ない事が多いため、研究者の流動によって積み上げた研究課題を継続できないで中断せざるを得ないと言う深刻な状況も起こりつつある。流動性を保ちつつ研究の継続性を確保できる事が必要であろう。

(3) 研究分野の今後の発展の方向について

分子科学はおしなべて成熟期に入っているように思われ、新たな方向を目指すべきである。研究は成熟期を経由して初めて次の展開が明らかになると言う側面が強いので、成熟期に入ったと言われ始めた現時点で、今後の展開について直ぐ適切な見通しを得ることは容易ではないと思われるが、ともあれ分子研の様な処で、大きな装置を持って、少しだけ先を行く仕事を志向すると言うことは望ましいことではない。共同利用機関としての重要な役割として、将来分子科学がどのような方向に進もうとしているのかを明瞭に提示することが必要である。例えば、分子研の分子スケールナノサイエンスセンターの特色として、「分子スケールナノサイエンスセンターでは物質科学に即した研究を行う」とは言っても、具体的に何をしたいのかが客観的には見えてきていないように思われる。以前、バイオ素子関連のプロジェクトが推進された時代があったが、結局はその研究は集積せず、これまでのバイオ素子のプロジェクトは幻想に終わっている様に思われる。現在のナノテクノロジーにも同様な可能性（危険性）が大きいものと多くの人々が感じている。この様な状況で、研究分野の新たな方向性を出す事こそ共同利用機関が担うべき事である。そのためには実績のある研究者が集まっている分子研のような処で研究グループ間で横断的に協力し、研究を推進する事が必要であろう。一方、研究の模索期には個人の研究の進展が重要であり、グループが集まったからと言って研究が進むものではないと言う側面もある。芽が出たところを大きくするような支援体制も同時に必要であろう。研究発表については個々のグループが沢山の論文を出すことは重要ではない。流行を追うのではなく、大学では出来ないような先端的な研究をやるべきである。話題になっている分子素子については壁をつき抜けるような仕事をして欲しいが、今後一山も二山も越えねばならないと思われる状況であり、分子素子に捕らわれる必要はない。また、酸化物などとは異なる分子独自の高次機能が内在されたような分子物質の開発が望まれる。必ずしも結晶の周期構造に捕らわれることなく、生体系から教わることもあるのではないかと考えられるし、一方、生体分子機能の研究の立場からは物性科学的な観点の導入が必要となる課題もあるのではないかと考えられる。

今後の分子研における分子集団関連分野の研究では「分子の視点」を持って新しい分子機能の研究領域を広く開拓することが出来る様な状況を作り出す事が強く望まれている。

4-4-2 国内委員の意見書

委員 A

- (1) 今回対象となった分野は分子集団研究系の分子集団動力学部門と物性化学部門、相関領域研究系の相関分子科学第一部門、理論研究系のうち分子基礎第四部門、及び分子スケールナノサイエンスセンターである。それぞれの研究グループはサイズのには小規模であるが精力的に活動し高水準の業績を上げている。まず、分子導体に特徴的なパイ電子と磁性イオンの相互作用による機能発現を可能とする電荷移動錯体の開発、単分子金属の開発などの、有機半導体研究分野で世界的に高い評価の与えられている成果が挙げられる。また光学的並びに磁気的なスペクトロスコピーによって分子性導体の電子構造、電子励起、相転移に関する研究では多様な物質に関する有用なデータが集積されている。分子磁性体ではキラル分子磁性体が開発され不斉磁気二色性などの特色ある研究が進められ、低次元金属錯体系にみられる多彩な電子物性の起源を明らかにする理論に関しても精力的に研究がすすめられている。これら基礎研究分野に属するものに対し、平成14年度に発足した分子スケールナノサイエンスセンターはまだ助走段階に過ぎず文字通りナノスケールサイエンスにかかわる研究はこれから着手される段階にあるに過ぎないが、現時点でなされている、有機半導体電界効果トランジスター、有機EL発光素子の研究は産業界における開発研究に寄与するものであり、すでに企業との共同研究がなされている。分子科学研究所においてかつて余力が入れられていなかった分野ではないかと思われるが、社会への還元が強く謳われる時代にあっては研究所として抱え置くべきものとして重要性が高くなっている。また、この分野では炭素共有結合性自己組織化膜、フッ素化 dendrimer の開発などの基礎研究面でのユニークな成果が挙げられていることも評価に値する。
- (2) 分子科学研究所における研究の進め方について考えるとき、教育義務が比較的少なく設備的にはより充実したものをもって一定の目的意識の下に研究を進める、言わば研究プロ集団として機能することが可能などみることができるとともに、共同利用機関としての貢献が求められる場であること、また内部昇格を認めていない研究の場であることに留意する必要がある。教育義務が少ないことは学生が少ない分マンパワー的には恵まれない状況にあるということができるが、研究者自らの考えにもとづく方向に集中することが出来、独自の研究を指向することを可能としている。共同研究へのサービスは負担となる可能性はあるが新たな方向に研究を進展させる機会につなげる可能性をもたらすものと捉えることも可能である。こうした中で人事的にも流動性を維持するための努力が重ねられている。これは所員に限られた期間に高い業績を上げることを迫るものであるが、それが現実のものとなっている実績を持っていることは高く評価される。その結果、数多くの有力な研究者を輩出することにつながるとともに、分子研に於ける陣容が陳腐化することなく重要な貢献をするレベルを維持することにつながっている。今後においてもこれを維持してゆくためには研究者の交代に伴い新しくスタートした研究グループにはその研究推進に必要な設備投資が傾斜的になされ早期に立ち上げることが出来るよう十分な資金的な手当てがなされる必要がある。(伝統的にこうした配慮はなされているようであるが。)
- (3) 一方、分子科学に関する研究を進める使命を持つ研究所として眺めた場合、単なる個々の研究者の集まりといった構成を超えたものが出されることが期待される。即ち、近接した専門領域の研究者が結集する事によって可能となる協力相互作用に基づいて、研究面での新しい方向性とでも言うべきものを生み出すことが求められる。このためには各研究者の間の連携が推進されることが望ましい。共同利用に関する要務があることは負担増を求めることにつながるかもしれないが、個々の研究者が業績面での確かな足場を作りつつ、研究者の間で積極的な共同研究が心がけられることが求められる。こうしたことによって個々の研究者の境界領域に新しい問題がはぐくまれる事になるのではないかと。理論研究の場合であれば分子研内で進められている研究が対象の一つとして取り上げられること

が望ましい。今後の分子科学に多大な期待が寄せられつつあるものの、あるべき展開の方向を見出すことが求められている状況にあると思われるからである。

- (4) 例を質・量の両面においてわが国は世界のトップレベルにある有機導電体の研究に取れば、分子研のメンバーはその核の一つに位置している。しかし、このような有機導電体の研究はいわば成熟期にある。これは次なる方向が模索されているときにあることを意味している。特にナノサイエンスが声高に主張され研究の大きな流れが作られようとしている現状において分子性導体の研究がどの方向に活路を見出すべきかという問題がある。分子研にはこうした状況の下で将来への展望を拓くことが期待されているように思う。当該分野に今後の発展はあるかと聞かれれば、あると答えることになるが、そのためには現在の単純な延長線を超えた新しい方向付けがなされることが肝要なのであり、分子研こそはそうした取り組みが可能などころではないかと思われ、それがなされることへの期待が寄せられる。強力な専門家集団を擁する分子研は新しい活路を見出す試みがなされるべき場でもある。

なお、基生研、生理研などと連携し新しい方向を作り出す試みもなされているようであるがそれがより積極的に取り組みられ、分子科学の活躍する新しい場が創り出されることに繋げられることが望ましい。

委員 B

(1) 分子集団関連研究分野での分子研の役割、寄与と位置付け

分子集団関連研究分野において、分子研は主として有機電荷移動錯体の超伝導など電子物性の研究および有機・無機複合錯体の分子磁性の分野で重要な貢献を果たしてきた。このことは、当該分野の多くの論文、学会発表で共著者として名を連ねていることから明らかである。特に分子研で開発された有機無機複合錯体から遷移金属イオンの d 電子と導電性有機分子の π 電子の相乗効果によって発現する磁場誘起超伝導相が発見されるなど、物性科学への貢献は高く評価される。また、低温・高圧下ラマン散乱や固体NMRによる有機電荷移動錯体における様々な電子相の研究では、共同研究の拠点として重要な役割を果たしている。

(2) 分子集団関連研究分野での個別評価

小林速男氏は、導電性有機分子と磁性金属錯体による複合錯体から超伝導相と反強磁性相の競合や磁場誘起超伝導相を発見するなど、 d - π 電子相互作用によって発現する特異な伝導物性の研究で優れた研究成果をあげている。また単一分子の集合体による合成金属の開発など、その成果は国内外を問わず高く評価されている。

薬師久彌氏は、様々な有機導体を対象に種々の電子相をラマン分光法で解析し、電荷分離相の発現を微視的に解明するなど、当該分野に大きな貢献を果たしている。

中村敏和氏は、固体NMRにより有機導体の様々な電子相を微視的に解明しており、当該分野において、固体NMRによる電子相の研究の重要な拠点になりつつある。

米満賢治氏は、有機導体や低次元混合原子価錯体で現れる様々な電子相の出現メカニズムを明らかにしており、理論面から当該分野に果たしている役割は重要である。また、光誘起相転移など非平衡で現れる特異な現象の解明にも取り組んでいる。

井上克也氏は、有機ラジカル分子を配位子にした金属錯体を対象に、様々な次元性の新規分子磁性体を開発してきたが、さらに合理的分子設計に基づいたキラル分子磁性体の開発に成功している。この系では、磁性と非線形光学の相乗効果が期待されており、分子磁性の分野で重要な貢献を果たしている。

鈴木敏泰氏は、多数のフッ素を置換基に持つ様々なフッ素化 dendrimer やフッ素化チオフェンオリゴマーなど独

自の機能性有機分子を開発し、その有機EL素子への応用を積極的に進めている。物質の開発には独創性があり、高く評価されるものである。

畠田博一氏は、シリコン基盤と末端に2重結合を持つ有機分子との共有結合を制御することにより有機単分子膜の作製とこれを利用したナノスケールのパターンニングの作製に成功しており、その独創性が高く評価される。今後の発展が期待される。

(3) 当該分野の国内、国外での研究分野としての重要度

有機電荷移動錯体を中心とする分子集団系の分野は、1979年に世界で最初の有機超伝導体(TMTSF)₂PF₆が発見されて以来、様々な電子相が発見されるなど大きな発展を遂げ、物性化学、物性物理学の重要な分野になっている。様々な新物質開発と多彩な電子相の発見は化学者と物性物理学者を結びつける重要な役割を果たしてきた。

(4) 今後この分野の発展はあるか、どのような方向か

有機電荷移動錯体を始めとする分子集団系は、極めて多彩な電子相を内包しており、物性研究の宝庫であることは間違いない。しかし、有機超伝導発見から20年以上経った現在、単分子の集合体による超伝導相の開発など重要で未開拓の課題は多くあるが、自然科学者を驚かすような大発見は少ない。言い換えれば、先が読める研究になってきている。また、先が読めるため、必ず成果が出るルーチン化した研究になっている傾向が否定できない。また、分子集団系を対象としている物性化学者の研究の切り口、発想が同じベクトルを向いている現状に危惧を感じる。多彩な研究の切り口と発想から、新しい萌芽的な研究が出て来ることが切望される。

本分野の発展には、単体や酸化物にはない分子集団系独自の特色を最大限活用することが不可欠であろう。例えば、異種分子から構成されるヘテロ分子集合体において、それぞれの分子特有の機能性の相乗効果によりヘテロ分子集合体でしか発揮できない高次機能性、複合物性の開拓がある。分子研で開発された有機無機複合錯体による磁場誘起超伝導相の発現などは $d-\pi$ 相互作用によって初めて発現する現象であり、単一の分子集団系では現れないものである。ヘテロ分子集団系において、独自の機能を持つ異なる部品が集合し全体として高次機能を発現する仕組みは、階層は異なるが生命システムの高次機能発現に通じるものがある。

(5) 分子研の当該分野が今後どのように進むべきか

現在、分子研の分子集団研究系および関連分野は分子集合体の物性化学分野の重要な拠点になっており、全国的な共同研究が積極的に行われています。しかし、構成単位の研究室の規模は小さく、大学の1研究室との差は殆どありません。分子研が重要な拠点になっているのは、分子集団研究系および関連分野の研究者の質の高さに負うところが多いと思われます。

分子科学研究所における分子集団研究系に期待されることは、この分野の先導的研究の司令塔となることでしょう。時代の先を読み萌芽的な研究にすばやく対処するため、客員部門を有効に活用し、国内外を問わず優れた若手研究者を客員部門の研究員として待遇し、先導的研究を開花させる役割があると思われます。次に、開花した段階でプロジェクト研究として遂行するシステムが必要でしょう。例えば、有機超伝導体研究の発展期に重要な役割を果たした電総研基礎部門のように。また、研究対象と解析の切り口を広げることも重要と思われます。分子集団研究系の物性化学が蓄積してきたものは、将来、生命システムを分子集団系のレベルから解明する上で重要になって来るものと思います。また、原子・分子を対象としている物理化学部門との横断的研究による分子集団系のフェムト秒光物性の研究な

ども今後重要な課題になると思われます。

(6) 分子研の共同利用機関としての現状と将来への提言

物性科学分野での代表的な共同利用機関として、東大物性研と分子科学研究所があります。物性研の場合、超高压や超強磁場など特化した極端条件下での物性測定の共同利用に特色があります。分子研の場合、1980年代には高額な汎用性の高い機器(例えばXPSなど)の共同利用拠点として重要な役割を果たしてきました。しかし、政府による様々なプロジェクト研究支援などにより多くの大学で高額機器が整うようになった現在、分子研の共同利用の役割は少なくなってきました。現在、分子研における分子集団系部門の役割は、共同利用よりむしろ共同研究の拠点として重視されており、ここに特色をもたせるべきでしょう。そのためには、(5)で述べましたように、客員研究部門を活用した求心力のある先導的研究の推進と開花させた研究がプロジェクト研究として推進できる体制が必要と思われます。

(7) 分子研に対する建設的批判、提言

分子研の分子集団研究系および関連分野は分子集合体の物性化学分野の重要な拠点になっており、全国的な共同研究が積極的に行われています。しかし、構成単位の研究室の規模は大学の研究室より小さい位です。

また、大学院生を集めるのに苦労されていると思います。今後の少子化時代を考えると、この問題は簡単には解決できない問題です。分子研が組織の上でも世界の拠点になるためには、大学院生の授業料を廃止しRA制度による給与の支給など世界に通用する制度、スタッフに優秀な外国人を任用するなど世界の優秀な研究者が十分に活躍しやすい制度を検討されるのも必要かと思います。

4-4-3 国外委員の評価

原文

External Appraisal of Research Programmes on Molecular Solids

1. Background

For a number of years now, the Institute for Molecular Sciences has invited a senior scientist from outside Japan to conduct appraisal of the Institute's research programmes falling within the general field of molecular solids. As the third such reviewer, I was asked to survey activities covering the years 1999–2002. The review was carried out by examining the publications falling within this period, and by personal interviews with seven group leaders in the Departments of Molecular Assembly and Theoretical Studies, and the Molecular Scale Nano-Science Centre. The interviews took place on 15–16 January 2003, when I also had the opportunity of viewing the laboratories. I would like to take this opportunity of thanking Prof. H. Kobayashi and his colleagues for the welcome that they extended to me, and their readiness to make themselves available for interview.

2. Some Quantitative Aspects

Essential background to an evaluation of the quality and significance of the research effort in any laboratory are the data about input, in terms of the numbers of people involved, and output, as measured by the traditional method for communicating results in basic science, namely publications.

The first feature noticed by anyone who comes to IMS is the relatively small number of personnel. Of the seven groups operating

in the area of molecular solids, the largest had 12 members over the 3 year period under review (though not all present at the same time), and the smallest (in fact one of the newest) had only 3. The average size seems to be about 5–6. Apart from the group leaders themselves, other categories of personnel include Research Associates, Technical Associated, Visiting Fellows and Graduate Students (Masters and Doctoral). Numbers of the latter are limited in practise to 12 per year, though I understand that up to 18 could be accommodated if suitable candidates came forward. I return to this matter later in my report. For the moment, let it simply be noted that in the Institute as a whole there are 48 groups, so in a given year, many groups will not have the chance of welcoming a new student.

Considering further the input to the research effort, one might have expected IMS to be a substantial world focus for scientists in the molecular solids field. While it is true that widespread collaborations are in existence with outside laboratories, it is surprising that the majority of the visiting scientists originate either from Eastern Europe or Asian countries such as China and Korea. Representatives from Western Europe and the USA are few in number.

It is further of interest to examine the distribution of effort in the very wide field covered by the phrase “molecular solids.” In general, one might expect to find work covering both conductors and magnets, monolithic crystalline and thin film assemblies, synthesis and physical characterisation, and experiment and theory. In fact, taking the seven groups under consideration, that is very much what is found. Two groups focus on crystalline molecular conductors and magnets (Kobayashi, Inohe), two on physical techniques (Yakushi, Nakamura), one on theory (Yonemitsu), and two on surface and thin film phenomena such as FET’s (Suzuki, Tada). There is also very good access to structural characterisation, through XRD or microscopically by AFM.

As far as research output is concerned, the quantitative measure of publications presents a remarkably high level of productivity. The team of about 40 researchers in the 7 groups produced no fewer than 369 publications in the three year period. That represents an overall mean of around three publications per researcher each year! Of course, there are also many outside collaborators involved, and productivity is not uniform; nevertheless this constitutes a most remarkable record. Furthermore, whilst a substantial number of publications are in the proceedings of conferences, such as the biennial International Conference on Synthetic Metals (and hence not subject to such stringent refereeing as mainstream papers), most of the rest are in high level international journals, including many in journals having the highest impact factors such as Science, Nature, JACS, PRL, Angew. Chem., etc. It is notable, however, in view of this high rate of output, and in a field from which advanced applications might be expected to flow, that there is only one patent listed.

3. Quality of Work

The willingness of the IMS groups to subject themselves voluntarily to examination and evaluation by an outside observer who is himself active in the same field is itself a measure of confidence in the Institute’s scientific standing. And indeed such confidence is not misplaced. There can be no doubt at all that IMS is recognised throughout the world as one of the most highly respected centres of activity in the basic science of molecular solids. Such has been the case for many years, so the challenge faced by the Institute is to maintain (and, if possible, enhance) this high standing. In the U. K. system of research evaluation it is customary to categorise work as being “internationally leading,” “internationally competitive,” “nationally leading,” “nationally competitive,” etc. On that basis, I have no hesitation in stating my own personal opinion that all the work I had the opportunity of learning about is fully internationally competitive, and further, that numerous aspects of it are internationally leading.

The emphasis of the research programme at IMS has always been on the search for understanding of the fundamental principles

underlying the physical properties of molecular solids, especially collective electronic properties such as conductivity. A large number of different ground states are accessible to such narrow-band strongly-correlated electron systems, which are often also low-dimensional. With the passage of time, however, broad outlines of the structure-property relations in this class of materials are becoming clearer. Hence worldwide attention is turning towards a search for new physical effects, usually involving new combinations of properties not normally found together in the same lattice. Examples from the IMS work include the association of different kinds of magnetic order with superconductivity, magnetism in structurally chiral lattices and phenomena connected with charge ordering. All this work is at the leading edge on an international level.

Work on fundamental understanding of molecular solids is usually based on experiments requiring monolithic long-range-ordered single crystals, but in parallel, as such understanding improves, emphasis may start to shift towards other forms of molecular organisation such as thin films and patterned surfaces. Welcome developments of this kind are now underway at IMS, which should lead to systems tailored for specific purposes, such as gas sensing and molecular electronics.

4. Some Concluding Remarks

IMS is recognised universally as one of the world's leading centres for the study of molecular solids. That this has remained the case for many years must be a matter for congratulation to the staff and those responsible for research policy. Nevertheless, it remains important for the future maintenance of this standing that the Institute and its sponsoring agency continue to be vigilant, both in selecting lines of investigation and in the way they are organised. One task of an external evaluator is to draw attention to issues that could impact on future performance, and so make this centre of excellence even more so. In that spirit, let me highlight a few points in the form of questions.

Research that has the greatest impact is usually that which takes knowledge into uncharted new waters, that is, where even the principles of behaviour may not be known, and where results may be quite unexpected. This kind of adventurousness is something that IMS is in a good position to foster. In creating the circumstances where originality can flourish, a steady influx of new ideas and approaches is desirable, and is most effectively accomplished by changeover of personnel. It is encouraging to see new groups and new directions of research being established, but a further critical consideration concerns the researchers on shorter term appointments.

Overseas visitors on limiter-term Fellowships can bring much to a laboratory in terms of fresh perspectives, so it is disappointing not to see larger numbers of high-level staff from the world's major laboratories taking advantage of the excellent environment that IMS provides. Similarly, despite the severe limitations placed on the Institute by the quota of graduate students that it is allowed to accept, strenuous efforts should be made to bring the opportunities provided by IMS to the attention of a wider range of potential candidates.

Finally (and at a risk of importing prejudices from another part of the world), it comes as a great surprise to learn, not just that three years output has produced only one single patent, but that the Institute has no mechanism for technology transfer, and protecting intellectual property. The field of molecular solids is one with considerable potential for applications, and the Institute needs to be attentive to any opportunities that arise.

Having said that, the name of IMS is a byword for excellence and productivity in molecular solids research. It was a pleasure for this evaluator to have the chance of seeing it at close quarters, and I wish it well for the future.

分子性固体研究活動の外部評価

1. 背景

これまで、分子性固体分野に関する研究所の研究プログラムの評価を行うために、分子研は海外から指導的科学家を招いてきた。その3番目の評価委員として、私は、1999 - 2002年の業績を調査するように依頼された(訳注:評価をまとめる時の参考にして戴くために前二回のレポートのコピーを前例としてPeter Day先生に事前にお送りしていたので、誤解されたものと思われるが、実際は4回目である)。点検評価はこの期間の出版物の査読および分子集団研究系 理論研究系および分子スケールナノサイエンスセンターの7人のグループリーダーとの個人面接により行われた。

2. 研究の量的な観点から

どのような研究室においても、研究活動の質と意義に対する評価の基礎は、研究活動を行った人の数という「インプット」と、基礎科学における発表に関する伝統的な方法、即ち発表論文によって測られた「アウトプット」である。

分子科学研究所を訪れる誰もが気づく第一の特徴は、人員が比較的少ない点である。分子性固体分野の7つのグループでは、この点検評価に関わる3年間に於いて最も大きいグループで12人、最も小さいグループ(新しいグループ)では、僅か3人である(必ずしも全ての人員が同時にいたわけではない)。平均サイズは、約5 - 6人のように思われる。グループリーダー自身を除けば、他の人員は、助手、技官、客員研究員及び、大学院生である。大学院生の数は、1学年に12人と制限されている(もし適当な候補者がいる場合には最高18人が受け入れ可能と理解したが)、この問題についてはまた後で述べる。まず、研究所全体として48のグループがあるということを考えると、多くのグループで新入生を受け入れるチャンスがないということは差し当たり注目しておくべき事である。

研究活動に対する「インプット」を更に考える場合、分子科学研究所は分子性固体分野の科学家の世界的拠点であることが期待されているという点があるであろう。確かに、広範囲な研究協力が海外の研究室との間でなされているのは事実であるが、外国人客員研究員の大多数が、東欧あるいは中国、韓国といったアジアの諸国から来ていることは驚くべき事である。西欧及び米国の代表的研究者は少ない状態である。

「分子性固体」という言葉によって包含される非常に広い分野における研究活動の様子を調べることは非常に興味深いことである。そこでは一般に、伝導体と磁石、単一結晶および薄膜の集合体、合成および物理的評価、実験および理論等の仕事がなされていることが期待されている。実際、7つのグループはまさにその通りの状況にある。2つのグループは分子性結晶の伝導体および磁石(小林,井上)、2つのグループは物理測定(薬師,中村)、一つは理論(米満)、および2つのグループはFETなど表面や薄膜の現象(鈴木,多田)に研究の主眼を置いている。X線回折による構造研究やAFMによる微視的な構造研究に関しては非常に良い環境が存在する。

研究の「アウトプット」に関して、発表論文の数量に関しては著しく高いレベルにある。7グループの約40人の研究者チームは、この3年間に少なくとも369報の論文を報告した。それは、全体平均として毎年1研究者あたり約3報の論文を出していることを示している! もちろん、外部の共同研究者のものも含んでおり、また、その生産性は均一ではない;それでもなお、これは最も注目すべき記録である。更に、論文のうちのかなりの数は、2年毎の合成金

属国際会議のような国際会議のプロシーディングであるが(従って、主要論文誌のような厳しい審査を受けるものではないが)、大部分の残りの論文は最も高いインパクトファクターを持つ *Science*, *Nature*, *JACS*, *PRL*, *Angew. Chem.* などを含む高いレベルの国際雑誌に報告されている。しかしながら、この高い評価の「アウトプット」と比べると、新たな応用が期待されるこの分野において、特許がたった1件しかないことは注目しなければならない。

3. 研究の質について

分子科学研究所が自発的に、同じ分野で活躍する外部の研究者によって評価をうけることは、それ自体が研究所の科学的地位に対する自信の現れである。そして、実際、その自信は見当違いのものではない。分子科学研究所が、分子性固体の基礎科学分野で最も重要な活動拠点中心の1つとして世界中で認識されることに関しては、疑いの余地がない。この状況は長年持続されてきたが、今後この研究所が挑戦すべき事は、この高い地位を維持する(そして、可能であれば、さらに躍進する)ことである。英国の研究評価システムにおいて質の高い研究とは、「国際的に先導的である」、「国際的に競争力がある」、「国内的に先導的である」、「国内的に競争力がある」等に位置づけされるのが通常である。それに従えば、今回知る機会を得たすべての分子科学研究所の研究は、十分な国際的競争力があり、そして多くの点において国際的に先導的でもであると、躊躇なく結論できる。

分子研の研究プログラムは、常に分子性固体の物理的性質の根底にある基本原理の理解に対する研究、とりわけ電気伝導度といった集団的な電子の性質に重点が置かれていた。そのような狭いバンドの強相関電子系(そしてまた低次元系でもある)においては、多数の異なる基底状態が実現している。しかしながら、時代が進み、これらの系の構造と性質の関係の大まかなアウトラインに関しては、明らかになってきている。従って、世界的関心は、新しい物理的効果の探索(同じ格子において通常同時には見いだせない性質の組み合わせなどを含む)に向けられている。異なる種類の磁気秩序と超伝導の共存、キラルな構造をもつ磁石、電荷秩序に関わる現象といった、分子研の研究はまさしくその例である。これらの研究はすべて、国際的なレベルにおいて最先端に位置している。

分子性固体の基本的な理解に関する研究は、通常長距離秩序をもつ単結晶を要する実験に基づいている。しかし、単結晶研究の理解が進むと共にそれと平行して、薄膜やパターン化された表面といった他の分子組織化へ重要性がシフトし始めるかも知れない。この種の発展が分子研で現在進んでいることは歓迎すべきであり、この発展はガス感知や分子エレクトロニクスのような特定の目的を目指した系をもたらすであろう。

4. 結語

分子研は、分子性固体研究の世界の主要な拠点の1つであると広く認知されている。長年にわたりこの状況を維持していることは、スタッフおよびその研究方針の舵取りをしてきた責任者にとって喜ばしい事である。それでもなお、研究所および財政面を支援する機関が研究の方向性や研究組織の選択に関して十分に注意し続けるということは研究所が将来も現在の位置を維持し続けることにとって依然として重要である。外部評価委員の1つの仕事は、将来の研究効率に影響を与え、また、このCOE(分子科学研究所)をさらにその名にふさわしくするような問題提起をすることである。その精神において、質問の形で2, 3のポイントを強調させて頂きたい。

最も大きい影響力を持つ研究は、一般に未踏の新しい水域、つまり挙動の原理さえも知られてなく、また結果も全く予測できないものに対して知識を提供するものである。この種の冒険を推進するのに分子研は良い立場にある。独創性が育つ状況を作るには、新しい発想や取り組み方が絶えず流入することが望ましく、また、人員の流動性が最も効果的である。分子研において新しいグループおよび新しい研究の方向が確立されているのは結構なことである。し

かし、短期任用の研究者については更に慎重な考慮が必要である。

限られた期間のフェローシップによる海外からの訪問者は新しい展望という観点で研究室に多くの物をもたらすことができる。従って、世界の主要な研究室からの高水準の研究者が分子研のもつ優れた環境を利用していない現状は期待はずれである。同様に、受け入れ可能な大学院生に対する厳しい制限はあるものの、更に広い範囲の潜在的な候補者を分子研に引きつけるよう精力的な努力を行うべきである。

最後に(他の国からの偏見である事を承知の上で言及するが)、3年間でたった1件の特許しか出ていないということよりも、研究所が技術移転や知的財産保護のためのメカニズムを持っていないということを知って大変驚いた。分子性固体の分野は、応用の可能性をもった分野であり、研究所はそのような機会に何時も注意を傾けている必要がある。

ともかくも、「IMS」の名前は、分子性固体研究におけるきわめて優れた活動拠点として広く認知されている。今回の評価で分子研を間近に見る機会を得たことは喜びであり、将来もこの状態が維持されることを希望する。

Peter Day

2003年1月20日

4-5 極端紫外光科学研究系

国内評価委員会開催日：平成14年12月10日

委員 上野 信雄（千葉大工，教授）
辛 埴（東大物性研，教授）
中川 和道（神戸大発達科学，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 見附孝一郎（分子研，助教授）
繁政 英治（分子研，助教授）
加藤 政博（分子研，助教授）
木村 真一（分子研，助教授）

国外評価委員面接日：平成14年10月28日～29日

委員 Alexander M. Bradshaw (Professor, and Director General of Max-Planck-Institut fuer Plasmaphysik)

4-5-1 点検評価国内委員会の報告

国内委員による評価は、面接により、以下の研究グループの研究活動に関して行った。

(1) 極端紫外光科学研究系

- ・宇理須グループ（反応動力学部門）
- ・小杉グループ（基礎光化学研究部門）
- ・見附グループ（反応動力学部門）

(2) UVSOR

- ・繁政グループ
- ・木村グループ
- ・加藤グループ

4-5-2 国内委員の意見書

委員 A

(1) 全体的な観点からの意見

- ・評価対象のスタッフは何れも放射光を利用した分子科学研究を推進あるいはそれを支える研究を行うことを目的としている。しかし、極端紫外光科学研究系とUVSORのスタッフでは業務内容は異なっている。後者には上記研究推進に加えてUVSOR施設の維持管理を行なうという業務がある。過去、UVSORスタッフの研究環境の問題が指摘されてきたが、UVSORスタッフ数の改善等について着実な努力が行われている。この改善は十分とはいえないが、将来においてより高度な研究成果を上げるためにその努力は高く評価される。
- ・研究グループのあり方について再考を要すると思われる。例えば、教授の研究グループの場合、教授が自ら研究を推進できる時間が極端に制限される現状にあって、1名の助手と幾人かのポスドクで研究グループを構成する場合、世界をリードする研究を推進し続けることは困難と考える。スタッフ(定員)数を増加することが困難である現状を考えると、研究グループをジョイントするなどし、一グループあたりの研究者数を重点的に増やし、一層の研究成果を

上げられる強化チームを形成することも必要かと思われる。

- ・今回評価したUVSORでの研究成果は総合的に見て高く評価できるが、残念ながら、放射光を利用した分子科学研究についての戦略を研究所としてどのように位置づけているか十分には見えてこない。極端紫外光科学研究系とUVSOR施設以外の研究系のあり方とも関連するが、少ない研究グループ数で将来的にどのような放射光利用研究を重点的にカバーする必要があるのか、前述のグループの強化と関連して総合的に検討することが望まれる。

(2) 各グループの研究評価

宇理須グループ：本グループは、放射光励起反応を実際に有用なデバイス関連材料の表面改質・加工に関連させて研究している。世界的に見て非常にユニークな研究とあって良い。これまでのSiO₂の放射光励起エッチングに関する研究成果にもとづいて新しく開始された放射光励起Siエッチング表面のSTMによる研究はSTMシステムをビームラインにおいて初めて利用することに成功した研究として高く評価される。一方、タンパクを利用したトランジスタの研究も開始されている。本研究は生体分子機能の新たな展開に関連して重要な試みであることは明白であり、またLSIなど多様な経験を持つ宇理須グループの新しい展開として期待されるが、マンパワーが十分でない極端紫外光科学研究系のグループが中心に行うべき研究かどうか必ずしも明瞭ではない。

小杉グループ：分子のNEXAFS実験とNEXAFS計算を両立させ実験と理論計算の連携研究を推進している特徴あるグループで、着実な成果が得られている。ホットなトピックスを追いかけるといって最近ありがちな研究ではなく、基礎学術を根底から支える類の研究であり、高く評価したい。特に分子のNEXAFSの計算法に関する理論的研究では卓越した成果をあげており、その発展の重要さとさらに関連分野への貢献を考えると、今後本グループのマンパワー上での強化が望ましいと思われる。

見附グループ：レーザーと放射光を組み合わせた気体分子の光励起反応に関する分光学的研究では過去多くの成果を上げている。しかし、最近の研究を見る限りその独自の進展は以前ほどではなく、本グループの力量を生かすべく一層の努力が望まれる。

繁政グループ（UVSOR）：光励起によるイオン放出を利用して分子の結合方向を特定し、光電子角度分布を測定する研究は世界的に見てユニークな研究である。同グループでは単にその研究を継続するだけでなく、新たな試みが推進されており、今後の発展が期待される。

木村グループ（UVSOR）：現在は着任後の研究立ち上げ期間中であり、現時点で研究成果を評価できないが、研究計画から判断する限り今後の進展が期待される。

加藤グループ（UVSOR）：加速器のメンテナンスなどの多忙な業務を行いながら、自由電子レーザーに関する研究に着実な成果を上げている。自由電子レーザーと放射光をカップルさせた実験が計画されており高く評価できる。

委員 B

それぞれの研究者がユニークな特徴を出し、他の研究所ではできないような研究をしているのに感心した。第二世代の古い光源に苦しみつつも、専用ビームラインと実験装置に適当なお金をつければ、他の研究所ではできない研究を行っていることが十分理解できた。

小杉グループの理論に関しては、世界に発信できていることは理解できた。新しいタイプの軟X線発光分光器は開発的要素が多く大変だと思うが、是非、所定の性能が出るまでやり遂げて欲しい。この分光器はスポットサイズが小さいことが分解能をあげる必要条件なので、他の高輝度光源で使用することも考える必要があるであろう。

繁政グループ等によるガスの研究はオーソドックスな実験なので、測定器に独創的な発想等が求められる。それを実行するために必要な豊富な資金のサポートが必要であろう。また、UVSOR 以外の高輝度光源の使用は必要である。見附グループ等によるレーザーと照射光の同時照射に関しては、これまでのように実験を行っただけで、ほめられた時代は過ぎつつある。他の放射光施設でも、実験や計画が急速になされており第2世代の利用研究が始まりつつある。UVSORでは先駆的な実験を始めている事は世界的にも認められているが、他に負けないようなめざましい成果を更にする必要がある。

宇理須グループのサポートドメンブレンによるタンパクトランジスタの形成は、新しい発想によって行われており興味深い。このような研究は欧米で現在活発な研究が始まりつつあるが、日本においても早急に行われるべきである。学際的な研究分野でもあるので、半導体微細加工技術を利用した独自の発想を実用化させるためには研究所内外との共同研究等も積極的に進めるべきである。

木村グループの赤外領域の研究に関しては、これまで通り、装置の改造を重ね、成果を出して行って欲しい。日本で、放射光の赤外利用はUVSORとSPring-8のみしかないのが、貴重な光源である。物性物理だけでなく、生物利用もやって欲しいが、マンパワー的に無理だと思うので、外部共同研究者との連携を模索したらいいと思う。また、UVSORは固体の高分解能光電子分光に向いている装置である。これまでこのような研究が全くなかったのが不思議であった。今回、このような計画を出してくれてうれしい。この分野は高輝度光源を用いる必要がないので、UVSORが世界のセンターになれるようがんばって欲しい。

放射光利用研究者は実験をしていると、実験する光のエネルギー範囲を広げようとする誘惑に駆られる。UVSORでも使用するエネルギーを高くしようとする傾向がある。しかし、UVSORでは他でできないような200 eVくらいまでの低エネルギー領域に特化すべきかと思われる。このエネルギー領域をカバーする放射光施設は逆に少なくなりつつある。無理をして高いエネルギーを出して他の最新の放射光施設に対抗してもとてもかなうとは思えない。最も得意な領域で、活躍するようにした方がいいかと思われる。また、光エネルギーが下がると輝度は急激にあがるので、低エネルギー領域では高輝度光源である必要はなく、UVSORの輝度で十分である。その場合、エネルギーの高いところは使用できないが、UVSOR以外の放射光施設も積極的に利用した方がいい。UVSORのみで完結した研究はもはや無理であろう。エネルギー的に相補的な放射光施設と連携を深めることは相手側施設にもメリットがある。

UVSORが第二世代光源であるにもかかわらず、元気がある源は、

1. いつでも使える上に、自由な発想で利用に関してやりたいことができる専用ビームラインの存在
2. 測定器作成にかかる（他の施設に比べれば）比較的豊富な資金の存在

である。この特徴はこのまま堅持すべきと思われる。しかし、資金に関してはもう少しないと、世界に発信できるほど自由な研究ができないかと思われる。このままだと世界的なレベルに追いつくことはできても発信するところまでは行かない。資金があれば今のような研究テーマでも十分可能かと思われる。

UVSORのライバルは他の放射光光源ではなく、軟X線レーザーに代表する軟X線領域の代替光源かと思われる。他の放射光以外の光源がUVSOR並になったときにUVSORの役目は終わるので、そのときを目指して、次期計画を立てるといいかと思われる。

1. 評価の経過

極端紫外光科学研究系の評価は、本委員が日頃から把握している各グループの主な活動に加え、9月頃にあらためて送付されてきた各グループの主な論文、分子研リポート 99および同2001, Annual Review 2000 および 2001 などをもとに準備された。さらに12月10日、宇理須教授のオーガナイズのもと、研究系のメンバーである宇理須教授、小杉教授、見附助教授につづいてUVSOR施設のメンバーである繁政助教授、木村助教授、加藤助教授の計6名の研究者に面接を行った。

2. 高度化

今回の評価にあたって特徴的なことは、高度化に踏み込みつつある段階での各グループの活動にじかに接した点である。とくに加藤グループは現在進行形でその直接的な担い手であり、「創造のピーカーに手を突っ込んでかきまわしている」ホットな状況での評価となった。今後15年間程有効な競争力を維持する決め手として第2世代の蓄積リングとしては妥当な低エミッタンス化をねらい、アンジュレーター挿入が可能な直線部を低ベータ化しつつ数多く確保する方向は極めて適切であり、次期マシンの新規計画までの当面の時間内に新しい機能を確保するうえで重要な自由度をもたらすものである。ビームラインの名称にアンジュレーターを意味するUがつけられ(5A 5Uなど)、大いに期待がもてる状況である。

しかしマシンそのものの老朽化は厳然とした事実であり、2002年11月の水漏れ事故のような老朽化事故が再発する危険性は常につきまとう可能性がある。高度化と老朽化対策との両者をいかに両立させつつ達成するかがここ当面のカギとなる。

3. 現状の概括的な評価

極端紫外光科学研究系の各グループは、以前から指摘されているようにごく限られた人数であるという問題を有する。しかしながら、この系は世界的に高い競争力を発揮し維持している。理論研究の面では、スピン軌道相互作用をとりいれた内殻のab initio計算を世界に先駆けて実行しているなど、小杉グループの活動が大きな特徴である。このグループはまた軟X線発光分光などの実験も手がけており、理論実験の両面にわたる活動が有意義である。見附グループによって遂行されているレーザーとSRの同期実験は、分子振動の高い倍音成分をレーザーで励起するとともにSR励起を行うという分子科学ならではの興味深い実験で、UVSORのみならず分子研全体の活動を特徴づけるものである。このグループによるフラーレン類の研究も特徴的である。金属包接フラーレンの気相での分光研究の最大の問題点は試料の確保の困難さであるが、分子研あるいは機構の中にあるSRの強みを最大限に生かしていくべきである。宇理須グループのシリコン表面に生体物質を集積して機能をもたせていく研究は、バイオナノテクノロジーを具現するもので、極めて興味深い。

施設スタッフの繁政グループは新ビームラインの建設の終盤にあり、しきい電子分光、オージェ過程の新たな見直しなどの新しい研究分野を開拓しようとしている。新たな発展を期待したい。木村グループは赤外分光から軟X線電子分光にまで幅広いアクティビティをもつ新しいグループである。赤外のビームラインを有するのは国内ではUVSORとSPring-8のみであり、前者のスループットの大きさと後者の高い輝度とを上手に生かしつつ住み分け、分子研がこの分野で世界的な競争力を発揮することを期待したい。

4. 放射光が分子科学をいかに担うかについて

UVSORは、分子科学研究にとって顕著な特徴と極めて高い性能をもつマシンである。このことをフルに活用し放射光分子科学のいっそうの発展を期するうえで、UVSORがカバーすべきエネルギー範囲についての検討が必要である。

すなわち，放射光分子科学における分光は，50 eV 以下と 50 ~ 200 eV のエネルギー範囲とでそれぞれ独立の研究内容を呈するが，分子研としては 50 eV 以下をねらった高度なアンジュレーターがあってもよいのではないか。例えば，SPring-8 では軟 X 線領域で 100 Hz のスイッチング能力をもつ円偏光アンジュレーターがテストを控えているが，50 eV 以下のこういう高度なアンジュレーター計画は UVSOR こそが計画すべきものである。見附グループのフラレーンの研究をはじめ，50 eV 以下のアンジュレーターによって新たな展開が期待される分野は放射光分子科学の領域には多数存在すると思われる。

4-5-3 国外委員の評価

原文

Report on the Department of Vacuum UV Photoscience and UVSOR following a visit to IMS on 28/29th October 2002

Professor Tsuneo Urisu

Professor Urisu's research interests encompass the study of the mechanisms of surface reactions induced by synchrotron radiation, the further development of the so-called buried metal layer (BML) technique for increasing the sensitivity of IR reflection-absorption spectroscopy on semiconductor surfaces and the investigation of molecular self-assembly in adsorption from solution. The first area of research derives from Professor Urisu's work at the NTT LSI laboratory 1984–1992 where he was interested in synchrotron radiation-stimulated etching of Si surfaces for its possible application in device fabrication. The crucial measurement of the wavelength dependence of such processes is planned for the near future, but requires high flux undulator radiation. The BML method is very clever and has been used recently to obtain considerably better quality (S/N) vibrational spectra of hydrogen and of molecules adsorbed on silicon surfaces. An ingenious new method of sample preparation promises to extend greatly the breadth of application. The self-assembly work is the first step in a wider project involving artificial membranes and biological sensor development which has great potential for the future.

Professor Nobuhiro Kosugi

As Director, Professor Kosugi has been able to maintain the international reputation of the UVSOR facility by constantly improving instrumentation. The latest and most prominent example is the upgrade which will begin in the Spring of 2003. This will create—without changing the circumference—four new short straight sections which can also be used for insertion devices. Even though the storage ring has to compete with machines of the so-called third generation, which have a larger number of straight sections and (for XUV undulators) a higher energy, the improvements will ensure that UVSOR will have several more years of useful life. Professor Kosugi is also a talented theoretician who has contributed greatly to our basic understanding of core and valence level photoionisation processes. At the same time he runs a successful facility and is very much involved in innovative experiments in photoion and photoelectron spectroscopies, partly with Professor Shigemasa. On the theory side, his most recent contributions—as yet unpublished—include the ab initio calculations of S 2p molecular photoelectron spectra with exchange and spin-orbit interactions, experimental and theoretical investigations of so-called matrix effects in the excitation of core level Rydberg states as well as studies of spin-forbidden valence photoionisation.

Professor Toshihiko Yokoyama

Professor Yokoyama has just arrived at IMS from the Department of Chemistry, University of Tokyo where he worked as Lecturer and later as Associate Professor in Professor Ohta's laboratory. A previous station had been a post-doctoral appointment in the prestigious thin magnetic film group at the Free University of Berlin (Professor Baberschke). His most recent work in Tokyo has been on the investigation of chemisorption-induced spin-orientation transitions in thin magnetic layers. Using magnetic circular dichroism he was able to show, for example, that CO adsorption extends the thickness region of ultrathin Co and Ni films on Pd(111) and Cu(100), respectively, in which perpendicular magnetic anisotropy (PMA) is observed. Another highlight has been his work on molecular-based magnetic materials, for example, studying phase transitions and photon-induced spin transitions in Prussic acid analogues using EXAFS and near edge spectroscopy. His work in the past has centered on Photon Factory where he has also made significant contributions to developments in instrumentation. In future, it is to be expected that Professor Yokoyama will adapt his scientific programme to take full advantage of the possibilities offered by UVSOR. He will undoubtedly make a highly important contribution to the Department in the years to come.

Associate Professor Koichiro Mitsuke

Professor Mitsuke has a convincing track record in studies of photoionisation and photofragmentation phenomena using both synchrotron radiation and laser-based techniques. The experiments are carefully thought out, cleverly performed and, in some cases, quite unique. Two recent examples are provided by the spectroscopic characterisation of photofragments (obtained by photoionisation using synchrotron radiation) with laser-induced fluorescence (e.g. N_2^+ from N_2 or N_2O and CN from CH_3CN) as well as with "conventional" fluorescence spectroscopy (e.g. H^* , OH^+ and OH from H_2O). A recent experiment, similar in spirit, has been an investigation of the laser photoionisation of polarised argon atoms produced by the excitation of Rydberg states below the first ionisation potential using linearly polarised synchrotron radiation. Photon energy-dependent photoelectron spectra in the valence region of sulphur-containing molecules ("two-dimensional photoelectron spectroscopy") have been recently used to gain insight into autoionisation phenomena and the neutral dissociation of superexcited states. This is all very good work.

Associate Professor Eiji Shigemasa

Keeping successful international co-operations alive and producing excellent results in one's own laboratory is not easy. Professor Shigemasa seems, however, to have succeeded very well. He has recently produced two quite important papers with the Orsay and Nevada groups, one of them perhaps being a classic ("Non-dipolar electron angular distributions from fixed-in-space molecules," *Physical Review Letters*, July, 2002). Professor Shigemasa was involved in earlier, pioneering work on fixed-in-space molecules with Yagishita. A simple, but rather exciting experiment performed recently at UVSOR has been the measurement of the $1s$ core level excitation spectrum (essentially the absorption spectrum) of the nitrogen molecule using ion yield spectra measured in different directions relative to the electric vector of the incident synchrotron radiation. The predicted doubly excited states were clearly identified and an additional feature was ascribed to a triply excited. Professor Shigemasa is planning to measure threshold core level photoelectron spectra in co-incidence with fluorescence spectra in order to eliminate the effect of post-collision interaction. This will be a difficult (not many photons!), but it will be a very exciting experiment.

Associate Professor Shin-ichi Kimura

Professor Kimura was appointed this year, having previously worked at the University of Kobe. His research interests encompass the optical and magneto-optical properties as well as the electronic band structure of strongly correlated systems, in particular rare-earth compounds, organic superconductors and clathrates. He has used (and will use in future) the far infrared component of the synchrotron radiation spectrum, in particular for samples with small dimensions or for microscopy. For this purpose Professor Kimura is building a new beam-line on UVSOR. He also enjoys fruitful collaborations with Professor Nanba in Kobe and, in particular, with Professor Steglich in Dresden, Germany, one of the leading addresses for heavy fermion systems. It is expected that Professor Kimura, as in the case of Professor Yokoyama, will be an important asset to the Department, not only making full use of UVSOR, but also producing world class work.

Associate Professor Masahiro Katoh

Synchrotron radiation sources require good machine physicists, not only to build them, but also to achieve optimum performance during operation and to carry out necessary improvements and upgrades. Professor Katoh has already improved performance (increase of time between injections from 4 h to 6 h, initial beam current increase from 250 mA to 300 mA, a new in-vacuum undulator to replace the superconducting wiggler, etc.) and designed the new lattice to be implemented during the upgrade next year. The new undulator goes up to 120 eV on the first harmonic. As noted above, the new lattice will create four new short straight sections 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 will remain unchanged. At the same time, the lower emittance (27 nm-rad as opposed to 165 nm-rad) will be an important factor in obtaining high spectral resolution and high photon flux on the various monochromators installed on the undulator beam lines. Professor Katoh is doing an excellent job.

Alexander M. Bradshaw

Garching, November 2002

訳文

極端紫外光科学研究系および UVSOR 施設の評価 (2002 年 10 月 28 日, 29 日訪問)

宇理須恒雄教授

宇理須教授の興味は放射光によって誘起される表面反応機構, 半導体表面での赤外反射吸収分光のさらなる感度向上のためのいわゆる埋め込み金属層基板 (BML) 技術のさらなる発展および, その応用としての溶液からの表面への分子の自己組織化反応である。最初の分野は宇理須教授の1984 - 1992年のNTT LSI研究所での放射光エッチングとその応用の研究に端を発している。その研究における非常に重要な励起波長依存性の研究が近い将来計画されているが, そのためには, 大きなフォトンフラックスが得られるアンジュレータを利用できることが必要である。BML 技術は大変賢明な技術で最近この方法により Si 表面に吸着した水素および水分子のかなり良い S/N の振動スペクトルを得ることに成功した。現在研究中の独創的な新しい BML 基板の作成方法は幅広い新しい応用に広がるであろう。自己組織単分子膜の研究は, 将来の大きな可能性を秘めた人工細胞膜やバイオセンサー開発を含む広範囲なプロジェクトへの最初のステップである。

小杉信博教授

施設長として小杉教授は装置群をコンスタントに改良し続けることによってUVSOR施設の国際的評価を維持することに成功してきた。最近の最も目立つ例として2003年春に開始する施設の高度化がある。これは電子蓄積リングの周長を変えることなく、4つの新しい短直線部を作り出すもので、新しい直線部は挿入光源にも使うことができる。たとえ、UVSOR蓄積リングはいわゆる第3世代光源装置と競っていかねばならないにしても(第3世代光源装置では多数の直線部と高い光エネルギーが可能)、UVSORの改良、高度化は施設をさらに数年、有用な施設であることを保証するものになる。

小杉教授はまた、内殻準位と価電子準位の光イオン化過程の基礎を我々が理解することに大いに貢献している才能ある理論家でもある。それと同時に彼は高性能な装置群を利用して、光イオンや光電子の分光学に於ける新機軸の実験的研究に非常に大きく寄与している。繁政助教授との共同研究もそのひとつである。小杉教授の最近の貢献(まだ論文未発表)としては、交換相互作用とスピン軌道相互作用を持つイオウ $2p$ 領域の分子光電子スペクトルの *ab initio* 計算、スピン禁制価電子光イオン化の実験及び理論的研究、内殻準位でのリユードベリ状態への励起におけるいわゆるマトリックス効果の実験及び理論的研究が含まれている。

横山利彦教授

横山教授は東京大学(大学院理学系研究科)化学専攻からIMSに赴任したばかりである。東大では太田教授の研究室で講師、助教授として勤務していた。さらにその前には、ベルリン自由大学では、権威ある磁性薄膜グループ(Baberschke教授)の博士研究員の地位にあった。彼の東京での最も最近の研究は磁性薄膜における化学吸着誘起スピン再配列転移についてである。磁気円二色性を用いて、例えば、Pd(111)上のCo薄膜、Cu(100)上のNi薄膜において、COの吸着により垂直磁化が観測される膜厚領域が広がることを示すことができている。もう一つのハイライトは分子磁性体に関してである。例えば、プルシアンブルー誘導体における相転移や光誘起スピン転移をEXAFSとX線吸収端構造分光法により研究している。以前の彼の研究はPhoton Factoryに中心がおかれており、そこで彼は装置開発においても大きな貢献をしてきた。将来的には、横山教授は、彼の研究計画を、UVSORを十分に利用することで遂行できると期待できる。彼は来るべき数年において間違いなく非常に重要な貢献をするだろう。

見附孝一郎助教授

見附助教授は放射光とレーザーの両光源技術を用いて光イオン化と光解離の研究を行っており、説得力のある業績をこれまで上げている。どの実験も注意深く考え抜かれ、手際良くなされ、そしてその内のいくつかは類例の無いユニークなものである。一例として放射光イオン化で解離したフラグメントのレーザー分光を上げることができ、 N_2 または N_2O から生成する N_2^+ もしくは CH_3CN から生成するCNの内部状態をレーザー誘起蛍光法で観測している。また、 H_2O の放射光解離で生じた H^+ 、 OH^+ 、 OH 等を伝統的な蛍光分光法で検出している。最近では、同じく放射光とレーザーの併用を意図して、直線偏光した放射光で第一イオン化ポテンシャルよりも低い励起状態にある偏極したArリユードベリ原子を生成し、それをレーザーイオン化するという研究を行った。さらに、硫黄を含む分子の光電子エネルギーに依存した光電子スペクトルを価電子励起領域において測定し(いわゆる2次元光電子分光法)、超励起状態の自動イオン化や中性解離に関して洞察を深めている。以上の研究はすべて非常にすぐれたものである。

繁政英治助教授

国際協力研究を継続的に成功させつつ、更に自身の研究室においても優れた研究成果を生み出すことは容易ではない。しかしながら、繁政助教授はそれに非常に上手く成功しているように思われる。最近、彼は Orsay と Nevada 大学の研究グループとの共著で、二つの極めて重要な論文を発表した。その内の一つは恐らくは最高水準のものである(「空間に固定された分子からの非双極子的な光電子角度分布」, *Physical Review Letters*, 2002年7月)。繁政助教授は、かつて柳下教授(物構研)と共に空間固定分子に関する先駆的な仕事に従事していた。UVSOR において最近行われた単純ではあるがエキサイティングな実験に窒素分子の $1s$ 内殻励起スペクトル(本質的には吸収スペクトル)の測定がある。放射光の電気ベクトルに対して異なる方向でイオンの生成スペクトルを測定することにより、理論的に予言されていた二電子励起状態を明確に同定すると共に、三電子励起状態に帰属されるスペクトル構造も見出した。繁政助教授は、軟X線蛍光との同時計測を行うことにより、衝突後(Post Collision Interaction)効果を除去した内殻しきい光電子スペクトルの測定を計画中である。これを実現するのは容易ではない(光子数が多くない!)が、極めてエキサイティングな実験となるだろう。

木村真一助教授

木村助教授は今年採用され、以前は神戸大学に勤務していた。彼の研究は、強相関係、特に希土類化合物、有機超伝導体、クラスレートの光学・磁気光学的性質、電子バンド構造を含んでいる。彼は放射光の遠赤外装置、特に微小な試料や顕微分光のためのものを使っていた(また将来も使うであろう)。この目的のために、木村助教授は UVSOR に新しいビームラインを建設している。彼はまた、神戸の難波教授や特に重い電子系での先導者の1人であるドイツ・ドレスデンのステイグリッヒ教授との多くの共同研究を行っている。木村助教授は、横山教授の場合と同じように、UVSOR を十分に使うばかりでなくワールドクラスの仕事を研究系の重要な人物になるであろう。

加藤政博助教授

シンクロトロン放射光源には優れた加速器の専門家が必要である。それは光源加速器を建設するためだけではない。光源性能を維持し、また必要な改良、高度化を行うためである。加藤助教授は既に光源加速器の性能向上を実現している(入射間隔を4時間から6時間へ延長、蓄積電流値を250 mA から300 mA へ増強、超伝導ウィングの真空封止型アンジュレータへの置き換えなど)。また、来年予定されている光源の高度化改造へ向けた新しいラティスの設計も行った。新しいアンジュレータは一次光が120 eV まで達するものである。上で述べたように新しいラティスでは4つの短い直線部が創出される。これは既設の四極や六極電磁石を、その両方の機能を併せ持つ複合機能型の電磁石で置き換えることで実現される。偏向電磁石には手を加えない。高度化で実現される低エミッタンス化(現在の165 nm-rad に対して27 nm-rad)はアンジュレータビームラインに設置される様々なモノクロメータにおいて高分解能・高光束密度をもたらす重要な要因になる。加藤助教授は優れた業績をあげつつある。

アレキサンダー エム. ブラッドショウ
ガーシング, 2002年11月

4-6 錯体化学実験施設

国内評価委員会開催日：平成14年12月9日～10日

委員 中村 晃（阪大，名誉教授）
佐々木陽一（北大理，教授）
田中 晃二（分子研，教授）
魚住 泰広（分子研，教授）
オブザーバ 川口 博之（分子研，助教授）
永田 央（分子研，助教授）

4-6-1 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理論，測定研究者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) 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プ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，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科学省の研究所こそ，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科学省が中心になり育てるべきであると思われる。

4-6-2 国内委員の意見書

委員 A

化学の現状と錯体化学分野の役割

当評価委員の感じている最近の進歩として巨大分子に関する精密な情報が容易に得られるようになった事が挙げら

れる。この一例として錯体化学分野から見ると空中窒素を固定する巨大タンパク質の中で複雑な化学構造を持つ鉄モリブデン蛋白の構造解析が代表的と言える。この蛋白中の活性部位には独特の金属クラスターが存在していることは約10年前にX線解析によって見いだされたが、最近の研究によると鉄モリブデンクラスターの中心にこれまで「存在しないとされていた窒素原子」があってそのため従来三配位とされてきた三個の鉄イオンは全て四配位であることが判明したのである。また、このクラスターの近くに存在するPクラスター(8Fe構造)の立体構造も興味深く訂正されている。これらの発見は精密な構造決定が巨大分子では特に必要であることを示している。

一方、日本の化学界では三年連続のノーベル賞によって国際的なレベルの高さがマスコミにも良く認められたがその内容は15~20年前に独特の「ものづくり」に成功したものであり現在の若い研究者の状態を見ると、単なる楽観は出来ない。つまり中国を中心とするアジア諸国での急激な追い上げによってこのような日本の優勢が覆される恐れがあるからである。

海外では一般に無機化学研究は大きな領域を占めて居り、錯体や生物無機のほか有機金属も包含して多くの若い研究者が活躍している。我が国では有機化学の研究人口が大きく、中でも天然物や高分子の合成は研究が盛んであり従来有機化学の分野が広がっていた。然し、最近では触媒として数多くの金属錯体が用いられこれまでにない高い活性と選択性が実現されており、とくにオレフィン重合のために世界中で新しい錯体触媒が合成され、同時に錯体反応の基礎研究も盛んになってきている。また、電磁機能をめざした錯体合成も多種の元素を用いる巨大な共役分子の設計と合成がトレンドになっている。このように化学サイドからの「積み上げによるナノサイズ分子の合成」は、錯体の持つ特性を利用できるので他の方法より有利であり、この点分子研でのナノセンターの設立はすでにその傾向を素早く取り入れている。結局、物性研究の対象として各種の錯体が用いられる傾向は益々急となり、「共役系を持つ錯体」の重要性は大きく、この領域の研究は今後も世界的なスケールで継続するものと思われる。

分子研への提言

国立研として国家的な緊急の課題に有能な人材を集め効率良く先端研究を行う必要があり、先進国としてこの点責務がある。これまで海外ではドイツのMPIやフランスのCNRSなどがこのような研究を行ってきたがEUの確立により以前ほどの責任がなくなって来ている。また、アメリカでは各州が州立大学を拡充して研究活動を高めている。中国などアジア諸国でも産業育成のため基礎研究にも力を入れつつあって日本としてこれらの中心としての立場を守らねばならない。然し、この10年の経済低迷により企業での研究が低調となり大学などでも産学協同が国是となる一方、独法化により研究の重点化・効率化が進行している。各地に新たな研究センターを作る動きもあり岡崎機構に従来のような占有を許さない状況にある。実際、大型機器利用として全国的に共同研究を行ってきた体制に問題が出て来ている。従って、更に大型の器機を導入してこれまでの路線を強める方策が考えられる。具体的には950 MHz NMRがあげられる。また、このようなハード面だけでなくソフト面(例えば化学合成法など)で全国の中心となる案もあるが、これには技術セミナーなどをくり返すような方策が考えられる。

私案を示すと日本でも技術の伝承が難しくなりつつある現在、化学での先端技術(特に測定機器、合成法)をまとめ、共同した新たな中心として将来に伸びる組織を作することを提案したい。分子研の現状の化学合成法のすばらしさを見るとこの方向にもっと進んで行く事が良いと思われる。

日本の先端技術はいろいろな政府支援の研究(戦略研究など)によってこの五年ほどでかなり蓄積しているが、大学などに分散しているのでこのままでは報告は残るが実際の実験装置などは消える心配がある。また、化合物のライブラリーを残すことも「ものづくり」のためには必要である。

個別評価

田中グループ

炭酸ガス還元の前触媒開発のため以前から行って来た Ru 錯体の研究は CREST の支援もあり最近急激に発展している。大きな環状共役系アニオン性キレート配位子（ジアルキルカテコラト）を用いた場合、Ru 上の酸素配位子が配位子間の共役によって安定化して、ラジカル配位子として存在することなど酸化還元触媒作用に重要な新しい事実を見出ししている。現在良いグループが出来ていて今後の研究が大いに期待できる。

川口グループ

ようやく適正サイズのグループが出来て、得意とする前周期遷移金属の新型錯体を大量に合成する状態に成長している。特にアニオン性三座配位子となる嵩高いトリフェノキシ錯体について低原子価 Nb の独特の作用による「小分子活性化」を見出ししている。また、硫黄が配位した新しい Co クラスターなども合成していて広い錯体の領域に進出しようとしている。錯体の触媒作用と関連の深い新しい構造や結合が見つかることを期待できる。

魚住グループ

環境を汚さない合成反応として水中で選択性良く作用するポリマーサポート Pd 錯体を巧みに合成し数多くの有機合成に応用し、すばらしい成果を得ている。錯体の機能を十分に引き出した所が実に鮮やかである。すでに、この方面では国際的にも有名になっており報告も多い。また、各方面より資金を集めており盛んに若い研究者を採用して急速におおきなグループへと成長しているのは注目に値する。

永田グループ

生化学での重要な機能を示すポルフィリン錯体の光反応を利用して、触媒的光酸化反応を開発している。これには生化学的な反応から進んでさらに新しい機能を見出す大きな目的が込められている。光りの作用で生じる三重項ラジカルを中間体とする機構はやはり広がった共役系の存在によるもので、今後いろいろな方面に適用できると思われる。

委員 B

全般的な問題：

分子科学研究所の錯体化学実験施設は、少なくとも我が国の錯体化学者には錯体化学研究所設立へ向けての第一ステップと位置付けられ、その実現に向けて同施設を中心として大きな努力が続けられてきた。その目標の達成が厳しくなった今、錯体化学実験施設はその存在意義をどう位置付けるか、きっちりした認識を持つ必要がある。その意味で、今錯体化学実験施設は大きな曲り角にあると認識する。このような歴史を背負った錯体化学実験施設のこれまでのあり方には、様々の評価があろう。しかし、ここで過去の評価を議論するのはあまり建設的ではない。建物の移転も含めたこれからの数年の錯体化学実験施設のあり方が、錯体化学実験施設を巡る 2 つの重要な視点、すなわち、分子科学研究所内での錯体化学実験施設の位置付け、錯体化学会と錯体化学実験施設との関係をポジティブな方向に進めてゆくために極めて重要になってくると思われる。錯体化学実験施設は、新設の分子スケールナノサイエンスセンターへ定員を割く形と、みかけ上、その規模が縮小される状態となった。しかし、分子スケールナノサイエンスセンターにおける研究課題の重要部分には錯体化学が深く関与するはずであり、錯体化学実験施設の発展的な改編の姿と

いう観点から前向きに捉えておくべきであろう。この意味で、錯体化学実験施設は今後とも、分子スケールナノサイエンスセンターとの密接な連携のもとに研究を進めてゆくべきであろう。

各研究者の研究評価：

田中教授のグループは、独自の高い目標を見据えたエネルギー変換系の確立に向けた研究を進めており、その独創性と研究の進展ぶりは極めて高く評価出来る。今の研究体制は、目標達成へ向けての高いレベルの研究展開を期待させるに十分である。しかし、研究体制が人的支援の面で整った点には、つい最近の田中教授の努力による外部資金の獲得の効果が大きい。文部科学省直轄研究所のあり方、分子研全体の方針等外からの研究支援体制、田中教授自身の研究支援者の確保への努力とその限界等、この研究組織が整う前までのこのグループの歩みには、研究体制確立の上で考えさせられる点が多かった。川口助教授のグループの短期間で合成展開には感心させられた。今は、新化合物開発を大展開中のように見受けられるが、今後はその機能性や物理化学的な性質などその付加価値を高める方向にも研究を展開してほしい。

魚住教授のグループも外的資金に支えられた高いレベルの研究を順調に進めていると見受けられた。短期間に研究体制を整えて、順調に研究を進めている点は高く評価出来る。錯体触媒を用いた有機合成には大きな将来性が感じられる。魚住教授の研究領域は、錯体化学会会員の中にはあまり馴染みでないと感ずる人も多いであろう。しかし、錯体化学の広がり大きく寄与出来る分野であることは確かであり、錯体化学会全体からの支援が得られるような努力をされるように期待したい。永田助教授のグループの光エネルギー変換系の研究は、世界的に競争の激しい分野である。この領域はアイデアと合成の力の勝負である。現在ブレークスルーに向けて奮闘中と見受けられたが、永田グループからの画期的な成果の世界へ向けての発信に期待したい。

人事のあり方：

錯体化学実験施設の教官の全国の大学との人事交流は極めて活発で、分子研全体でも際立っていると聞く。これには、人事委員会に外部から専門領域の研究者が参加していることの効果が大いと思われる。錯体化学実験施設のような人事委員会の構成は今後も維持してゆくべきである。加えて、分子研内だけでは近い研究領域の研究者が限られている分子スケールナノサイエンスセンターの人事にもこの制度を適用してゆくことが強く望まれる。

錯体化学実験施設と、分子科学研究所の物理化学研究グループとの関係について：

今、物理化学の発展は、かなり複雑な物質系への展開を可能とし、およそ手に入る物質ならどんなものでも研究対象として取り上げられるようになってきた。逆にいうと取り上げる物質自体の選択が、物理化学研究の価値につながる時代と言えよう。したがって、物理化学と合成化学はタイアップして研究を進めることが、レベルの高い研究を進めるのに、欠かせないアプローチとなってきている。分子科学研究所は、所内に合成を主体とした研究グループを持っているということで、そのメリットは極めて大きい。しかし、錯体化学実験施設、および分子スケールナノサイエンスセンターの錯体関係グループの研究からは、そのような積極的な共同研究体制は確立しているようには見えなかったし、今後とも積極的に共同研究を推進するという方針は感じられなかった。物理化学者の要請に応えるという形で共同研究を期待しているのではなく、分子科学者の現在の視点を理解し、これを将来的に先取りするような努力が期待される。自ら開発した物質の物理化学的な意義を主張し、売り込むような努力が物理化学的立場からみても新し

い画期的な領域の開発につながるような気がしてならない。分子研の中での存在意義を一層高めるためにもそのような努力をされることを期待したい。

その他の問題：

流動部門の制度は、全国の錯体化学者と錯体施設とを結び付ける重要な役割を果たしてきたと思われる。学生の出入りなどもこの制度を通してある程度活発であり、対外的な影響力を持つ効果も無視出来なかった。この制度が停止したことはその意味で残念であるが、全国の大学の現状からみると、無理がかかっていた点は否定出来ず、やむを得ない処置であろう。しかし、その分だけ施設の専任教員の全国の大学等に向けての積極的な働きかけが重要となってきたことも事実である。錯体化学実験施設運営委員会は、最近ほとんど開催されていないと聞く。運営委員会は、実際の錯体化学実験施設の運営に関する事柄の審議の他にも、錯体化学者の声を分子研側に伝える重要な役割も果たせるはずである。運営委員会の前向きな活用を期待したい。影響力が薄まったとは言っても、錯体化学実験施設は依然として全国の錯体化学者に対しては独特の存在感がある。この存在感を生かした毎年ないしは隔年の定期的な国際シンポジウムを定着させるのはどうだろうか？ 岡崎コンファレンスは、毎回テーマを変えた形で行われるが、これとは別に錯体化学を主体としたシンポジウムを設け、定期的に全国の錯体化学者を海外からの招待者とともに集めるようにし、研究動向を先取りしたようなテーマ設定をすることにより、錯体化学者に対する一つの大きな求心力として育てて来よう。このような定期的シンポジウムは大学では実現が難しく、分子研のような研究所が主体となって実現してほしい。

4-7 分子スケールナノサイエンスセンター（流動研究部門）

国内評価委員会開催日：平成14年12月16日

委員 伊吹 紀男（京都教育大理，教授）
笠井 俊夫（阪大院理，教授）
石田 俊正（分子研，助教授）
藤原 昌夫（分子研，助手）
大庭 亨（分子研，助手）
奥平 幸司（分子研，助教授）
久保園芳博（分子研，助手）
西 信之（分子研，教授）
宇理須恒雄（分子研，教授）
オブザーバ 茅 幸二（分子研，所長）

4-7-1 点検評価国内委員会の報告

以下の項目について討論を行った。

- 1) 分子研で平成9年11月に一度流動部門の点検評価を行った。このときの討論内容を参考に，再度流動部門制度の良い点，問題点について。
- 2) 九州大学有機化学基礎研究センターの点検評価結果についての感想。
- 3) 流動部門は廃止すべきか存続すべきか。
- 4) どのように制度改革をしたら良いか
*具体的に挙げられた問題それぞれについて解決策を議論。
- 5) 客員研究員制度案について。
- 6) その他の意見。

討論内容

討論にはいるまえに，平成9年の点検評価結果（分子研リポート97）および，九州大学有機化学基礎研究センターの点検評価結果のサマリーについて宇理須教授より資料として配付。

所内委員J：3年に一度点検評価をやっている。流動部門は大学には好まれていないようだが，流動した教官には良い評価を受けている制度のようだ。分子研は来年度までは決まっているが，法人化の年である平成16年度は一旦休止する予定である。全国共同利用研究所として流動部門制度は重要な制度であると考えているが，実施するにあたっては，色々困難な問題もあり皆様のご意見を伺いたい。

所外委員A：流動制度が発足して15～6年になる，その間で分子研から見た流動の長所，短所はどのようなですか。

所内委員H：分子研は全国共同利用研究所である。流動があることにより，人的流動の促進，共同研究の機会の増大，情報の共有などメリットが多い。また，分子研に分野的に欠けている部分を補いその分野を発展させるという機能もある。

所内委員J：流動で滞在中に成果をあげなくても，流動元に戻って何年かたって成果が実を結んでくれれば大成功と

思っている。このような種をまくというような機能は共同利用研究所の重要な役目の一つと考える。また、所外の人に分子研を理解してもらおうといううえでも流動は機能していると思う。

所内委員 I：私は大学での研究経験がないが、流動部門の教官の人たちとの交流を通して、分子研とは異なった大学の組織や教育研究の体制を知る良い機会となっている。分子研にとってのデメリットは何でしょうか？

所外委員 A：流動教官を捜すのが大変で多くの時間を割かなくてはいけないことでしょうか？

所内委員 J：流動元の大学を説得するのが大変だ。

所内委員 I：平成15、16年度の流動教官については、学科長や流動教官の上司が茅先生が良くご存じの方々であったため、驚くほどスムーズに話しがまとまった。本当はこのようにつながりを頼りにしなければならないのは良くないのであるが。

所外委員 B：平成16年からは実定員が決まるので、大学側は教官を流動で出すことを極度に嫌うと思われる。流動を執行することは極めて困難となることが予測されます。

所内委員 J：16年度は無理と判断し、この年度については一旦休止の方針です。

所外委員 B：流動は良い事であるが、続けるのは非常に困難と思われる。新しいシステムを考案する必要があるように思う。

所外委員 A：平成9年度の点検・評価を見ると、流動の問題点、デメリットとしてあげられている点については、“ないものねだり”というべき内容のものもある。流動にはもともとリスクがある。リスクを負っても来たい人が来れば良く、分子研がリスクを負う必要は無いのではないか。デメリットの多くは個人で解決できる問題が多い。分子研として解決すべき問題点としては2点あると思う。一つは流動元の大学にたいし説得力のあるようにすること、もう一つは大学院生を連れて来やすくすることや、ポストクをつけることなどである。アンケートで助教授や助手は仕事が進んだと言っている人が多いが、裏返すと教授にとってはあまり意味が無いのではないかと思う。今後の流動では助教授と助手を中心としたシステムが有効であろう。

所内委員 J：流動元の大学に説得力のあるものとするのはかなり難しい。大学院生を連れてこられるときは特別共同利用研究員として受け入れ、年間一人あたり60万円ほどの補助を出している。ほぼアパートを借りるのに必要な額だ。教授は忙しすぎるので助教授や助手に重点をおいても良いかもしれない。

所内委員 I：その大学が大学院重点化を進めているときは特に教授にきてもらうのは大変だった。

所外委員 B：教授は実際には実験が出来ないので、助教授や助手を出すと仕事にならない。個人はよくても組織としては困ってしまうことがある。

所内委員 I：サバティカル制度とリンクできないか。

所外委員 B：エキストラの人がいないかぎりサバティカルは無理ではないか。COEは競争だから、COEになると成果をださなくてはならず、ますます人を出せなくなる。

所内委員 J：考え方の問題で、流動を経験すると良い評価が得られるようにするべきだ。現在は論文の数で評価される傾向にあるが、それではいけない。

所内委員 D：流動元をカバーするシステムが必要だ。

所外委員 B：米国などは移動する方が評価が高い。文化の違いだ。流動性が良い人ほど良い評価が得られると良い。

所外委員 A：システムとして評価されないといけない。たとえば、大学評価・学位授与機構の項目の1つに流動を受け入れたかどうかを入れて、制度としての評価があれば学長レベルでも説得をしやすい。また、説得す

るには過去の実績を活用することが重要である。

所外委員 B：流動が止まるとサイエンスが失速すると思われる。

所内委員 D：どうやって評価するのか。

所外委員 B：実績が重要だ。

所外委員 A：概算要求で流動部門を要求するのか。

所内委員 J：中期計画で要求する。法人化後は概算要求ではない。

所外委員 B：研究室の配属のときも問題が生ずる。流動の先生のところには学生が来にくい。若い人に流動してもらった方が良い。年をとると刺激ににぶくなる。分子研は国際的なもので若い人には良い。

所内委員 D：助手、助教授、教授はバラバラな方が良い。

所内委員 E：流動は非常に良い。お金と設備に恵まれ、デューティが無い。

所外委員 B：単位の互換をやると、文部科学省は任務の放棄とする。

所内委員 H：博士後期は問題ない。前期は単位が多いので大変。前期をすべて分子研でとるのは大変だし、分野が専門的すぎる可能性が高く、その学生にとって不利益かもしれない。

所内委員 G：学生には集中講義を受けてもらっている。すべてのデメリットはお金で解決する。流動の教官を研究テーマのプロポーザルを評価して決めてはどうか。分子スケールナノサイエンスセンターの中期目標にあう申請を出す方式が良いのでは。

所外委員 B：プロジェクト的な研究になってしまう。それでは長期的な研究はできない。

所内委員 D：しかし、研究所はある程度のスクラップアンドビルトが必要なのではないか。

所内委員 J：若い人はやりたいことをやりそこから新しいサイエンスを生み出して欲しい。日本は文化として伝統的なサイエンスに従事しがちであるが、若い人については、新しいサイエンスを作る人を育ててゆきたい。公募をすることは良いが、一年でできるようなプロポーザルを出して欲しくはない。何とか新しいサイエンスを立ち上げて欲しい。

所外委員 B：論文は3報以上出さないなどと制限するのはどうか。

所内委員 D：実際問題論文を多く書かないといけない。

所外委員 B：公募の裏話しでは、論文数でスクリーニングされるということもある。

所内委員 D：流動は短期なのでプロジェクト的で良いのでは。

所内委員 J：装置を新しく作った場合、一年二年ではできない。

所外委員 B：研究所では長期の目的が必要。プロジェクト的になるべきではない。

所内委員 J：日本全体がプロジェクト指向になっているのに不安を覚える。

所内委員 J：アメリカはチャレンジ精神を尊重するが、日本は体質的に保守的。

所内委員 D：アメリカ人でも、あまりの競争社会のため、ストレスを感じている人が多い。

所内委員 J：流動部門を短期のプロジェクト的にするつもりはない。しかし、公募という方式は良いかもしれない。

所内委員 F：この分子研の流動制度は知られていない。千葉大でもあまり知られていない。

所内委員 D：公募して人が集まらなければ止めればよいのでは。

所外委員 A：今までの流動の形は閉じて、公募も含めて新しいシステムの流動にすると良いのでは。

所内委員 H：最初2年流動で後の2年客員なら人が来る。分子研の中には反対する人が多いが、分子スケールナノサイエンスセンターのような目的がはっきりしているときは良いのではないか。

所内委員 J：客員は制度が中途半端なところがある。客員で研究成果をあげるのは大変だ。

休憩

所内委員 I：後半は、どのような制度にしていったらよいか具体的な提案をしていただけませんか。

所内委員 C：部門の構成を緩和して、助教授 2 助手 2 とかにできないか。流動元が流動を促進できるように流動を評価してもらうように、例えば、お金を手当するとか、あるいは、大学評価・学位授与機構や文部科学省に、流動の実績を大学評価の一つに考えていただくなどのことはできないか。

所内委員 F：教授の先生は、大学では大講座制なので、呼ぶのは大変だろう。公立、私立からの流動が可能にならないのはなぜか。

所内委員 J：ポストを動かせないのだからできない。客員であればできる。

所内委員 G：アイデア公募型の流動ポストはどうか。例えば、地方の優秀な方を分子研に呼んで、良い研究環境で研究してもらうことが出来るのではないか。

所内委員 J：科学は実績主義だが、アイデア指向で選考してはどうか。

所内委員 H：科研費は実績主義になっている。

所内委員 I：分子研ではアイデアの評価ができる可能性があるのではないか。

所内委員 J：分子研は実績主義でないものにしたい。

所内委員 D：2 部門中どちらかでも公募制にしてはどうか。プロジェクト的にするか長期的なものにするかは公募要項に明記するようにしたらよい。

所外委員 B：独立行政法人になるとこれまでの流動を実施するのは不可能なのでは無いか。しかし、研究所の交流は必要なので、「双方向の流動」ができないか。併任ではなく、兼任教官制度はできないか。

所内委員 J：兼任では意味が無いのでは無いか。

所内委員 H：兼任は組織の内部なら可能だが、外の組織からはできない。

所内委員 I：客員なら良いのでは。

所内委員 H：生理研では 5 年間の客員がある。

所外委員 A：流動で出るときのバリアは流動元がマイナスの影響を受けることだ。分子研で非常勤講師を雇い流動元の講義をカバー出来るとバリアは下がると思う。

所外委員 B：分子研だけががんばっても流動元は否定的だろう。COE が特に問題だ。COE になると外にでれない。学内でも競争だ。

所内委員 H：流動に決まったらメンバーから外されるのでは。

所外委員 B：大学では COE が走っていると流動に人を出せない。兼任なら COE と分子研の実績になる。しかし、兼任は内部のみなので分子研との兼任は出来ない。

所内委員 J：法人化が始まる平成 16 年度は無理だ。

所外委員 B：定員は埋めないと削られるので人を埋めている。流動であけると定員を削られるのでは無いか。

所内委員 E：流動をオープンにし、COE が関係ないような小さな大学からでも来れるようなシステムが欲しい。失敗を評価するようなシステムが欲しい。

所内委員 H：流動のシステムの見直しを行う必要があるという意見が多い。ただし、流動の資金が止められたので問題が生じている。

所内委員 J：色々な予算があるが流動の資金自体がなくなるので難しい。UVSOR 運営資金も分子スケールナノサイエ

ンスセンターの資金も厳しくなるだろう。流動の資金を捻出するのは難しい。中期目標が通るかどうかに
よる。

所内委員H：大学の方では概算要求しなくて良くなる。中期計画に書いてないからという理由ではねられる可能性が
ある。

所内委員J：若い人にオープンにして、分子研で良い装置を作り良い実験をして、装置を持って帰れるようなシステ
ムを共同利用研究所として維持したい。しかし、たまに悲観的になる。法人化後は文科省の仲介がなく
なるわけで、交渉は今より難しくなる可能性がある。大学ごとに対応が異なると予測される。

なお、本討論ののち、後日、外部評価委員より、下記のコメントをいただきました。

4-7-2 国内委員の意見書

委員A

(1) 前回（平成9年11月）の「点検評価と課題」の特徴として下記のことがあると思う。

- ・流動経験者は基本的に流動部門制度を積極的に評価しており、その内容の10項目（p.188）は教授、助教授、助手と
も一致している。
- ・流動経験の結果として「研究活動が大いに進展した」「進展した」という評価は助手・助教授が多い。
- ・問題として列挙されている24項目（p.190-191）の中には当事者が解決できるあるいはしなければならぬものが
かなり多く含まれている（「無いものねだり」的な要素がある）。これらの内、個人的に解決できない課題は、流動元大
学が出さなければならない減員概算要求に対する本能的な拒否反応であろう。（これ以外に同行する大学院生の経済
的な負担の問題があるが、現在は大きく改善されているとのことである）。

(2) 流動部門の歴史的な経過と法人化の可能性を考慮したとき、流動部門制を存続するとすれば次の点を考慮するこ
とが必要であると考えます。

- a) 分子科学を発展させるためには、共同利用研究が重要であることを広く知らせる努力をする。
- b) 流動教官およびその研究課題について、公募も含めて広く認知されるシステムを構築する必要がある。なお、こ
こでいう「公募」では、プロジェクト研究であるかどうかを必ずしも必要条件としない。
- c) 前回の「点検評価と課題」に基づけば、教授の流動を排除するものではないが、流動教官としては助教授と助手が
望ましい。
- d) 流動元大学の拒否反応を低減するために、たとえば、分子研が費用負担をする非常勤教官の派遣の可能性などを検
討することは必須である。

委員B

分子科学研究所が主導する流動研究部門制度は、今日まで多くの流動研究者と受け入れ側である分子研研究者の双
方に対して、創造的研究・若手研究者育成を進める上で、非常に新鮮で有意義なインパクトを与えてきた。このこ
とは自然科学研究を遂行するには、人的交流に基づく多様性のある視点がいかに大切であることを示すものである。

一方、現行の流動研究部門制度は流動元の大学から流動先の分子研への教官ポスト移籍という概算要求の手続きを
踏まなければならない複雑さの上に成り立っている。平成16年度から開始される大学・国立研究所等の法人化という
時代背景を勘案すると現行のままの流動研究部門制度の継続は、極めて困難であろう。

従って、上記の相反する要件を満足させる新たな流動研究部門制度の一刻も早い構築が望まれる。その一案は、現

行の分子研客員研究部門制度の利点を生かし欠点を改訂することによる客員制度の活性化ではないであろうか。すなわち、2年以上の比較的長期に渡り客員研究者が分子研において実質的に研究を行うことである。その際、客員研究者が単独または分子研研究者と共同で研究が推進できるだけの十分な研究費・旅費と研究環境の提供が必要であろう。加えて、客員研究者が所属する大学の学生・共同研究者も客員期間中に分子研で断続的に往来して研究に参画できるような幅のある運営が望ましいであろう。

どのような形態であれ、研究者の交流を促進する制度を設けて流動研究部門制度の精神を継続させることは、将来に亘る分子研の創造的研究推進に不可欠であると考ええる。