

4．点検評価と課題

4-1 電子構造研究系

国内評価委員会開催日：平成17年12月28日

委員 山内 薫（東大院理，教授）
福村 裕史（東北大院理，教授）
西 信之（分子研，教授）
大森 賢治（分子研，教授）
大島 康裕（分子研，教授）

オブザーバ 中村 宏樹（分子研，所長）

国外評価委員面接日：平成18年3月6日～7日

委員 A. Welford Castleman, Jr.（Professor, Pennsylvania State University）

4-1-1 点検評価国内委員会の報告

電子構造研究系の構成員は、現在、基礎電子化学研究部門に西 信之教授、電子状態動力学研究部門に大森賢治教授、大島康裕教授の3名である。この3名に対して、国内委員2名と外国人評価委員1名が系の評価にあたった。

所外委員との全体討論

所 長：19年度からを目途とした分子研の組織再編を考えている。全体を4領域に大きく分け、各領域に施設を割り振るような組織となるだろう。現在、43研究グループがあるが、この規模をグループ数で保つか、グループ内の構成を少し増やし、グループ数を減らすかを考慮中である。分子研としては、現在は、大学から大学院生が入りにくい状況にあると判断している。外国からの人材の導入も含めて検討すべきであろう。

所外委員A：今日の報告では、3名の教授から大変レベルの高い話を聞くことができた。西教授の研究の内容は予想を超えていた。まとまった話を聞くと、思想や流れがよくわかる。大森教授の内容は、大変ファインな研究であり、量子情報の制御、干渉など大変面白い内容を含んでいる。ここまで判っており、ここが大事である、ここが面白いということを更にアピールする工夫がもっと必要であろう。固体の系に入るのも面白いが、困難な問題もあるだろう。大島教授の研究は、高分解能分光と超高速レーザーを組み合わせた興味深いものである。東北大学の三上研究室の研究内容と大変似ているという印象を持った。知の最前線で新しい研究分野を開拓するという認識を更に強めてもらいたい。分子間ポテンシャル等を正確に求めることは重要であり、溶液等の研究にも広まるだろう。

所外委員B：西教授の研究は、新しい材料を提供するのではと期待される。大森教授は若手のホープであり、干渉効果をうまく使った独創的な研究を行っている。気体のみならず、固体のパラ水素の研究は面白い。量子力学の基礎となることに、観測の問題を取り入れて考えている。大島教授は、量子状態の分布として回転の問題を捉えている。分光学としては古い問題と思われやすいので、波及効果を考えて訴える必要があるのではないか。分子間ポテンシャルの決定という仕事に多くの人への説得力を増す努力をされる必要があるだろう。全体的に、大変高いレベルの仕事が行われているという印象を持った。

今回の評価は研究内容についての評価が主体であり，組織等に関しては現在再編作業が進行中であることと，その中で電子構造研究系が物質科学系と光分子科学系の2領域に別れることに関しても，所内所外の各委員の納得が得られた。以下に所外委員からの評価文を載せる。

4-1-2 国内委員の意見書

委員 A

電子構造研究系に所属する西グループ，大森グループ，大島グループの研究活動は，総体として極めて高いレベルにあると評価できる。以下，項目別に評価結果を示す。

研究分野における役割と位置付け

分子科学研究所の役割は分子科学の分野において世界を先導する研究を行い，国際社会に向けて成果を発信し，人類の知の地平を拡げて文化的貢献を行うことと考えられる。電子構造研究分野においては，これまで良く知られている分子系については，その基礎的知見は十分に明らかにされており，新しい物質系の探索とその物性の解明へと研究の方向は進みつつある。西グループの研究の一部である炭素 - 金属ハイブリッドナノ構造体の研究はこのような方向性を持ったものと位置づけることができる。一方，簡単な分子系を用いる場合には，現象自体が未解明の問題に挑むことになる。大森グループと大島グループの取組んでいる可干渉フェムト秒パルス光による分子の電子状態と振動状態の位相制御は，このような方向性を持ったものとして位置づけることができる。いずれの方向においても，これらのグループの目指しているものは世界を先導する成果につながっている。

研究内容と研究者の評価

西グループの研究において特筆すべきは，金属と炭素を含む新しい構造を有する物質系の開拓である。特にナノ物質の磁性は大変ホットな分野であり，世界的にも注目を集めうる成果と考えられる。透過型電子顕微鏡などの分析機器を用いて行う研究スタイルは物質科学の方向に少し傾き過ぎているかもしれないが，電子構造研究の視点は一貫しており，今後も確実な発展が期待できる。このグループは同時に，液体中における局所クラスター構造についても非常に基礎的な研究を行ってきており，従来の教科書を書きかえるほどの成果をあげつつある。研究レベルは極めて高い。

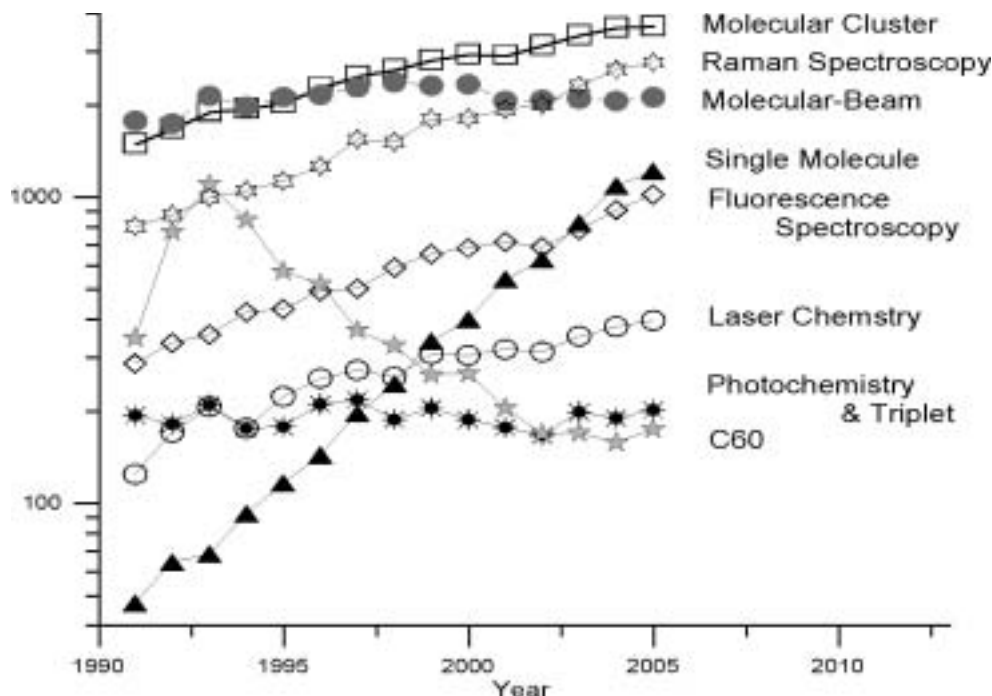
大森グループは，東北大学で行っていた研究をさらに精緻に行える実験系を組上げ，フェムト秒光位相制御の実験的な極限にまで辿りついている。その研究成果は，*Science* 誌および *Phys. Rev. Lett.* 誌に受理されており，分子線中の分子波束の制御と観測の技術はまぎれも無く世界トップレベルにある。今後，固体を試料として研究を行うという方向には幾多の困難が予想されるが，十分な実力があるものと期待できる。量子コンピューターへと発展させる試みは興味深い，用いる分子系の個性に応じた特徴が出せれば，電子構造研究の一分野として開花する可能性もある。但し，「量子論の検証」というとき，その目指すところをわかりやすく説明する必要性が感じられた。

大島グループはスタートしてから間も無いが，干渉計測法あるいは時間分解蛍光ディップ法などを用いて分子の内部回転波束を観測するなどの成果をあげつつある。ベンゼン - 水のクラスターを用いた分子間相互作用ポテンシャルの精密測定なども一定の評価ができる。研究者のポテンシャルは十分に高く，研究を進めていけば新たな発展があるものと期待される。但し，既におおまかに明らかになっていることをより細かく定量的にしていくという研究は，質的發展を伴わないことが多いことを忘れないよう研究の方向を見守る必要があろう。現時点での評価は早すぎると判断した。

研究分野の重要度

量子力学は写真定着技術に支えられた分光學にその実験的手法の起源があり、熱力学も蒸気機関のエネルギー効率の理解に源がある。新しい技術の誕生とともに物理化学は様相を変えてきた。技術は、ある時は研究対象そのものであり、また研究手法の革新によって見えなかったものが見えてくるという貢献もある。フェムト秒レーザーを用いた分子位相制御の研究はこの流れの中にあるものと考えられ、現代の電子構造研究の中で重要な要素技術のひとつであろう。新しいナノ材料の科学は、物質合成法自体が新しい技術を伴うものであり、電子構造研究の中で極めて重要な分野である。

ここで、ISI Web of Knowledge を用いた特定分野の論文数の年次変化を調べた結果を紹介する。題名、キーワード、あるいはアブストラクトにそれぞれの単語を含む論文数の変化は下図に示す通りである。“Cluster”などの単語は、遺伝子、天文などの分野でも使われており注意深く排除してある。興味深いのは、1991年より2005年までの間に、Molecular Cluster、Raman Spectroscopy、Fluorescence Spectroscopy、Laser Chemistry などの分野で論文数はおよそ3倍に伸びている。一方、Molecular-Beam と Photochemistry & Triplet では、ほぼ横ばいである。「分子ビーム」の場合には毎年2000編の論文が出版されていることから研究層の厚さが見てとれるが、新たな応用の方向が開けていないためか、他の分野に比べて伸びが無い。「ラマン分光」や「蛍光分光」など、決して新しくない測定技術も「クラスター」や「レーザー化学」と同様に伸びているのは、生物科学、材料科学への応用展開がなされているためではないだろうか。C60は1993年にピークがあり衰退しているが、「単一分子」は急速に伸びている。ここには示さなかったが、「ナノ化学」も「単一分子」と同様に20～30倍の伸びである。以上のように、「クラスター」が重要な研究分野として伸びていくことは十分に予想できる。一方、分子ビームとしての研究はタンパクや核酸などの生物試料を用いるなど、工夫が必要になってくるであろう。



全体について

西信之教授，大森賢治教授，大島康裕教授から構成される電子構造研究系の研究グループは，それぞれ極めて独創性の高い研究を進めており，その研究は，質と量ともに世界をリードするものである。なかでも，西教授のグループの炭素と金属のハイブリッドナノ構造体の形成に関する研究，大森教授のグループにおけるアト秒エンジニアリングの展開，大島教授のグループの分光学と超短パルスを組み合わせた新しい研究手法の開拓には感銘を受けた。

西教授のグループについて

西教授のグループでは，物質の混合と分離に関する基本的なテーマを一貫して取り扱い，その根源を明らかにすべく研究を展開している。確固たるクラスター技術，分光技術，表面分析技術に裏打ちされた研究によって，新規物質系である炭素 - 金属混合ナノ構造体を発見し，その構造変化過程を明らかにした点は顕著な業績である。

エタノールと水，酢酸と水の系において，局所構造と溶解過程の関係を質量分析法とラマン分光によって解明した研究は，混合溶液系とはどのようなものであるかという基本にミクロスコピックな視点から明快な解釈を与えたものである。また，これまで信じられてきた酢酸二量体の幾何学的構造が実は正しくなく，ノンサイクリック型であることを突き止めたことは，全体の研究の流れから見れば枝葉の成果かも知れないが，溶液系のミクロスコピック構造に関する先入観に警鐘を鳴らすものであり，基本的かつ重要な成果である。

FeC_2 を基本構成要素とするナノクラスターの研究では，イオン結晶が，電荷移行を経ると同時に構造変形を起こし，その結果，グラファイト状のカーボン原子によって鉄のクラスターが囲まれる構造をとるという新規な現象を発見し，「炭素の皮に包まれた金属クラスター」という新物質システムの構築に成功した意義は大きい。この物質については，大きな保持力が見出されるなど，新しい素材の開発につながる可能性がある。

また，クラスター構造を出発点としたレーザー励起や加熱により金極ナノフィルムや，炭素皮膜をもつナノワイヤーを生成させるなど，機能性物質の合成に混合クラスターの持つ特徴を最大限に生かしている。これらの独創的な研究手法と成果は，これからの材料開発の先鞭であると同時に，物質創成に「混合系の自己組織化」を活用するという新概念を導入したものであり高く評価されるべきものである。

大森教授のグループについて

大森教授のグループでは，独自に開発したアト秒位相変調器を用い，2つの超短パルスレーザーの相対位相をアト秒の精度で制御することに成功したばかりか，それを用いて，分子内にコヒーレントな波束を用意し，アト秒精度でそれを制御した。これは，時間分解能を極限まで高め，量子干渉を利用して分子の核間距離をオングストローム以下の精度で制御したことに相当する。

大森教授は，その分子に書き込まれた量子位相を「情報」として意義づけ，気相の分子に量子情報を書き込むことに成功した。そして，これに留まることなく，この量子干渉を，デコヒーレンス過程を追跡するために利用し，固体パラ水素中における分子系のデコヒーレンスの研究を進めている。一連の仕事は，アト秒エンジニアリングという，分子科学を基礎とする新しいエンジニアリングの分野を切り開くものであると同時に，量子力学の基礎や観測の問題にも関わるものであり，高く評価されるべきものである。そして，今後のさらなる展開が期待できる。

大島教授のグループについて

大島教授のグループでは、フェムト秒レーザーと高分解能レーザーを組み合わせることにより、実時間領域の情報と周波数領域の情報から分子のダイナミクスを理解するという独自のアプローチを展開している。大島グループは、平成16年9月より発足した新しいグループであるが、すでに、分子研において新しい研究成果を挙げており、発足以来、研究室の立ち上げに全力を尽くしてきたことがうかがわれる。

相対位相をランダムに変調したパルス対を用いる干渉計測により、分子内のメチル基の内部回転に関するダイナミクスの情報を得るなど、興味深い結果が得られている。さらに、強光子場において分子が起こす非断熱過程を、その固有状態の分布の変化として捉えた研究は、強レーザー場で分子がいかに関転励起されるかという基本問題に、分光学の立場から明快な解答を与えるものであり、高く評価されるべき仕事である。

その他にも、原理的に新しい分光手法の開拓とともに分子のダイナミクスに関する理解を深める努力を進めており、将来の新分野の開拓につながるものと、これからの発展が大いに期待される。

4-1-3 国外委員の評価

原文

Report on the Department of Electronic Structure following a visit to IMS on 6/7 March 2006

Dear Director General H. Nakamura:

It has been a distinct pleasure to meet with them on March 6th to 8th, 2006, and discuss the work of the professors who serve as group heads in the Electronic Structure Department of the IMS. The department continues to be staffed by world class researchers, and the Department Head and Institute Director are to be congratulated for their success in maintaining high standards in retaining faculty and also in attracting and hiring new ones. Two relatively new hires (Professors Ohmori and Ohshima) have allowed the programs of the department to be broadened by undertaking some exciting new directions, one which is focused on a combination of quantum control problems and also the test of concepts at the boundary of classical-quantum theory. Professor Ohmori's recent accomplishments in the area of wave packet propagation, with two papers about to be published in *PRL* and *Science*, are especially noteworthy. These findings, including planned studies, are likely to have major impact on our fundamental understanding of ways to achieve quantum control, and also have the potential of providing answers to fundamental questions regarding the behavior of matter at the quantum level. Achievements in this area are likely to provide high visibility. Another new direction has been initiated in the department by Professor Ohshima, in the area of photochemistry. The novel concept is to employ wave packet control to influence molecular motion and hence chemical dynamics. Attaining the ability to photochemically effect molecular motions would be a major accomplishment and is a very promising avenue of research clearly worth pursuing. A second related activity involves determining intermolecular potentials, and a third, deducing the structure of clusters. The alignment of rotational states employing high intensity light fields is a promising area of endeavor as are studies to be devoted to obtaining the sensitivity needed for deducing structural properties of clusters through the use of STIRAP with high coherence allowing complete population transfer. Focusing on obtaining intermolecular potentials for a variety of molecular systems offers the promise of providing information that will be widely used by others who endeavor to calculate the structures of complex systems, especially those involving hydrogen bonding.

The continuing and expanding effort of the Department Head's own individual work is providing the basis for the cohesiveness of the program as it impacts on detailed understanding of phenomena and intermolecular interactions responsible for the properties of matter of nanoscale dimensions, including quantum effects and property changes with individual variations in the molecules/atoms comprising selected mixed systems. This area is likely to give rise to the discovery of new phenomena, and with its focus on materials and nanoscale science, can serve to unify many of the objectives of research underway in the various departments at the IMS.

It has been interesting for me to follow one of the threads that permeates throughout the work of the Department Head that has served to bridge the gaseous and condensed state. Through comprehensive work on mixed systems, the scientific findings have provided the scientific community with insights of unprecedented detail concerning bonding and in some cases the existence of cluster aggregates that retain their structure in the condensed phase, and hence influence the properties of the bulk systems. Particularly enlightening in this regard are studies of hydrogen bonded mixed systems involving alcohols, and organic acids with water. The new fundamental studies have unified understandings derived from cluster science, structural considerations, spectroscopic studies and thermochemistry, and the breadth derived from these findings will provide insights of value in many areas including biochemistry where hydrogen bonding is central to behavior, and will pave the way for future studies on more biologically relevant molecules. Equally valuable are studies focused on "soft-hard" and "hard" systems that relate to other aspects of nanoscale science.

During the visit I was informed that consideration is being given to reorganizing the departmental structure of IMS to one that might have as its focus, "Regions," perhaps with themes such as: Materials Molecular Science; Photo-molecular Science; Theoretical and Computational Molecular Science; and Bio and Coordination Compounds Molecular Science. This organizational structure would be in keeping with the current activities under way at IMS, and would alleviate the problems that presently exist where some departments are essentially sub-critical in size. In view of the broad interest throughout the world in the field of nanoscience, and the impressive center already existing at IMS, it will be necessary to retain such a unit title, even if the subject can be easily subsumed in the Region: Materials Molecular Science.

During the last day, an opportunity arose for me to tour the laboratories of six other professors, two of whom were available for discussions. Professor Kitagawa described a fascinating aspect of his research having to do with protein molecular recognition/sensing of small (diatomic) molecules such as CO, NO and O₂. Interesting discussions with Professor Matsumoto provided me the opportunity to learn about an important area of work pertaining to the photochemistry of adsorbates on metal surfaces which he is probing using ultrafast laser techniques. I was also very pleased to have had an opportunity to tour laboratories dealing with the interaction of light with gold nanoparticles, the synthesis of gold particles of specific atomic composition and the study of some of their reactive characteristics, a tour of the extremely impressive 920 MHz NMR facility, and one of the nanoscience laboratories where molecular systems are synthesized and subsequently characterized. Each of the research associates which gave me a tour of these other laboratories, did a splendid job in describing their work and its objectives. It is clear that IMS attracts outstanding individuals from many scientific fields as assistants, coworkers, and potential future leaders in science.

Another observation I wish to comment about concerns the facilities available at IMS for conducting forefront research, as well as the high quality research personnel who have such original and innovative ideas to pursue. These factors would seem to position IMS to be able to continue being one of the leaders in the world in conducting first class science. But this opportunity to stay at the fore is clearly going to be eroded by the budget situation, and concomitant understaffing. There is an urgent need to increase the number of both junior as well as senior scientists, as well as research associates and students. It is imperative that the government

redress this intolerable situation, before the situation of the Institute becomes irreversible. Furthermore, while it is admirable for individuals to interact with industry, and also for the institute to pass on scientific and technological findings that will stimulate new developments and hence help the nation's economy, first class science cannot be accomplished if the institute were to become an arm of industry, with the motivation for work prompted primarily by industry driven application based research. Care must be taken that such a situation does not arise.

As we both recognize, one of the greatest needs of IMS is to have more highly qualified personnel; especially significant would be the acquisition of a larger number of graduate students conducting their research under the direction of your scientific staff members. I was pleased to learn that the present situation of having too few students may be partially alleviated through a new JSPS program for students from Asian countries. It may be worthwhile acting on this opportunity immediately by encouraging some of your more articulate group leaders to travel to these countries and make contact with prospective candidates. They must be prepared to convey to them the exciting work in progress and the opportunities available for participating in science at the "cutting edge." After a detailed personal conversation with prospective students, it should be possible to sort out the most promising qualified candidates.

Another problem you evidently face is similar to that in the US and elsewhere, namely too little interest in the field of science on the part of the upcoming generation of students. It may be worthwhile to initiate an "outreach program" in which again, your more articulate group leaders make visits to undergraduate colleges and advanced high schools throughout Japan, giving talks about their exciting work. Perhaps involving some of their teachers in research during school vacation periods might be useful as these faculty members could end up as valuable ambassadors between their schools and the IMS.

Finally, in response to your wish about possible future areas of research emphasis, in addition to the fields currently being pursued, I believe the areas of nanoscale materials involving: 1) laying the fundamental science for the design of new heterogeneous catalysts with selected reactivities; 2) and devising scientific concepts for the formation of materials with desired properties through cluster assembly, are both research areas worth pursuing.

I hope my observations and comments are of some value to you. I thank you and your scientific staff for the interesting, informative and friendly interactions during my visit. I look forward to my return visit as councilor in early winter/late fall. Best wishes for a successful new research year.

Sincerely,

A. WELFORD CASTLEMAN, JR.

Eberly Distinguished Chair in Science

Evan Pugh Professor

親愛なる中村宏樹所長：

2006年3月6日から8日にかけてIMSの電子構造研究系の教授の皆様にお会いし、その仕事について議論できたことは格別の喜びです。この研究系は世界的なスタッフを揃えており、系の主幹および研究所所長はその高い水準の維持に成功しこれからも優秀な新人を集めるであろうことを祝福します。二人の比較的新しい採用者（大森教授と大島教授）は、研究系の計画がいくつかの刺激的な新しい方向を目指すことによって拡がりをもたらすことに貢献しています。その一つは、量子制御問題の組み合わせと古典 - 量子理論の境界における概念の検証に中心が置かれています。大森教授の最近の業績、波束の伝搬という領域における業績は、*PRL* と *Science* 誌に出版されようとしています、十分に価値の高いものでしょう。これらの発見は、計画的な研究の上に成り立っていますが、量子制御を実現する基本的な理解の方法に大きなインパクトを与えそうであり、物質の振る舞いに関する量子論的なレベルでの基本的な問題に解答を与える可能性が高いものです。この領域での彼の業績は高い注目を浴びるでしょう。もう一つの新しい方向が、光化学の分野で大島教授によって開始されようとしています。彼の新しい概念は、分子の運動に影響を与える、従って化学動力学に影響を与える波束の制御を取り入れています。分子の運動に光化学的な影響を与えうるということは、大変期待できる研究の道であり明らかに実行する価値があると言えます。二番目の問題に関連する活動は、分子間ポテンシャルの決定に関わるものであり、三番目のそれはクラスターの構造を演繹的に決める仕事でしょう。高強度の光の場を用いた回転状態の整列という問題は、完全な分布の転移を可能にする高いコヒーレンスを持った STIRAPを導入し、クラスターの構造的な特性を導き出すのに必要な検出感度を到達しようとする努力によって将来を約束された領域となるでしょう。多様で多数の分子系に対して分子間ポテンシャルを得る事への集中的な努力は、特に水素結合を含む複合体の構造の計算を行おうとする人々に広く情報を与えることは確実でしょう。

系の主幹自身の、継続的であり拡がりつつある仕事は、凝集現象という研究プログラムの基礎を与えつつあり、ナノスケールの次元での物質の性質を決める分子間の相互作用や現象の詳細な理解にインパクトを与えるものでしょう。これは、選択された混合系をつくる分子/原子系における量子効果や個々の多様性を有する性質の変化を含んでいます。この領域は、新しい現象の発見をもたらすでしょうし、物質科学やナノスケール科学に焦点を当てることによってIMSの多くの研究系で進行している研究の目的を融合させるでしょう。

私にとっては、系の主幹の、気相と固相とを繋げるであろう仕事を貫く研究の本筋に興味があります。混合系における集中的な仕事を通して、その発見が科学者のコミュニティに化学結合に関するこれまでになかった詳細な洞察を与えるでしょう。ある場合には、凝縮相に於いてもその構造を保ったクラスターの集合体が存在し、物質の性質を決めているわけです。特に、この意味で重要な仕事は、水とアルコール、あるいは水と有機酸類の混合系における水素結合の役割の解明でしょう。この新しい基礎的な研究は、クラスター科学、構造解析、分光学的な追求、そして熱力学的な考察などから導かれた理解を統一するものであり、これらの発見から導かれた広い視野は、生物化学の分野を含む水素結合が中心的な振る舞いを果たしている多くの領域に価値ある識見を与えるでしょうし、より生物に関わる分子系のこれからの研究への道を開いたと言えるでしょう。ナノスケール科学の他の見方に関連して、“柔らかい物質 - 固い物質の混合系”そして“固い物質の混合系”に焦点をあてた研究も同様に価値のあるものでしょう。

私の訪問の間に、IMSの系の再編についての考えを聞かされました。“領域”おそらく、物質分子科学、光分子科学、

理論・計算分子科学，そして生物・錯体分子科学のようなテーマに焦点が絞られているのでしょうか。この再編は，現在のIMSの活動状況に応じたものでしょうし，現在の編成の下で幾つかの系の単独の存在が抱える問題を軽減するでしょう。また，それはすでにIMSが有する印象的なセンターではあるのですが，ナノ科学の分野で世界的な広い興味という視野から見た場合，たとえこの課題が容易に包括されうるものであっても，物質分子科学という領域名を保有することは必要なことでしょう。

昨日，6名の他の系の教授の研究室を訪問する機会を持ちました。その内の2名の教授とのディスカッションが持てました。北川教授は，CO，NO，及びO₂のような小さな（2原子）分子の蛋白分子認識／検知に関する魅力ある研究について話して頂きました。松本教授との興味深い議論からは，超高速レーザー技術によってプローブされる金属表面の吸着分子の光化学に関した重要な領域について学ぶ機会を持つことができました。また，他の研究室の見学の中で特別の原子組成を持つ金ナノ粒子の合成とその特異的な反応特性を紹介され，また，特に印象深かった920MHzのNMR装置，そして分子システムが合成され続いて解析されるナノ科学研究室等のツアーは大変楽しいものでした。それぞれの研究室を案内して頂いた研究助手の皆さんは，彼らの仕事とその目的の説明に申し分なく務めを果たしてくれました。IMSが多くの科学の領域から助手や共同研究者，そして科学の近い将来のリーダーとなるべき人材を集めていることは明らかです。

私がコメントしたいもう一つの所見は，先端研究を行う為のIMSの装置群と，独創的で革新的なアイデアを遂行する研究者の高い質についてです。これらは，IMSが第一級の科学を展開する世界のリーダーとしての位置を保ち続けるための要素と言えるでしょう。しかしながら，この第一級の地位を保ち続ける機会というのは，予算の状況が悪くなったりスタッフの削減などが行われると忽ち損なわれる可能性があります。緊急に，シニアな研究者とともに若い研究者，助手や学生を増やす必要があります。政府は，研究所の状況が取り返しのつかないものになる前に，この耐え難い状況を是正する必要があるでしょう。更に，研究者が個々人の立場で企業と交流し，国の経済を助けるような科学的技術的な新発見を可能にすることは推奨すべき事ではありますが，企業によって支援された応用重視の仕事が導入され研究所が企業の片腕となるようなことがあれば第一級の科学水準を保ち続けることは出来なくなるでしょう。そのような事が起こらないように十分に注意しなければなりません。

我々が共に認識しているように，IMSの最も大きなニーズの一つは，より高度な資質をもつ人材を確保することです。特に重要なことは，科学スタッフメンバーによって指導される大学院生を多く獲得することです。現在の大学院生が余りにも少ない状況は，アジアの国々から学生を集める新しい日本学術振興会のプログラムの遂行によって変わるであろうことを知って嬉しく思います。この機会に何人かの能弁なグループリーダーがこれらの国々を回り，直接に候補者と接触するように直ちに行動する価値があるでしょう。これらの学生を，現在進んでいる刺激的な研究に積極的に携わらせ，科学の最前線に関わる機会を与えなければなりません。将来性の高い学生たちとの微に行った個人的な触れあいがあって初めて，最も将来性の高い上質の候補者を選び出すことが出来るのです。

あなた方が明らかに直面しているもう一つの問題は，合衆国のみならず世界のあらゆる所での問題と同様ではありますが，これから育ってくる次世代の学生たちが科学の分野に殆ど興味を示していないということです。これに対しても，積極的なグループリーダーが日本全国の大学の学部や優れた高等学校に出かけて行って，科学の面白さを伝える「出張サービスプログラム」を開始することも必要でしょう。学校の休み期間に，何人かの研究における教師を含めて，これらの教員メンバーが結果的に学校とIMSの間の価値ある親善大使となることは大変有用でしょう。

最後に，現在進行していると同時に，これからどのような研究領域が重要になるかとの指摘の要請に応えて，私は

次のようなナノスケール物質領域が価値あるものと信じます。それは、1) 選択的な反応性を持つ不均一触媒の設計への基礎科学の構築と、2) クラスターの集合組織によって必要な特性を有する物質の生成への科学的な概念を構築することです。

私の観察と意見が貴方にとって幾ばくかの価値あるものであることを希望します。私の訪問中に、興味深く有益な情報を与えられ、親しく接して頂いた研究者の皆様に感謝いたします。来年の初冬か晩秋に運営顧問として再び戻ってくることを楽しみにしています。新しい研究の年度の成功を祈っています。

敬具

A. ウェルフォード キャスルマン、ジュニア

エバリー科学特別職

エバン ピュー教授

4-2 極端紫外光科学研究系

国内評価委員会開催日：平成17年12月1日

委員 太田 俊明（東大院，教授）
大門 寛（奈良先端大，教授）
宇理須恒雄（分子研，教授）
小杉 信博（分子研，教授）
加藤 政博（分子研，教授）
オブザーバ 見附孝一郎（分子研，助教授）
菱川 明栄（分子研，助教授）
繁政 英治（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18年1月9日～11日

委員 Joseph Nordgren（Professor, Uppsala University）

4-2-1 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（反応動力学研究部門）
- ・小杉グループ（基礎光化学研究部門）
- ・見附グループ（反応動力学研究部門）
- ・菱川グループ（基礎光化学研究部門）

（2）UVSOR

- ・加藤グループ（光源加速器開発研究部、電子ビーム制御研究部）
- ・繁政グループ（光化学測定器開発研究部）
- ・木村グループ（光物性測定器開発研究部）

全体討論

委員 E：分子研で行う放射光科学やUVSORの今後の問題についてご意見をいただきたいと思います。率直なご意見をお願いします。外部の放射光科学研究者はどのようなことを分子研あるいはUVSOR施設に期待されるのでしょうか。

委員 A：日本にとって VUV 軟 X 線の高輝度光源は絶対必要である。東大の計画はなくなったので，分子研で高輝度光源を作っていただけるとよいのですが。

委員 B：技術的には問題ないが，建設費の要求が認められるかが最大の問題である。

委員 C：場所も問題である。

委員 A：UVSORは学術的に幅広く VUV 軟 X 線の光源として，日本で UVSOR でしかできない実験のできるビームラインがある。国内に大きな軟 X 線リングができるまで，VUV 軟 X 線領域の研究の中心として，頑張ってもらいたい。

- 委員 A：今は UVSOR をアップグレードしてトップアップ運転が出来るようにする事は重要である。
- 委員 D：マイクロスペクトロスコピーは備え付けの実験ステーションでなくてはできない。日本には、共同利用で使えるマイクロスコピーのビームラインが皆無であり、分子研で整備すると良いのではないかと思う。
- 委員 E：マイクロスコピーではサイエンスとしてはどういうことが重要ですか。
- 委員 D：2原子分子、3原子分子などのシンプルな分子についてはすでに多くの研究がある、新しいフィールドという問題を考えるとしたら、気体と表面の間だと思う。表面特有の問題は面白い。表面は据え付けの装置でなくてはできない研究が多い。なかなか、共同利用でそのようなことが出来るところはなく、UVSOR はその点やりやすい。赤外と真空紫外の領域で日本で一番良いビームラインが出来ている。UVSOR ならではという仕事が沢山出来ると思う。
- 委員 D：ユーザーと加速器の人の距離が近いのも実験がやりやすく、UVSOR の長所である。
- 委員 E：東大計画の資料を送ってくださったが、応用という意味ではバイオの研究はUVSORでできますでしょうか。
- 委員 B：赤外は SPring-8 よりビームの性質が良い。軟 X 線より高いところでは SPring8 の方がよい。分子研の人も SPring-8 をどんどん使うべきだ。生物分野については、X 線顕微鏡で、ウォーターウィンドウの 350 eV ~ 500 eV 付近で UVSOR を利用した非常にユニークなことが出来るのでは。
- 委員 C：UVSOR はビームエミッタンスが 10 nm ラジアンを切るリングではないのでマイクロスコピーを本格的にやるのはむづかしい。
- 委員 B：マイクロスコピーについては企業のニーズが高い。
- 委員 C：この分野ではカナダのヒッチコックが活躍しているが、全部応用研究である。
- 委員 D：単なるマイクロスコピーではなく、マイクロスペクトロスコピーでサイエンスを行うことを考えるべきである。
- 委員 B：マイクロスコピーで役立つと思われることはドメインの問題などがあるが、分子研でやる問題は少ないのではないか。
- 委員 B：分子研は分子研としての、化学の問題をやれる強みがある。
- 委員 B：分子研そのものの存在意義を考えその中で UVSOR の役割を考えればよい。その意味ではアップグレードで十分機能している。分子研が放射光専門の研究所になる必要は無い。
- 委員 D：そういう観点からは、レーザーと放射光の二重共鳴の研究はもっとすすめられなかったのか。世界で見てもそのようなことがやれる所はない。そこにレーザーの先端グループがいてそれと組み合わせられる場所はない。
- 委員 B：放射光と FEL の組み合わせでポンププローブをやったが、レーザーで出来ないことをやるのは難しい。
- 委員 B：それくらいなら、UVSOR でコヒーレント発振が可能なテラヘルツ領域でやる方が戦略的に有利だ。また、X 線 FEL が理研で始まるが、その利用のための要素研究を分子研でやれると良いのではないか。理研の FEL が出来た段階でメインユーザーとなれるのではないか。日本は加速器は出来るが、それを使う人が十分育っていないのではないか。
- 委員 E：理研 FEL のエネルギー領域はどのようなですか。
- 委員 B：プロトタイプ機は 20 eV (60 nm) であるが、そのあとは一気にハード X 線の FEL に行く。
- 委員 C：X 線 FEL は放射光の延長ではなく、レーザーの延長としてとらえるべきである。そこで、分子研ならではのアイデアを出せると利用研究でリーダーシップをとれる。

委員 B：理研がやろうとしてはいるが、ユーザーのポテンシャルは外国の方が高い。理研はトップダウンでやろうとしている。5～6年先に出来たときに使える人が日本にいないのではないかと。今提案されているのは外国でやっていることばかりだ。

委員 B：分子科学としてX線 FEL を使える問題があるのではないかと。世界のどこでもやっていないことに挑戦して欲しい。ユニークな提案をしていただけると素晴らしい。強光子場の問題など面白いのではないかと。

委員 C：強光子場の問題は短波長になると不利になるので、この分野でX線 FEL を有利に使うことは難しい。

オプザーバC：強光子場も面白いが、X線 FEL では短パルス性を利用したポンプ・プローブ計測への展開が興味深い。

オプザーバA：非常に面白い話を聞かせていただいた。系と施設の関係で言えば、系と施設が一丸となってやって欲しい。ぜひ独創的な研究にチャレンジしてやって下さい。

委員 E：現在分子研では系と施設の組織改編の問題を議論しているが、この問題について何かご意見はありますか。

委員 B：UVSOR は本当に少ない人数で良くやっている。

委員 B：UVSOR 施設が分子研内の他施設と同じレベルにおかれているのはバランスがおかしい。系と同じレベルにして良いのではないかと。

委員 C：ホームページの組織図では系と同列にしてもらった。UVSOR 側からみればユーザーとの交流もうまくいっており組織上の問題は特に無いと思う。

委員 E：それではそろそろ時間となりますので、この辺で終了とさせていただきます。本日は大局的な見地から色々貴重なご意見をお聞かせいただき有り難うございました。

4-2-2 国内委員の意見書

委員 A

全体的な観点からの意見

UVSOR はわが国においては放射光の化学への応用を主眼においたユニークな放射光施設であるが、これまで PF、SPring-8 の陰に隠れて目立たない存在という感じが否めなかった。その大きな原因が、リングが第二世代であり、しかも低エネルギーであるために軟X線領域までしか利用できないということがあったと思われる。しかし、最近のリングの upgrade と各種アンジュレーターの導入によって、PF と遜色ない性能をもった施設になった。確かに、それでも高輝度リングではなく、硬X線が利用できないということから、利用の範囲と手法は狭まるが、現在の UVSOR の特長をフルに活かせば、十分世界との競争力をもった研究が可能である。ただ、PF、SPring-8 のような本格的な放射光利用施設ではなく、限られたスタッフによって維持運転されていることから、全方位の研究展開は難しいし、するべきではなく、的を絞った研究に特化すべきであろう。

小杉グループ

小杉教授は内殻励起分子分光の理論計算においては、世界でも高く評価されており、二原子分子、三原子分子の内殻励起スペクトルの詳細な解析と、外国との活発な共同研究を行っている。

そして、最近では分子からクラスター化学に展開して、クラスターにおける表面と内部緩和の違いの問題を取り扱い、興味ある結果を出している。これらの研究成果は一つ一つが十分論文発表できる内容と思われるが、最近の総説にまとめて書いているだけで、少し残念な感じがする。

これも UVSOR の運営の問題だけでなく、副所長として分子研全体の管理運営にかかる時間が多いことが大きな原因

と考えられる。管理職にあるものには研究の活性を維持するためには、助手、あるいはポスドクをつけるなどの配慮があっても良いように思われる。

一方で、小杉グループの初井助手が中心になって、斬新なアイデアを各所に取り入れた発光分光装置を開発しているが、これが実用可能になれば吸収、発光、光電子分光に理論を加えることによって非常にレベルの高い内殻分光の研究グループになることが期待される。

できることならば、もう少しマンパワーを増やして活性化を図る努力を研究所がすべきであろう。

宇理須グループ

宇理須教授はNTTから分子研に着任したこともあって、応用からみた基礎研究という観点を持っている。最近はじめたシリコン薄膜上の膜タンパクトランジスターの開発は独創性があり、工学、医学の研究者の興味を引く面白い研究である。これまでの研究と全く異なる生物学の世界に飛び込んで、新しい切り口からタンパク質の機能解明を目指していることに、高い敬意を表したい。特に、印象深かったことは、グラミシジンAのAFM観測から、この膜タンパクが環境によってそのモルフォロジーが大きく変わることを見出したことであり、X線構造解析、NMR解析だけでこれらの膜タンパクの構造や機能を議論している世界の構造生物学者に警鐘を鳴らすものとして、今後の研究の展開が楽しみである。トランジスター開発までにはまだ長い道のりと、工学系、生物関係の専門家との共同研究が不可欠となろうが、是非とも突き進んでほしい。ただ、残念なことは発表雑誌が化学系のものであり、できればこのような研究に関心をもつ読者がいる生物医学系の雑誌への投稿を心がけてほしい。

見附グループ

見附助教授を中心としたグループは放射光とレーザーを組み合わせた研究で有名である。今回の研究紹介は専らフラーレン、金属フラーレンの光イオン化と光解離に関するものであり、電気炉と膜厚系を組み合わせた新しい昇華装置を開発し、それを用いた実験であった。それ自身は興味深いものであったが、これが今後どのように発展していくかについての展望が今ひとつはっきりしなかった。せっかくの放射光分光、レーザー分光技術を併せ持つ見附グループなので、これらを組み合わせた新しい研究への展開を期待したい。

菱川グループ

菱川助教授は分子研着任2年半であり、強光子場での分子の光化学反応の制御という新しい研究分野の開拓を目指して研究をすすめている。放射光軟X線と可視光の二重励起も検討しているがこれは、かなり難しい挑戦になりそうである。JSTのさきがけ研究(2005 - 2008)も認められ、順調に進んでいるようで、今後の進展が楽しみである。

繁政グループ

繁政助教授は着任6年半になり、初期に行なっていた対称性分離分光法を更に発展させて、内殻イオン化に伴う分子解離ダイナミクスの研究を始めている。準安定解離種や負イオンの検出など新しい取り組みが見られ、今後の発展が期待される。ただ、内殻イオン化の研究には軟X線領域で強力な放射光源が必要とされるが、残念なことにUVSORではあまりこの要求を満たすビームラインが無く、主な研究の場をPFやSPRING-8にしているのが現状である。内殻励起とイオン化の過程を調べる研究グループは少数ながらわが国で世界の先端を行っており、今後は強固なチームワークをもって研究を推進されることを望む。

木村グループ

最近、赤外から遠赤外領域をカバーする非常に明るいビームラインと、高分解能でビームを絞った真空紫外領域のビームラインを建設している。これらは世界的にも高い競争力をもったものになり、低エネルギーリングである UVSOR の特徴あるビームラインとして今後どのように利用していくかがキーとなる。赤外ビームラインでは高い取り込み角 (216 mrad) によって SPring-8 よりも二桁高い強度で、しかもテラヘルツ領域 (8 cm^{-1}) まで利用可能である。これまで専ら強相関係物質や希薄近藤半導体の電子状態の研究などに応用しており、ユニークな研究成果を挙げている。この分野は化学、生物も高い関心をもっており、新規開拓も期待される。一方、真空紫外のビームラインでは高分解能光電子分光装置をとりつけて Fermiology を念頭においており、赤外吸収と情報をあわせることで新しい発展が期待できる。ただ、せっかく UVSOR のビームラインであるから、強力な赤外光を用いた分子科学研究という観点からのアプローチがもう少しあっても良いように思われる。

加藤グループ

加速器を専門とするスタッフは少数であるが、非常に着実に upgrade に努力しており、これまでも高輝度化に向けた改造でほぼ PF 並みのエミッタンスまでにいたっている。そして、これからの最大の課題は top up 運転の実現である。UVSOR のように小型のリングでは寿命が短いために、top-up 運転のご利益は非常に大きい。この実現に向けて最大限の努力を払って欲しい。一方、UVSOR の加速器グループは先代の浜 宏幸氏 (現 東北大) より RF 加速による FEL の開発も行っており、世界でも今後の進展が注目されている。

補足：

世界の放射光科学は X 線 FEL に向けて進みつつある。これは大強度、フェムト秒パルス、コヒーレント X 線という、従来の放射光とは全く異なった光源であり、わが国でも理研グループが SPring-8 のサイトに建設を始めている。わが国の加速器技術はユニークでオリジナリティに富んでいるが、肝心のサイエンスの関してはこれまでの Stanford, DESY で検討されてきたものの域をでていない。わが国独自の研究プロジェクトが無い。分子科学研究所、および、極端紫外研究系のスタッフはレーザーと放射光に習熟した数少ない研究グループであり、XFEL を利用する研究者集団としても先鋭的なグループになりうるように思われる。理研 FEL が利用可能になるのは 2010 年以降になると思われるが、それまでに UVSOR を用いた予備実験を始めることも一つ検討に値するのではないだろうか。

委員 B

全体的な観点からの意見

それぞれが UVSOR を十分活用して特徴のある研究成果を上げており、感心した。加速器系スタッフと研究系スタッフの協力がうまくいっており、ここでしかできない、ここだからこそできる、という研究が進展している。リングが小さいために VUV と低エネルギーの SX しか使えないという制約はあるが、HiSOR や立命館に比べるとはるかに自由度の高いリングであり、加速器スタッフの努力による近年の高度化が大変うまく行っており、低エネルギー放射光施設としては世界的に第一級のものとなってきている。高度化されたビームラインは日本における貴重な VUV の設備となるため、分子の研究のみならず全国の研究者に広く活用してもらい、恩恵を与えて刺激と情報を受け取るという良い循環になっていくことを希望する。

小杉グループ

本グループは、分子の光イオン化スペクトルの理論的解釈の領域で世界的に信頼され、貢献している。理論だけでなく実験として、孤立系分子とクラスターに取り組んでおり、クラスターでは内部と表面でのエネルギーの違いなどを明確にしている。放射光の特徴を活かした実験と、それを支える理論とを駆使し、分子や分子間相互作用の詳細を明らかにしていく地道で着実な基礎研究を推進していることは高く評価される。装置が充実してきているにもかかわらず、学生が少なく、若手・後継者の養成のためにも学生の確保が望まれる。論文を書く時間が無いとのことで、良い論文が Impact Factor の小さな雑誌に載っているのは残念である。

菱川グループ

レーザーの超強光子場で解離した全てのイオンの運動量を相関計測するという高度な技術で解離過程のダイナミクスを解明している。また、アト秒領域の超短パルス軟X線光源を開発するなど、高いポテンシャルを持っている。今後の発展が期待される。

宇理須グループ

放射光エッチングによりSi表面に微細加工を施し、そこにイオンチャンネルを持つ人工細胞膜を乗せてチャンネル電流を測定することに成功している。世界的にユニークな研究として注目される。機構内の他の研究所(生理学研究所)とも共同研究を実現している特徴あるグループである。一般の興味を引ける研究テーマであるので、是非画期的な成果を出して欲しい。

見附グループ

フラーレンの多価イオンやフラグメントの収量曲線を測定し、段階的解離の計算機による再現に成功している。特許も申請するような装置の開発から行って、放射光の特徴を活かした研究を推進している姿勢は高く評価される。

加藤グループ

UVSOR-IIの高度化、高輝度化や自由電子レーザーの研究を成功裏に推進している実績は高く評価される。マシン系の優れた協力があるからこそ、他の実験系の研究者の成果が出ているのであり、非常にうまく協力関係が構築されている。また、テラヘルツ領域のコヒーレント放射光の生成に成功したことは最先端の成果であり、今後の進展に大きな期待が持てる。UVSOR-IIIも期待している。

繁政グループ

高性能分光器の立ち上げや新しい発光分光器の開発など、高性能の装置の開発によって独自の対称性分離分光法などの高分解能化につなげる意欲的な姿勢は高く評価される。EUV発光など新しい手法にも取り組んでおり、今後の発展が期待される。

木村グループ

赤外のみならずテラヘルツ分光まで行っている特徴あるグループである。共同研究・論文数ともに多く、非常にActiveに活躍していることは高く評価される。世界最高の光強度を持つビームラインに設置されたテラヘルツ顕微鏡の今後の活躍が期待される。

4-2-3 国外委員の評価

原文

Report on the scientific activities at the Department of Vacuum UV Photoscience and UVSOR following a visit to IMS on 9–11 January, 2006

Prof. Joseph Nordgren

Uppsala University

Department of VUV Photoscience

Professor Nobuhiro Kosugi

The success in keeping the UVSOR facility at a continued competitive level is undoubtedly to a large part thanks to the insightful and talented management of professor Kosugi. At the same time he is pursuing molecular physics research, experimental as well as theoretical, at an internationally well-recognized level. This is a noteworthy achievement. The main areas of interest are in the study of chemical bonding and excitation dynamics, in molecular interaction in clusters and molecular solids, and also in solid state physics. The experimental methods that professor Kosugi is using are symmetry-resolved photoabsorption, photoemission spectroscopy and lately soft X-ray fluorescence spectroscopy. He is also conducting a research programme in quantum chemistry, and he has developed widely used codes for theoretical calculations related to molecular inner shell spectroscopy.

Among the studies conducted by professor Kosugi one notices an application of the angular resolved photoion yield technique in the assignment of features in photoabsorption spectra, *e.g.* that of acetylene. By analyzing this spectrum using calculated potential energy surfaces the $C1s-3\sigma_u^*$ valence state coupled via a bending mode with the π^* state together with the $3s\sigma_g$ Rydberg state was found to be responsible for a particular observed feature. An interesting approach is also the use of blue respectively red shifts of photoabsorption features to determine geometrical conformations in molecular clusters, and a noteworthy achievement is the measurement of a shift of the Ar 2p-4s line due to the 0.4 pm reduction in bond length induced by lowering the temperature from 16 K to 8 K. Quite noteworthy is also the study on the electronic structure of DNA by resonant photoemission, where it could be concluded from evidence of local character of unoccupied states that conductivity is associated with electron hopping rather than charge transfer.

Among significant experimental system developments made in professor Kosugi's group the recent design of a new kind of soft X-ray fluorescence spectrometer is particularly interesting. This design is based on imaging non-spherical grazing incidence optics (Wolter type) and a transmission grating. This design has unique features and already with the present grating and detector (future performance enhanced components are likely to become available) the performance is impressive.

Professor Kosugi, who has a wide international network and collaborations, his list of published papers steadily increasing, is an internationally renown and respected scientist, who continues to contribute to the basic understanding of core and valence photoionization processes in a significant way.

Associate professor Akiyoshi Hishikawa

Professor Hishikawa came to the Institute in 2003, and he is conducting a research programme in ultra-fast dynamics of molecules in intense laser fields. The study of conditions at the atomic level where perturbative methods completely fail as the strength of the

external field is comparable to that of the internal field is of considerable interest. Modern lasers are able to produce such conditions and professor Hishikawa is focussing on structural deformations and multiple bond breaking using a recently developed method, coincidence momentum imaging. The technique allows the determination of the momentum and ejection directions of all the fragment ions ejected in the dissociation induced. By analyzing the correlation of the determined momentum vectors professor Hishikawa is reconstructing the nuclear motion evolution on the “light dressed” potential energy surfaces. This allows detailed information to be obtained regarding the dynamics of the intense laser field induced state.

Issues like how the molecular orientation with respect to the polarization of the laser light influences the Coulomb explosion evolution has been studied in detail by professor Hishikawa. Among the successful studies carried out in recent time one on the dissociation of acetonitrile in intense laser field is particularly informative. By varying the laser pulse width the effects of structural deformation and alignment could be controlled and the ejection directions determined in a selective manner. This allowed the study of paths and time scale of the migration of hydrogen in the dissociation process. Professor Hishikawa is also pursuing higher harmonic generation of laser light to produce VUV radiation, a field of great interest and expectations.

Professor Hishikawa is a relative newcomer at IMS and he has built up his activities during the last two years. The publication record of professor Hishikawa speaks for his talent, and one notices that he has a significant number of papers with more than 10 citations, one showing close to 50 citations.

Professor Tsueno Urisu

Professor Urisu has a background in surface chemistry and work at the NTT company before coming to IMS 14 years ago, and he has since then been engaged in synchrotron radiation (SR) induced surface reactions to produce surface structures on silicon. SR stimulated surface reactions show distinct advantages in terms of material selectivity, high spatial resolution and low contamination, and it is therefore very suitable for fabrication of nanostructured materials. Professor Urisu has been pursuing this research at IMS and he has applied various characterization techniques in his work, such as STM and AFM.

Lately, professor Urisu has to some extent switched gears and focussed on the field of biomaterial function, applying his great knowledge base and skills in surface science, silicon microstructuring and characterization techniques. A project of dignity in professor Urisu’s research programme is to realize a reliable method for sensing ion channel activity by means of a patch clamp method. Here he has to fabricate device structures that allow him to access a single ion channel in a lipid membrane and apply an electronic circuitry for signal detection. There are a number of difficulties and obstacles that have to be mastered in order to attain reliable and accurate measurement conditions, and professor Urisu is pursuing a path towards realization of this goal. In this work he needs (and has ample access to) expertise in a number of different fields. This makes his work truly an advanced multi-disciplinary activity, and Professor Urisu keeps publishing at an impressive pace together with his collaborators.

Associate professor Koichiro Mitsuke

Professor Mitsuke has extensive experience in the field of molecular photoionization research. A peek in the bibliographic database shows an impressive list of frequently cited publications from his work. He is particularly engaged in the study of photoinduced fragmentation that takes place as a result of the decay of highly excited states through autoionization, predissociation, vibronic coupling and internal conversion. Such studies reveal detailed information about the dynamics of the dissociation processes.

Professor Mitsuke has constructed an instrument for study of two-dimensional photoelectron detection, which monitors the

electron yield as a function of incoming photon energy and electron kinetic energy. This instrument is used to obtain information about the dynamics of the photofragmentation process. Furthermore, he is also studying the fluorescence that can be emitted from a highly excited state or by being induced by laser light in order to detect the dissociation fragments. Examples of studies conducted in recent time by professor Mitsuke using fluorescence detection, are the photofragmentation of water and the neutral dissociation of HI. In another kind of experiment professor Mitsuke is using laser light to combine with synchrotron radiation in order to study photodissociation of highly vibrationally excited molecules, in particular aiming at selective bond breaking.

In studies of fullerenes professor Mitsuke has shown that these molecules can store considerable amounts of energy as delivered by a high energy VUV photon without dissociating. This is explained in terms of a redistribution of energies into the very many different modes of vibration, which renders the molecule high stability against fragmentation. Endohedral fullerenes have also been subject to study by professor Mitsuke in several cases, highlighting the photoabsorption enhancement and interference effects due to the metal atom.

Professor Mitsuke conducts carefully designed experiments and with insight and advanced analysis he is able to keep his scientific output at a high level, providing new knowledge of great interest to the community.

UVSOR Facility

Professor Masahiro Katoh

The UVSOR facility was subject to a major upgrade during 2003 under the very able leadership of professor Katoh. By changes in the magnetic lattice the emittance could be lowered from 160 nm-rad to 27 nm-rad. By that this facility takes a fore-front position among low-energy storage rings, and in addition, by constructing in-vacuum undulators highly brilliant soft X-rays could be delivered without impairing the life-time properties. The changes also gave room for more straight sections, which is a prerequisite for the further development of the facility in terms of performance and availability. The whole operation was carefully planned and executed without unnecessary disturbance to the operations.

Professor Katoh is presently working on further upgrades and advancements of the facility. Top-up mode is under development, which will bring significant improvement in terms of average intensity. This has to be accompanied by stretching the energy of the injection system, as well as installing radiation shielding, which is already in progress.

The improved quality of the electron beam resulting from the recent upgrade of the UVSOR facility has brought advantages to the free electron laser installed in the storage ring. In test experiments the anticipated gain has been confirmed and presently work is underway to realize a new in-vacuum optical klystron for radiation in the deep UV and VUV. Other significant technical developments that are underway or in the planning are the coherent Terahertz radiation generation project, the slicing of the electron beam by a laser to achieve ultra-short pulses, and plans for even further decreased emittance by another lattice change.

It is obvious that professor Katoh possesses great skills as an accelerator physicist and as a leader of the machine operations and technical development of the source.

Associate professor Shinichi Kimura

Professor Kimura has been working at IMS since 2002, bringing in a somewhat different scientific field into the Institute of Molecular Science, solid state spectroscopy and studies of strongly correlated condensed systems. He is using photoemission spectroscopy as well as optical measurement techniques based on the use of infrared radiation to study electronic structure and

magneto-optical properties of strongly correlated materials and other materials with special electronic properties. Professor Kimura has been and is still engaged in the design and development of experimental systems for synchrotron radiation.

The research program of professor Kimura includes studies of rare earth and transition metal systems, for instance various cerium compounds, under different conditions such as varying magnetic field, pressure and temperature, as well as controlled combinations of these parameters. In the studies he is able to address important questions such as, for example, pseudo-gap formation, effects of spin fluctuations at critical points, and quasi-particle behaviour. The research programme also includes studies of organic (super)conductors as well as skutterudites and clathrates, compounds that have quite special structure and display unusual electronic properties.

In the past professor Kimura has been engaged in the design of beamlines both at UVSOR and SPring-8, and lately he has in particular worked on instrumentation projects at UVSOR concerning Terahertz spectroscopy at extreme conditions and the design and reconstruction of two undulator beamlines. Also, he has been involved in a project on coherent Terahertz radiation generation.

Professor Kimura has a wide network of collaborators at Universities in Japan and overseas, with whom he has scientific collaboration, and he shows a steady pace of publishing in good journals. He is frequently invited to lecture at international meetings and in colloquia at laboratories. Professor Kimura is certainly a talented scientist with a firm basis in both advanced experimental methods and in the physics of solid matter.

Associate professor Eiji Shigemasa

The main interest of professor Shigemasa lies in the field of core excitation dynamics. This involves studies of multi-excited states, post-collision interaction and deexcitation processes using coincidence techniques, Auger and fluorescence spectroscopy and momentum imaging methods. Professor Shigemasa has designed experimental equipment for these kinds of experiments, including beamlines at UVSOR, electron and fluorescence analyzers and coincidence detectors.

In various high resolution and symmetry resolved studies professor Shigemasa is addressing questions about the mechanisms for double photoionization, the formation of negative ion fragments and metastable fragments, and the anisotropy of dissociation product emission. In particular, the momentum imaging spectrometer designed by professor Shigemasa offers a number of interesting assets. It allows very large detection efficiency ; it provides information on fragment internal energies through kinetic energy measurements and it delivers symmetry information on excited states by means of polarization dependence of transition moments. Using a toroidal electron analyzer built by professor Shigemasa angular and energy distributions are determined, which are used to establish potential energy curves and to elucidate details of the dynamics of the excitation-deexcitation processes involved.

Professor Shigemasa has long standing collaboration with internationally well known scientists in the atomic and molecular community, and especially two *Phys. Rev. Letters* a few years ago on angular correlations in molecular Auger decay and non-dipole electron emission effects in fixed-in-space molecules bear witness of this successful multi-national cooperation.

2006 年 1 月 9 日 ~ 11 日分子研訪問時に実施した極端紫外光科学研究系と UVSOR 施設の研究活動に関する報告

ウプサラ大学教授ジョセフ・ノルドグレン

極端紫外光科学研究系

小杉信博教授

UVSOR施設が絶えず競争力のある水準に保つことに成功している理由の大部分は疑いもなく小杉教授の見識ある優れた管理運営のおかげである。と同時に彼が分子物理学研究を実験と理論の両面で推進していることも国際的によく認知されている。これは注目すべき業績である。興味の中心は化学結合や励起ダイナミクスの研究、クラスターや分子固体における分子間相互作用、さらには物性物理学にある。小杉教授が用いている実験手法は対称性分離光吸収、光電子分光であり、最近では軟X線発光分光もある。彼はまた量子化学の研究プロジェクトを主導しており、彼の開発した分子内殻分光学に関連した理論計算コードは広く使われている。

小杉教授が主導している研究の中で、まず、光吸収スペクトルに現れる構造を帰属するため、角度分解光イオン収量法を応用した研究がある。例えばアセチレンでは、計算で求めたポテンシャル曲面を解析することで、 $3s\sigma_g$ リュドベリー状態とともに振動モードを通じて π^* 状態と結合した $C1s-3\sigma_u^*$ 価電子状態が特異な吸収構造の原因であることを見つけている。また、光吸収が青方シフトするか赤方シフトするかを用いてクラスター内の分子の幾何学的配向を決める話も興味深い。固体アルゴンの温度を 16 K から 8 K に冷却すると原子間距離が 0.4 pm (0.004 Å) 減少することで Ar2p-4s 励起がシフトすることを測定できたことも注目すべき成果である。共鳴光電子分光法による DNA の電子構造の研究も極めて注目すべきものである。

小杉教授のグループで開発している重要な実験装置の中で、新しい軟X線発光分光器のデザインは特に興味深い。このデザインは非球面斜入射光学系（ウォルター型）と透過型回折格子に基づいている。このデザインはいろいろ独創的な特徴を持っており、すでに現時点での回折格子と検出器を用いた性能（将来、性能強化されたコンポーネントが手にはいるようである）に感心した。

小杉教授は広い国際ネットワークを持って共同研究を行い、発表論文も順調に増えている。また、重要な手法で内殻と価電子の光イオン化過程の基礎的理解に継続的に貢献している科学者として国際的に有名であり、評判も高い。

菱川明栄助教授

菱川助教授は2003年に分子科学研究所に着任し、強レーザー場における分子の超高速ダイナミクスに関する研究を推進している。内部場に匹敵する強度を持ち、摂動論的方法が完全に破綻するような外場存在下における原子レベルの研究は極めて興味深い。菱川助教授は、最新のレーザーを用いて生成させたそのような条件下における分子構造変形過程および多重結合解離過程の研究に、新たに開発したコインシデンス運動量画像法を用いて取り組んでいる。この手法は解離過程によって生成したすべての解離イオンの持つ運動量と放出方向を決定することができる。得られた運動量ベクトルの相関に基づいて、菱川助教授は「光ドレスト状態」ポテンシャル曲面における核運動時間発展の再構築を行っており、これによって強レーザー場によって誘起された状態のダイナミクスに関する詳細な情報を得ている。

菱川助教授はレーザー偏光方向に対する分子配向がクーロン爆発過程に及ぼす影響などの問題について詳細な研究

を行っている。レーザーのパルス時間幅を変化させることによって、構造変形過程や配向を制御し解離方向の選択的なコントロールを可能とした。最近の成功した研究のなかでも、アセトニトリルの強レーザー場における解離過程に関するものは重要な知見を与えており、解離過程における水素移動過程経路やその時間スケールについての研究を可能としている。菱川助教授はレーザー高次高調波を用いた真空紫外光の発生にも並行して取り組んでいるが、これは大変興味深く期待に満ちた研究分野である。

菱川助教授は分子科学研究所に比較的最近着任し、この2年間で研究活動を積み重ねてきている。菱川助教授は引用件数が10件を超える論文を数多く発表してきており、そのうちの一つの引用件数は50件に届こうとしている。この発表論文記録は彼の才能を示すものである。

宇理須恒雄教授

宇理須教授は表面化学のバックグラウンドを持っており、分子研に来る14年前まではNTTで働いていた。それ以来、放射光誘起表面化学反応によりシリコン表面に構造を作る研究に従事してきた。放射光誘起表面反応は、材料選択性、高い空間分解能、低汚染と言う点で明確な優位性を有しており、従って、ナノ構造材料の製作に非常に適している。宇理須教授は分子研でも継続してこの研究に取り組んでいる。また、STM、AFMなど多様な評価技術をこの研究に適用している。

最近、宇理須教授は研究の方向を少し変え、表面科学、シリコン微細加工および評価技術における彼の膨大な知識基盤と熟練を生かして生体材料の機能の分野に焦点を合わせた研究を始めた。宇理須教授の研究計画で高く評価されるプロジェクトは、パッチクランプの手法によりイオンチャンネルの活動を検出するための信頼できる方法を実現させることである。そのため、彼は脂質膜中にある単一イオンチャンネルを検出できるデバイス構造を作る必要がある。また、信号検出のために電子回路を応用する必要がある。信頼性が高く正確な計測を達成する条件を整えるためには乗り越えなくてはならない幾多の困難と障害が待ち受けており、宇理須教授はこの到達目標に向かって今、道を切り開いているところである。このような研究では多くの異なった分野の専門的知識を必要とするが、彼はそのためにいろいろなルートを持っている。これによって彼の研究が真に先端的で学際的なものとなっている。また、宇理須教授は彼の共同研究者とともに驚くほどのペースで論文発表を維持している。

見附孝一郎助教授

見附助教授は分子の光イオン化の研究分野で多岐に渡る経験を持つ。文献データベースを見れば彼の幾つかの論文が頻繁に引用されていることがわかる。見附助教授は超励起状態の種々の崩壊過程（自動イオン化、前期解離、振電結合、内部転換など）、及びその結果起こる光誘起分子解離に関する研究に特に携わっている。こういった研究から光解離ダイナミクスの詳細を明らかにしてきた。

見附助教授は光電子強度を入射光子エネルギーと電子運動エネルギーの2変数関数として測定する「2次元光電子検出」の研究のための装置を作り上げた。この装置は光イオン化や光解離のダイナミクスの情報を得る目的で使用された。さらに彼は高励起状態の分子やイオンからの蛍光（発光分散分光）や放射光解離フラグメントをレーザー照射して生ずる蛍光（レーザー誘起蛍光）などについても研究した。蛍光検出や光電子検出を用いた最近の研究例としては、水の光解離とヨウ化水素の中性解離等の仕事が上げられる。もう一つの類の実験として、見附助教授は放射光とレーザーを組み合わせ、振動高次倍音励起分子の光解離を開始している。この研究は選択的な化学結合の解離を目指したものである。

見附助教授はフラーレンの極端紫外光吸収の研究も行っており、かなり大きな余剰エネルギーが渡されてもフラーレンはそれを長時間貯蔵しうることを示した。これは、異なる多くの振動モードに内部エネルギーが再配分されて、フラーレン親イオンが解離を起こさずに安定化されるためである。数種類の金属内包フラーレンの光吸収過程も見附助教授の研究主題の一つであり、金属原子の内殻励起に基づく共鳴現象と干渉効果に着目して研究を進めている。

見附助教授は実験を入念に立案し遂行し、彼の洞察力と先進的解析を用いて高水準の科学的成果を出し続けている。同時に、関連分野の研究者の興味をかき立てる新しい知識を供給し続けている。

UVSOR 施設

加藤政博教授

UVSOR は2003年に加藤教授の強力な指導の元、大幅な高度化が行われた。電磁石配列の再構成により電子ビームのエミッタンスを 160 nm-rad から 27 nm-rad へ低減することに成功した。これにより UVSOR は性能において低エネルギーシンクロトロン光源の先頭に立つことができた。真空封止型のアンジュレータを導入により、ビーム寿命を損なうことなく輝度の高い軟X線を供給することができるようになった。また高度化によりリング内に更に多くの直線部が作り出されたことで、今後も施設の性能・可能性をいっそう拡大できる余地を作り出した。この計画は必要以上に施設の運営に影響を与えないように注意深く計画され実行された。

加藤教授は、現在も施設の更なる高度化に向けて研究を継続している。現在は、トップアップ運転モードを開発中であるが、これはシンクロトロン光の平均強度を大幅に向上させることが期待できる。この運転モードの実現には入射器のエネルギー増強と放射線遮蔽の強化が必要であるが、これらは既に進行中である。

UVSORの高度化による電子ビームの品質向上は装着されている自由電子レーザーの性能向上にも結びついている。レーザー増幅率の向上が既に確認されており、光クライストロン装置の高度化による深紫外・真空紫外領域での発振実現が視野に入ってきている。これ以外にも、重要な技術開発としては、コヒーレントテラヘルツ光の生成、レーザーバンチスライス法による極短放射光パルスの生成、光源加速器の更なる低エミッタンス化が進行中もしくは計画中である。

加藤教授が加速器研究者として、また、光源開発・光源運転維持のリーダーとして優れた能力を有していることは明白である。

木村真一助教授

木村助教授は2002年から分子研に勤めており、分子研に多少違った科学分野である固体分光や強相関伝導系の研究をもちこんでいる。彼は、光電子分光や赤外放射光を使った光学測定を手段として、強相関伝導系や特殊な電子的な性質を持つ他の物質の電子状態や磁気光学的性質を研究している。木村助教授は、以前から継続的に放射光の実験装置のデザインと開発に従事している。

木村助教授の研究分野は、磁場・圧力・温度のパラメータをコントロールすることで作り出された異なる状態で、希土類や遷移金属系、たとえばさまざまなセリウム化合物などの研究を行っている。この研究で、彼は重要な問題、たとえば擬ギャップの形成や量子臨界点におけるスピン揺らぎの効果、準粒子の振る舞いなどの問題に取り組むことができる。研究対象は、有機（超）伝導体、スクッテルダイトやクラスレート化合物などかなり特殊な構造や異常な電子的性質を持つものも含んでいる。

過去において、木村助教授はUVSOR や SPring-8 のビームラインの設計を手がけてきており、最近では特に UVSOR

において極端条件下のテラヘルツ分光や2つのアンジュレータビームラインの設計と再構築の装置建設プロジェクトを行っている。また、テラヘルツコヒーレント放射光発生プロジェクトにも参加している。

木村助教授は国内や海外の大学との共同研究において広いネットワークを持っており、科学的な共同研究を実施し、高い評価の雑誌への出版を安定したペースで行っている。彼は、しばしば国際集会や研究所のコロキウムに招待されている。木村助教授は、疑いもなく先端的な実験手法と固体物質の物理の両方に確固たる基礎を持った有能な科学者である。

繁政英治助教授

繁政助教授の主たる興味は、内殻励起分子のダイナミクスにあり、これには多電子励起状態やPCI(衝突後相互作用)効果、脱励起過程が含まれる。オージェ電子や蛍光を組み合わせた同時計測法により研究を行っている。繁政助教授は、この種の実験を行うための電子エネルギー分析器や蛍光分光器などの装置類や同時計測法の開発を始め、UVSORにビームラインを建設した。

様々な高分解能分光実験、特に、対称性分離分光法による実験を通じて、現在、繁政助教授は二重イオン化のメカニズムや非等方的な生成物の放出、負イオンや準安定解離種の生成のメカニズムについて関心を持っている。繁政助教授により設計された運動量画像観測装置は多くの興味深い利点がある。まず、検出効率が高いこと。次に、運動エネルギー測定により、フラグメントの内部エネルギーの情報が得られること。また、遷移モーメントの偏光依存性から励起状態の対称性に関する情報が得られることが上げられる。繁政助教授が製作したダブルトロイダル型電子エネルギー分析器は、エネルギーと角度分布を同時に決定することができるので、分子の二価イオン状態のポテンシャルエネルギー曲線を決定したり、内殻正孔状態の脱励起のダイナミクスの詳細を解明することができる。

繁政助教授は、原子分子の分野でよく知られた研究者達との国際的な共同研究を長く続けており、特に数年前 *Phys. Rev. Letters* に出版された配向分子からのオージェ電子放出と非双極子的な光電子放出という二つの論文は、国際共同研究の成功を如実に物語っていると言える。

4-3 岡崎統合バイオサイエンスセンター

国内評価委員会開催日：平成17年11月2日

委員 阿久津秀雄（阪大蛋白研，教授）
杉浦 幸雄（同志社女子大薬，教授）
青野 重利（岡崎統合バイオ，教授）
北川 禎三（岡崎統合バイオ，教授）
藤井 浩（岡崎統合バイオ，助教授）

国外評価委員面接日：平成17年10月17日～18日

委員 Denis L. Rousseau
(Professor and University Chairman, Albert Einstein College of Medicine of Yeshiva University)

4-3-1 点検評価国内委員会の報告

評価委員会に先立ち，所外評価委員には，各研究グループの資料（業績リスト，主要論文別刷り）をあらかじめ送付した。評価委員会当日は，各研究グループにおいて約1時間の面接を，2名の所外評価委員それぞれが別途実施した。その後，全員が集まり，所外評価委員から全般的な感想，意見をいただくとともに意見交換を行った。

意見交換内容

所内委員C：本日は，お忙しい中統合バイオの外部評価においでいただきありがとうございました。先ほど，統合バイオに所属する3教官の研究内容を各グループ毎に点検していただきました。統合バイオには，もう一つ教授ポストがあります。これら4つの教官ポストを使って，今後統合バイオがどのように発展していったら良いのか，ご意見をお伺いしたいと思います。

所外委員A：木下先生がおられた時は，研究分野の面で広がりがありましたが，現在はある意味では3つの研究グループの研究分野が近接し，焦点がしぼられています。今後，統合バイオに所属する研究グループの研究分野を絞っていくのか，複数の視点から取り込んでいくのが問題だと思います。

所内委員C：個人的な意見では，4つのグループの中で，全部とは言わないが2つ以上のグループが協力関係をもてるような研究分野であったほうが良いと思います。

所内委員D：個人的には，どちらが良いか今はまだ結論がでていません。ただ，統合バイオが，学際領域であり国際的に発展しつつある分野の幾人かの研究者を集めて，日本の中心となることをめざしてもよいのではないかと思います。

所外委員A：現状では，日本における生物無機化学のセンター的役割を果たされていると思います。限られたポストをどのように配置して発展させるかは，いずれにせよ難しい問題だと思います。

所内委員D：ポストの数が少ないので，全部の分野をカバーすることは難しいと思います。せいぜい2つくらいの分野になると思います。

所外委員B：分子科学という成熟した分野での成果を，統合バイオに生かしていくことは大切であると思います。そのためには，どういう人をとるかが最も大切だと思います。分野を拘束してしまうのは，良くないと思います。組織を作る上では，人の問題が最も重要だと思いますが，その中で多少なり協力関係が作れるのが望ましいと思います。もう一つ，これまでにこの研究所が作ってきた財産，たとえば北川先生がやっ

てこれらラマンの研究などを、今後もうまく生かしていけないかと考えます。

所内委員 E：私も、バランスを考えながらもある研究分野の面で特化し、世界の中での統合バイオの存在価値を示すことが大切だと思います。

所内委員 D：私も人を重視して採用していくことが大切だと思います。

所内委員 C：分子研の研究グループの大きさは、2つのグループが協力すると大学での1講座に相当し、ちょうどいいサイズではないでしょうか。

所内委員 D：分子研では研究グループのサイズが小さいので、グループ同士が協力関係をもち相乗効果が得られる環境が必要だと思います。

所外委員 B：分子研では大学院生をコンスタントにとることが難しいので、グループ同士が協力関係をもつことが大切だと思います。

所内委員 C：ある程度特定分野に特化していると、「その分野の研究をするなら統合バイオ」というようになり、学生もとりやすくなると思います。

ところで、以前は統合バイオの人事選考を行うとき、統合バイオの教官が選考委員会に加わることはできませんでしたが、今度、統合バイオの教官が専門委員会レベルで選考委員会に加わるできるようになりました。その委員会で、どのくらい統合バイオの教官が発言権をもつべきか、ご意見をいただきたいと思います。

所外委員 B：私は、統合バイオの教官がかなり中心的に発言してしかるべきだと思います。統合バイオの教官が、統合バイオの将来についての意見を言い、その上で分野の違う方の意見を求めていくのが適当だと思います。まったく分野外の人だけで選考していくのは変ですね。統合バイオの教官の発言する場がないのは、論外ですね。

所内委員 C：以前の人事システムでは、人事委員会メンバーが個人的に統合バイオの教官に意見を求めることはありましたが、人事委員会のメンバーにバイオ関係の人が含まれていませんでした。それぞれの人事委員が、それぞれ違った専門の人からの意見を参考にして選考していくことは、危険だと思います。

所外委員 B：私もそう思います。個人の意見は、偏りがある場合が多いです。人事委員が専門でない場合、その個人的な意見を鵜呑みにして選考することがあり、危険です。統合バイオの教官などが人事委員に含まれれば、専門的な知識もあり広い視野から発言できるので、発言する機会を作る必要があると思います。

所内委員 C：私もそう思います。バイオを専門とする複数の人事委員がいれば、統合バイオからの委員も含め個々の発言が妥当かどうか判断できると思います。

所外委員 A：分子研の人事のやり方は、かなり大学とは違いますよね。決められた人事委員がすべての分野の人事を行っています。分子研設立当初は、それで良かったのですが、研究所の研究分野が広がると難しくなるのではないのでしょうか。大学などでは、採用する分野に応じてその分野の専門家を含めその都度選考委員会を組織します。

所内委員 D：今回の人事では、まだ最終的に決定はしていませんが、統合バイオの教官が専門委員として選考委員会に加わることになるでしょうから、その点は良くなったと思います。

所内委員 C：基生研や生理研の関わる統合バイオの人事では、それぞれ統合バイオの教授を含めた専門の近い人達の委員会が作られ選考が行われていますが、分子研の人事委員会は常置の委員会で、2年間同じ人がすべての分野の人事選考にあたります。分野によっては、選考が難しくなることもあります。今度の人事で、

統合バイオの意見がどの程度反映されるか見てみる必要があります。

それでは、選考委員の選考の仕方はどうでしょうか？ 現状では、統合バイオから5～6名を推薦し、そこから3名選考されます。

所内委員D：統合バイオに所属する教授が選考され、その上でさらに外部の専門家が加わるのがいいと思います。

所外委員A：最初の試みとしては、いいと思います。まずやってみる事です。

所外委員B：統合バイオは、分子研から見ればかなり境界領域にあると思います。だから統合バイオの教官が関わり、その上で外部の専門家が加わるのがいいと思います。そこにバイオの専門家が一人もいない時、ちゃんとした選考ができるか疑問が残ります。

所内委員C：従来の常置的な委員会による選考を続けていくのであれば、選考委員の選考の仕方考えたほうがいいと思います。

ここで話題を変え、次に統合バイオの予算の独立性についてのご意見を伺いたいです。今度、連携研究が採択され統合バイオの予算が初めてできました。これまでは独自の予算がなく、統合バイオとしての活動ができませんでした。統合バイオの予算がある程度与えられ、統合バイオの中で審議して活用していくような自由度がある方が、独立した組織としては望ましいと思いますが、いかがでしょうか？

所外委員A：連携研究の事で、いろいろな所長とお話する機会をもちましたが、一番気にされていることは、統合バイオへ出している研究室へのサポートの仕方が3つの研究所で違い、そのため共通のルールを作り予算を充てることが難しいという印象を持っておられると感じました。

所内委員C：統合バイオの研究室は、研究所の派生物だ、統合バイオで研究している人は自分の研究所の人だ、という認識があるのです。だから、統合バイオの各研究員の考え方も統合バイオのためにするのではなく、各研究所のためにするという考え方ができてしまうのです。この考え方は問題で、将来、統合バイオが1つの組織として評価を受けるのだという意識が、各研究員にないと困ります。統合バイオにcomingする予算が、ちゃんと配分されていれば問題ないのですが、3研究所に等分された後それにプラスして、統合バイオの各研究員に配られます。各研究員は、統合バイオという組織に予算が配分されている事を知らずに、全額研究所から配分されているように間違った解釈をする恐れが高いのが現実です。各所長は、自分のところのプラスが非常に大きいと思っています。だから発言権は各研究所にあると思っているのです。

所外委員B：ある程度独自の予算がないと、統合バイオの活動ができないと思います。単なる寄せ集めではなく、統合バイオを発展的に独立させるくらいの気構えでそれぞれの親研究所が応援していかなければいけないでしょう。それが、結局は親元の研究所も良くなることだと思います。新しい組織を作るときは、みんなが応援していくという気持ちでないとはいけません。親元の研究所が応援していく、そしてその組織が良くなるのが親元の研究所も良くなる、そういう気持ちでないとはいけません。そのためには、予算建てをすべきで、同じ敷地にいるのだから、話あえばできることだと思います。

所内委員C：それがなかなか難しいです。ルールが簡単にできません。3研究所の協力があれば、多くの問題が解決されると思います。

所外委員A：統合バイオの教官で、明大寺地区におられる方はいるのですか？

所内委員C：います。しかしその方は、今度他大学に異動されるので、その後、どうなるかはわかりません。しかしその方の後任についても我々が議論できればいいのですが、先ほどお話ししたような状況です。

所外委員 A：統合バイオの教授会などを通して、意見を反映させることができないでしょうか？

所内委員 C：発言できると思いますが、発言したいという動きを作っていけないとできないと思います。

所外委員 A：一つの場所に集まっていると、独自の予算を作りやすいと思います。

所内委員 C：統合バイオの建物ができた時でも、統合バイオの人が入るという考え方ではなく、各研究所に3分の1ずつの領地があり、そこにだれが入るかは各研究所の問題だという考え方がありました。そのため、一つにまとまりにくかったのです。3研究所の所長が新しい施設を育てよう、サポートしようという姿勢で運営していただけたらいいのですが、それぞれが利権を伸ばそうという感じではうまくいきません。財政的にも統合バイオの運営費のようなものを作ってもらい、統合バイオのみんなでその使い方を議論していけば、求心力も生まれてくると思います。

最後にそれ以外で、お気づきの点がありましたら、何でも結構ですのご自由にご意見をお願いします。

所外委員 A：統合バイオの分子研以外の先生とお話する機会をもちましたが、統合バイオの分子研以外の方の研究方向として分子レベルでの研究を展開していきたいという話を聞き、それは分子研と共通面があるのでないかと思いました。これは、今後、統合バイオを世の中にアピールする上で、大きなポテンシャルを持ったものと思いました。

所外委員 B：私が期待することは、こういう研究所だからこそ、今までもそうでしたが、今後も基礎的な研究を伸ばしていただきたいと思います。ちゃんとした基礎的研究を行えるところは少ないです。大切な基礎研究を伸ばしていただきたいと思います。特に統合バイオは、今後の学問の発展の一つの方向だと思います。先ほどの話に戻りますが、3つの研究所が、統合バイオを応援していく、そしてできれば将来的には独立できるように応援していただきたいと思います。そういう意味では、予算面のサポートをしていただければ、もう少し独自の活動ができると思います。せっかくこんなにいいものを作られたのですから、場所はずでにできているので、人とお金を含め3つの要素を考えて、ここを発展させていく必要があると思います。

所内委員 C：ありがとうございました。私も、3研究所が統合バイオを育てるつもりで、そして育てたことが3研究所の功績であるという気持ちでいて欲しいです。

4-3-2 国内委員の意見書

委員 A

平成17年11月2日に統合バイオサイエンスセンターを訪れ、分子科学研究所兼務教員（北川禎三教授、青野重利教授、藤井浩助教授）より研究の進捗状況を伺い、岡崎統合バイオサイエンスセンター分子研兼務教員グループの現状と将来について討論した。

統合バイオサイエンスセンターは分子科学研究所（以下分子研）、基礎生物学研究所、生理学研究所が共同して創設したセンターであり、法人化後も3研究所が共同して運営する研究センターとなっている。法人化により岡崎国立共同研究機構が廃止されたため、機構内での位置づけが不明確になっていると伺った。本研究センターでの分子研グループの役割は分子科学の立場から生命科学に寄与していくことであり、この間の成果は生物無機化学を中心に本センターに重要な貢献をしていることを示す。一時、木下一彦教授を迎えて、分野を広げる試みを行なったが、同教授の転出によりその試みは休止している。

研究内容においては、生物無機化学、特にヘムタンパク質の分野において共鳴ラマンスペクトルを用いて世界をリー

ドする研究業績をあげ、分子研および統合バイオサイエンスセンターを世界、および日本における生物無機化学研究の中心となった。ガスセンサーヘムタンパク質に関するグループ内の共同研究は大きな成果を上げている。本グループは常に新しい方法の開発を通じて、新しい分野の開拓に成功してきたが、高速時間分解紫外共鳴ラマン分光や高感度フーリエ赤外分光法を用いることによりヘムからタンパク質そのものへ解析対象を広げ、さらにタンパク質のフォールディング・アンフォールディング機構の解析や、アミロイド形成機構の解析など新しい分野に切り込んでいる。一方では統合バイオサイエンスセンターに相応しく生物学的手法と化学的手法を巧みに用いることにより、ヘムタンパク質の構造と機能にセンサータンパク質という視点から新しい領域を開いた。特にCooAに関する研究は見事である。その研究は酸素センサー等他のタンパク質に展開しつつある。また、酸化反応に関与する非ヘム金属酵素反応中間体モデルの合成、シアンイオンをプローブとしたヘムタンパク質活性中心の特性と機能の関係等を独自の立場から明らかにする研究でも実績を上げている。

これらの研究実績に鑑み、統合バイオサイエンスセンターの分子研兼務の研究グループは全体として分子科学の手法を用いて世界の研究を牽引する重要な役割を果たしていると判断できる。この研究グループの研究分野は世界的にみても、国内的にみても依然として生物無機化学の重要な分野となっている。このことは当該研究グループ出身の研究者が国内の多くの大学・研究機関の中核的研究者になっていること、北川教授の業績リストから分かるように国内外の研究者が共同研究をしに訪れており、それが研究成果として結実していることに現れている。

統合バイオサイエンスセンター分子研兼務教員グループにとって木下彦教授が早稲田大学に異動したことは大きな損失であった。木下教授はバイオサイエンスセンターの公募で採用されており、公募の内容と同センターの現実の間の矛盾がその原因の一つになっていると伺っている。折角の優秀な人材がその力を十分に発揮することなく、センターを去らなければいけなくなった事実は今後への重要な問題を提起していると思う。これは本質的には分子研だけの問題ではなく、岡崎の3研究所全体の問題である。しかし、分子研は当事者でもあり、研究所として可能な努力をしていく必要があるのではないだろうか。法人化により問題は複雑になっており、誰もが納得する解決法がすぐに見つかるとは思えない。しかし、3研究所の夢を担ってスタートした統合バイオサイエンスセンターとそこで働く研究者の研究活動が本来の目的を達成できるようサポートしていくべきではないだろうか。まずは十分なコミュニケーションが取られることが重要である。これらの点はさまざまな困難を克服して、現在の分子科学の研究分野を切り開いてきた分子研には十分可能なことだと思う。

委員 B

全体評価

岡崎統合バイオサイエンスセンターの生体分子研究部門（北川研）、生物無機化学研究部門（青野研）および生体物理研究部門（藤井研）は分子科学研究所に源を持つ研究部門である。分子科学は多くの科学の中でも最も成熟した学問の一つであり、科学の変化によって分子科学の伝統的な境界は大きく広がり、とりわけ生物・医学との境界領域に新しいフロンティアが期待されている。当該研究部門は真に「生物の理解と生体の制御」を解明するため、分子科学と生命科学を融合することによって、新しい領域を開拓しようとしている。具体的には、タンパク質高次構造による機能制御と紫外共鳴ラマン分光、呼吸系および光合成反応中心における電子移動プロトン輸送のカップリング機構、センサーヘムタンパク質のセンシング* および情報伝達過程、新規な分子センサータンパク質の単離とその性質の解明、小分子をプローブとした金属酵素の活性中心の構造と機能の相関などの研究課題が精力的に展開され、数多くの優れた研究成果を挙げている。分子科学と生命科学を融合させ、生命の秘める本質的原理の解明と理解を目指す岡崎統合

バイオサイエンスセンターならではのチャレンジ精神溢れる研究の取り組みである。最先端の装置・施設を有し、センター内外との共同研究も活発に行われている。この分野は新しい学問領域として国内外において注目されている。いわゆる「ケミカルバイオロジー」もこの研究領域の一つであり、基礎的研究でありながら将来、医学応用など社会貢献も期待できる楽しみな分野と考えられる。これ迄の研究所の枠を超えた新学問領域の開拓という統合バイオサイエンスセンターの設置理念を実現するため、世界を先導する優れた研究成果を出すべく大いに邁進していただきたいものである。また親元の分子科学研究所に対しては、新しい組織である統合バイオサイエンスセンターの自立と発展を促すためにも人的・資金的に最大限の助力をお願いしたい。

4-3-3 国外委員の評価

原文

1. Comments and Advice about the Department

The Department from the IMS in the Integrative Bioscience Center has been highly productive over the past five years. At present, the Department consists of three research groups: Those of professors Fujii, Aono and Kitagawa. Each group has complementary research skills and interest and they have selected projects to study in which each can contribute in a very significant way.

This is clearly a case where the whole is greater than the sum of the individual parts and it represents the type of collaboration for which many institutions strive but very few achieve. The combination of having expertise in model complexes, in several protein systems and state-of the art spectroscopy in the type of mixture that leads to very sound and insightful studies. There are two central aspects of the Department that have led to its success: The Laser Spectroscopy Resource Center and a well-defined and collaborative focus on heme protein chemistry.

The Laser Spectroscopy Resource Center

The centerpiece of the department is the Laser Spectroscopy Resource Center built up over the past several years by Professor Kitagawa. As I examined the Center, it became clear that it is a world class center that is utilized not only by Japanese investigators but by investigators from all over the world. This Center has served as an attraction point for international scientists to carry out innovative research. Indeed, Professor Kitagawa lists 50 investigators from all over the world who have collaborated on research projects at the Center over the past five years. When they come to the Center it is both valuable for them and for the students and the scientists in the IMS as each learn from each other. It also affords opportunity for international scientists to learn about all of the projects that are going on in the Integrative Bioscience Center. We have such Centers in the United States that are supported by the National Institutes of Health. They are the research Resource Centers and they make available high technology instrumentation in all areas of Bioscience to the scientific community. They are highly valued as it is very important to have in one place a large selection of specialized equipment in order to make rapid advances in the competitive scientific fields. Among the ~70 Research Resource Centers in the United States there are only two which have some of the capabilities of that of Professor Kitagawa-the one at MIT under the leadership of Professor Michael Field and the one at the University of Pennsylvania under the leadership of Professor Robin Hochstrasser. I was a member of the review committee for the last evaluation of the Center at the University of Pennsylvania and it received an outstanding evaluation, but the Center at Pennsylvania is no better than that assembled and directed by Professor Kitagawa. It is my understanding that the present plan is to deconstruct Professor Kitagawa's Center when he retires.

I am sure that all of the equipment will be well utilized in other laboratories, but a cohesive Center will be permanently lost. Instead, it is my recommendation that the IMS maintain the Laser Spectroscopy Center and a new Director for it is brought in to run and expand it even more. I believe that a technological advantage, presently enjoyed by Japanese scientists, will be lost if the Center is dismantled.

A Focus on Porphyrin and Heme Protein Chemistry

The primary work that goes on in the Department focuses on porphyrins and heme proteins. Hemes are arguably the most important and versatile redox centers in Biology. This is because they can play so many diverse roles, ranging from electron transfer, to oxygen storage, to oxygenation of organic substrates, to generation of signaling molecules, to serving as molecular biosensors, to name but a fraction of their many functions. Most significantly, work coming from the Department has made significant advances in many different areas of heme protein chemistry, such as heme based gas sensors, oxygen activating proteins, high-valent heme intermediates and heme degrading proteins. In each of these cases the work has been published in the leading journals such as the *Journal of the American Chemical Society* and the *Journal of Biological Chemistry*. Furthermore, it is important to note that their studies have received international recognition resulting in invitations to speak at major conferences and invitations to write in-depth review articles about their work, such as those written for the *Accounts in Chemical Research* and *Coordination Chemistry Reviews*.

Obviously, all areas of biochemistry/biophysics cannot be covered by only three research groups. It is necessary to be selective in choosing projects. If each of the research groups were working on projects that were unrelated, they would not be able to achieve such a high impact. By focusing on metallo-enzymes and specializing in heme proteins, the Department has maximized the impact it can have given its limited size.

Future Directions

I recognize that soon the Department will change as Professor Kitagawa will retire and Professor Fuji will move to a different institution. When they are replaced, it should be with individuals who have interests that complement each other so as to achieve the same type of synergy that has existed in the past. Continuing to focus on some aspects of metalloproteins would be a wise direction to follow and it will fit in with the interests of Professor Aono. In addition, metalloproteins lend themselves to a variety of different types of studies as they offer spectroscopic “handles” to study the functional properties of the protein. Furthermore, their diversity allows for studies to focus on inorganic, organic or biochemical properties. Thus, it will fit in with the general goals of the IMS that have a very broad scope.

Another important direction to consider as a centerpiece of the Department is that of membrane proteins. This is a research area that has already been initiated by Professor Kitagawa through the research grant he wrote that establishes a collaboration with the Institute for Protein Research at Osaka University. The Program entitled “Assembly and reconstruction of membrane proteins and cellular molecular machineries” is a very important. Membrane proteins make up about one third of the proteome of the cell. Nevertheless, the understanding of their structures, mechanisms and interactions are far-less well understood compared to those of water-soluble proteins, owing to the difficulties in dealing with membrane-bound proteins. The need for new work in this area was highlighted in the December 1, 2005 issue of *Nature* in which an “Insight” series of papers was devoted to Membrane Biology. Over the next several years, many new developments are anticipated in the understanding of membrane proteins so it could be a very

fruitful research area for the Department from IMS in the Integrative Bioscience Research Center.

In Summary, it will be most important the Department from the IMS in the Integrative Bioscience Center to maintain a highly collaborative group of investigators who have complementary strengths and common interests in some significant problems. I also wish to re-emphasize the importance of maintaining the Laser Spectroscopy Research Center. It is through such centers that major advances can occur and with which both Japanese and international scientists can have a technological advantage over those who do not have access to such a state-of-the-art center.

Sincerely yours,

Denis L. Rousseau, Ph. D.

Professor and University Chairman

Department of Physiology and Biophysics

2. General comments about the IMS

The IMS has an outstanding reputation in the scientific community. As we move ahead in the new century it is appropriate to evaluate the types of research efforts that will be needed to maintain its high reputation. In the US, there are clear changes that are happening in the sciences especially in chemical, biochemical and biophysical fields. If you look back several years ago at various Science and Technology reports, each discipline and sub-discipline was isolated. This has dramatically changed. It is now well recognized that advances in the future will depend on collaborative work in which scientists with very different skills will come together to address problems.

Research in the 21st Century

The new approach for scientific research is being stressed in both the biological and chemical sciences fields. For example, in *The NIH Roadmap* for biological research in the 21st century presented in 2003 by Elias Zerhouni, the NIH director, [*Science* **302**, 63 (2003)], one of the three themes is “Research Teams of the Future.” The idea is that they must be far more interdisciplinary than in the past to address complex problems. To devise and use state-of-the-art technologies will require the expertise of physical scientists, biological scientists, mathematicians, engineers, computer scientists and others. One of the other themes is “New Pathways to Discovery” in which advances will depend on an extensive “toolbox” in which researchers will have access to new technologies, databases, and other new resources.

In the Chemical Sciences a similar need for interdisciplinary is being stressed as described in the National Academy of Science report published in 2003 entitled “*Beyond The Molecular Frontier: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering.*” In the Executive Summary of this over 200 page report it is stated: “We conclude that science has become increasingly interdisciplinary, and it is critical that the disciplinary structures within our fields not hinder the future growth of chemical sciences into new areas. Interdisciplinary refers here both to the strong integration from the molecular level to the process technology level within the chemical sciences and to the intersections of the chemical sciences with all the natural sciences, agriculture, environmental science, and medicine, as well as materials science, physics, information technology, and many other fields of engineering.”

The Integrative Bioscience Research Center

It is clear from the Direction for future research discussed above that the leadership of the IMS was very wise and forward-thinking when it established the Integrative Bioscience Research Center.

Bringing together groups from the IMS, NIBB and NIPS is exactly the way future research teams can make significant new discoveries and advances. One would hope to have strong collaborative interactions within each Institute as well as interactions between those from the different Institutes.

Certainly, the three from the IMS, Professors Kitagawa, Aono and Fujii, have achieved to goal of establishing strong collaborations between their research groups. However, it appears that there have not been strong collaborations between the groups from the different Institutes and in the future greater efforts should be made to establish collaborations between the scientists from these different Institutes. In addition, this is a perfect time to establish strong interactions between the Integrative Bioscience Research Center and the Research center for Molecular Scale Nanoscience and Coordination Chemistry.

Research Directions

The directions for the research programs should be established by two criteria. 1. What are important problems that can be addressed by the available personnel with the available resources; and 2. Considerations should be given in the selection of problems in which the strongest overlap between the groups can be achieved. These two have been met in the past among the IMS researchers as the focus on heme proteins with the combination of advanced spectroscopy with expertise in several heme protein systems and model compounds gave outstanding synergy that has led to significant advances in the understanding of these systems. Because of the vast number of physiological functions involving heme proteins, which play such extensive and diverse roles in biology it should be an area in which collaborations between the research groups from the IMS and those from the NIPS and the NIBB could establish fruitful that could take the research to a new level.

The general area of heme protein structure, function and spectroscopy also lends itself nicely to research on single molecule processes and nanotechnology. As you well recognize, single molecule studies and nanotechnology are important new scientific areas that will have an enormous impact in the future. Indeed, the advances from research in this area are so highly regarded that the National Institutes of Health in the US has established an “Alliance for Nanotechnology in Cancer” in which it is projected that through the power of nanotechnology there is goal to eliminate suffering and death from cancer by the year 2015. While I think this is too optimistic a promise, it does underscore the great expectations from this type of research. Nanotechnology is a wide open field and is a general area in which research groups in the IMS could establish fruitful collaborations with the members of the Research Center for Molecular Scale Nanoscience and Coordination Chemistry. The ongoing work dendrimers in the group of Professor Kitagawa could fit well into such a collaboration as dendrimers are a very important class of nanomaterials.

The existing expertise in Raman spectroscopy and fluorescence can be adapted to study kinetics, structure and protein folding, for example, on the single molecule level.

Another important area to consider is that of membrane proteins. This is a research area that has already been initiated by Professor Kitagawa through the research grant he wrote that establishes a collaboration with the Institute for Protein Research at Osaka University. Membrane proteins make up about one third of the proteome of the cell. Nevertheless, the understanding of their structures, mechanisms and interactions are far-less well understood compared to those of water-soluble proteins, owing to the difficulties in dealing with membrane-bound proteins. The need for new work in this area was highlighted in the December 1, 2005

issue of *Nature* in which an “Insight” series of papers was devoted to Membrane Biology. Over the next several years, many new developments are anticipated in the understanding of membrane proteins so it could be a very fruitful research area for IMS and could involve several research groups.

In order to maintain high research standard, it is necessary to have a large number of young people around. Apparently, the Grant for the membrane protein studies obtained by Professor Kitagawa has been used to support several post-docs and students. This is extremely important. The young scientists are the ones who do the work and bring in fresh ideas. Greater support for post-docs by the Institute would be a way to accelerate the research programs and cultivate new ideas and directions.

In Summary, I want to congratulate you for establishing the Integrative Bioscience Research Center and re-emphasize the importance of continuing strong support for the Center and advances that may be made by further enhancing collaborative projects. The research directions should be selected by their importance for the advancement of scientific understanding and for their potential for fruitful multidisciplinary collaborations.

Sincerely yours,

Denis L. Rousseau, Ph, D.

Professor and University Chairman

Department of Physiology and Biophysics

訳文

1. 岡崎統合バイオサイエンスセンターに関するコメントならびにアドバイス

岡崎統合バイオサイエンスセンターの中の分子科学研究所を兼務する研究部門は、過去5年間にわたり高い業績を挙げている。現在、当該部門は北川教授、青野教授、藤井助教授の3つの研究グループから構成されている。各研究グループは、それぞれに相補的な研究手法ならびに研究への興味を有しており、互いに重要な寄与ができるような研究テーマを設定し、研究を行っている。これにより、当該部門は個々の研究グループの単なる足し合わせ以上のものとなっており、多くの研究機関が努力しながらもなかなか達成することが困難である共同研究のよい例となっている。モデル化合物、種々のタンパク質、および精緻な分光学的手法の専門家が集まることにより、堅実で洞察力に富んだ研究を進めるための組み合わせとなっている。当該研究部門の成功例として次の2点を挙げることができる。それは、レーザー分光学装置のセンターとしての役割とヘムタンパク質に焦点を合わせた共同研究体制である。

レーザー分光学装置のセンター

当該研究部門の中心の一つは、これまでに北川教授により構築されたレーザー分光学装置のセンターとしての役割である。今回の評価において、本センターが日本の研究者だけでなく、世界各国の研究者に利用されていることが良く分かった。本センターは、優れた研究を実施するため、世界中の研究者を引き付ける役割を果たしている。事実、北川教授は過去5年間の間に、世界各国の50名の研究者と共同研究を実施している。これら共同研究者が訪れることは、互いに学ぶことができるため、彼等自身にとって有益であるのみならず、分子研の学生、研究者にとっても有益である。また、世界各国の研究者に、岡崎統合バイオサイエンスセンターで実施されている研究を知ってもらう良い機会でもある。アメリカ合衆国でも、NIHから助成を受けている同様なセンターがある。これらは研究機器センター

(Research Resource Centers) であり、バイオサイエンスのあらゆる分野において、研究コミュニティに対し高度な実験装置の使用機会を提供している。競争的な環境にある科学分野において、素早く最先端の状況を維持するためには、ある 1 ケ所に特殊な機器をまとめて設置することが非常に重要である。アメリカ合衆国にある 70 ケ所程の Research Resource Centers の中でも、北川教授の構築したものに匹敵するものは、2 ケ所しかない。1 つは、マサチューセッツ工科大学の Michael Feld 教授のもので、もう 1 つはペンシルバニア大学の Robin Hochstrasser 教授のものである。私は、ペンシルバニア大学の当該センターの評価委員の一員であった。ペンシルバニア大学の当該センターは、評価において高い評価を得たが、ペンシルバニア大学の当該センターは北川教授の構築したものより優れている訳では無い。北川教授の退職に伴い、北川教授の構築したセンターもなくなってしまうと聞いている。もちろん、現在ある機器は他の研究室で有効に利用されるであろうが、センターとしての役割はなくなってしまう。私は、分子研が管理者を置き、レーザー分光学センターを維持、発展させることを提案したい。もし本センターを無くしてしまえば、現在日本の研究者が享受している技術的な優位性は失われてしまうものと考える。

ポルフィリンおよびヘムタンパク質の化学への集中

当該部局では、ポルフィリンおよびヘムタンパク質に焦点をあてた研究が行われている。ヘムは、生物学において最も重要であり、広く利用されている酸化還元反応の活性中心である。その理由は、電子伝達、酸素貯蔵、有機基質の酸素化、シグナル分子生成、分子バイオセンサー等の多彩な役割を果たすことができるからである。当該部局における研究において、ヘム含有型センサー、酸素活性化タンパク質、高原子価ヘム反応中間体、ヘム分解などヘムタンパク質に関する様々な研究分野において顕著な業績が挙げられている。これらの研究成果は、*J. Am. Chem. Soc.*、*J. Biol. Chem.* などのトップジャーナルに掲載されている。さらに、主要な国際会議での招待講演、*Accounts in Chemical Research*、*Coordination Chemistry Reviews* 等の総説誌への執筆を依頼されるなど、これらの研究成果は国際的にも認知されていることは特筆に値する。生物化学、生物物理学のすべての分野を 3 グループでカバーすることが不可能であることは明らかである。研究プロジェクトを選択する際には、いくつかの選択肢がある。もし、それぞれの研究グループが互いに関係の無いプロジェクトを進めた場合には、存在感を示すことは難しいであろう。金属タンパク質、なかでもヘムタンパク質に集中することにより、当該部局は限られたサイズの中で、存在感を最大限に発揮している。

将来の方向性

北川教授は退職、藤井助教授は将来的には他に異動しなければならないため、当該部局の構成は早晩、変化することになる。二人の後任を選ぶ際、これまでのように互いに相乗効果が望めるような候補者を後任とすべきであろう。金属タンパク質関連の研究に焦点をあて続けることが賢明な方向性であると思われるし、このことは残る青野教授の研究上の興味とも一致している。さらに、金属タンパク質は、その機能を研究する際に分光学的な取扱いが可能であるため、様々なタイプの研究を行うことが可能である。また、その多様性から、無機化学、有機化学、あるいは生化学的な取り組みが可能でもある。幅広い視点を有する分子研の目指すところとも一致するであろう。

当該部局で取り組むべき別の重要な方向性として、膜タンパク質がある。これに関しては、北川教授が中心となり大阪大学蛋白質研究所との間ですでに連携研究が開始されている。「膜タンパク質の構築、再構成と細胞分子装置」と題された研究プログラムは重要なものである。膜タンパク質は細胞中の全タンパクの 3 分の 1 を占めている。にもかかわらず、その取り扱いの困難さ故に、膜タンパク質の構造、機構、相互作用などに関する理解は、可溶性タンパク質に比べてはるかに遅れている。本研究分野における新たな研究の必要性は、*Nature* の 2005 年 12 月 1 日号（本号の

“ Insight ” の特集が膜生物学にあてられている)でも取り上げられている。向こう何年間かの間に、膜タンパク質の理解に関しては多くの新展開が予想され、分子研を兼務する教員から構成される岡崎統合バイオサイエンスセンターの部局にとっても魅力有る研究領域と成り得るであろう。

最後に、分子研を兼務する教員から構成される岡崎統合バイオサイエンスセンターの部局において、重要な問題に対して共通の興味を持ち、相補的な役割を果たし得る、共同研究グループを維持することが最も重要である。レーザー分光学センターを維持することの重要性について、再言しておきたい。研究に大きな進展を得ること、このような優れたセンターを利用できない研究者に比べて、国内、国外の研究者が技術的な優位性を享受できるのは、まさにこのセンターを通じてのものである。

2. 分子科学研究所に関する一般的提言

分子研は科学コミュニティにおいて高い評価を得ている。新世紀を迎え、その高い評価を維持するためにはどのようなタイプの研究努力が必要であるかを検討することが適当である。アメリカでは、科学分野、特に化学、生物化学、生物物理分野において明らかな変化が現れている。数年前の科学、技術に関する報告書を振り返ってみると、それぞれの学問分野はそれぞれで孤立していた。このような状況は決定的に変化している。現在では、大きく異なった技能を有する科学者が共同して問題に取り組む共同作業によって、将来的な発展がもたらされるものと認識されている。

21世紀における研究

生物科学および科学分野においては、科学研究に関する新たな取り組み方に関する言及がなされている。例えば、2003年にNIHのディレクターであるElias Zerhouniによって示された21世紀の生物学的研究に関する「NIHロードマップ」(*Science* **302**, 63 (2003))によれば、そこでの3つの主題の一つは「Research Teams of the Future」である。この論点は、複雑な問題に対応するためには、これまでよりもより境界領域的でなければならないということである。洗練された技術を考案し、それを利用するためには、物理科学者、生物科学者、数学者、技術者、コンピューターサイエンティスト等々の専門知識が要求される。別の主題として、「New Pathways to Discovery」が挙げられる。科学技術の発展は、包括的な「工具箱 (toolbox)」、すなわち、研究者が利用する新規な技術、データベース、および種々の新規な研究資源などに拠るところが大きいであろう。

化学分野においても、「Beyond the Molecular Frontier: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering」と題し、2003年に米国科学アカデミーから出版された報告書で述べられているように、同様な境界領域的研究の取り組みへの必要性が強調されている。200頁以上におよぶ本報告書中、概要において、次のように述べられている：「科学は益々境界領域的なものに成りつつある。既存の学問体系が、新分野に向かっの化学の将来的な発展を阻害しないことが重要である。ここで言う境界領域とは、化学分野における分子レベルからプロセス技術レベルに至るまでの統合、化学とその他の自然科学、農学、環境科学、薬学、材料科学、物理、情報工学、および種々の工学分野との相互乗入れを指している。」

岡崎統合バイオサイエンスセンター

上記で述べたような将来的な研究の方向性の議論からも、岡崎統合バイオサイエンスセンター設立に際しての分子

研のリーダーシップは非常に賢明であり未来志向であったことは明らかである。分子研，基生研，生理研から互いに研究グループが集まっていることは，重要で新規な発見，進展をもたらすことができる将来的な研究形態への確かな道筋である。各研究所内，ならびに研究所間での強固な連携，共同研究が望まれる。分子研に所属する3教員，北川教授，青野教授，藤井助教授は，それぞれの研究グループ間での強固な連携，共同研究体制を確立している。しかしながら，他の研究所との間の共同研究体制はそれほど確立はされておらず，今後，他の研究所との間の共同研究体制をさらに強める努力が望まれる。さらに付け加えるなら，今が，岡崎統合バイオサイエンスセンターと分子スケールナノサイエンスセンター，錯体グループとの連携を強化する好機であると考えられる。

研究の方向性

研究プログラムの方向性は，次に述べるような二つの判断基準に従って決定されるべきである。研究者が利用可能な研究資源によって追求し得る研究課題で重要なものは何か。研究グループ間での強固な連携が可能であるような研究課題の選択について考慮すべきである。分子研を兼務する岡崎統合バイオの研究グループでは，上記二つの判断基準に合致した成果をあげている。すなわち，これまで先進的な分光学的実験手法と様々なヘムタンパク質ならびにモデル化合物に関する専門的知識とを駆使し，ヘムに関する研究に焦点を当てることにより大きな成果を挙げるといふ素晴らしい相乗効果を示している。ヘムタンパク質の場合も含め，生理機能には多種多様なものがあり，生体系において多種多様な役割を果たしている。したがって，このような研究分野においては，分子研，基生研，生理研の研究グループ間での連携，共同研究により，研究をさらなる新しいレベルに展開し得るものと思われる。

ヘムタンパク質の構造，機能，分光学的な研究は，単一分子プロセスやナノテクノロジーに関する研究にも役立つものである。良く知られているように，単一分子プロセスやナノテクノロジーに関する研究は，将来的に非常に大きなインパクトを持った新しい研究分野である。この研究分野の発展は非常に重要であるとみなされており，米国 NIH は2015年までにナノテクノロジーを用いた癌制圧を目標としたプロジェクト，「Alliance for Nanotechnology in Cancer」を設立している。この目標設定はかなり楽観的であると思われるが，このような研究分野への大きな期待を強調するものである。ナノテクノロジーは前途有望な研究分野であり，分子研を兼務する岡崎統合バイオの研究グループと分子スケールナノサイエンスセンター，錯体化学グループとの実りある連携が可能な分野でもある。デンドリマーは非常に重要なナノ材料の一種でもあることから，北川教授の研究グループにおいて進行中のデンドリマーに関する研究は，上記の連携を考える際にも適当なものであろう。北川グループのラマンおよび蛍光分光法に関する専門的知識は，単一分子レベルでの反応速度論，構造，タンパク質フォールディング等の研究に適用可能である。

今後考慮すべきもう一つの重要な研究分野は，膜タンパク質に関する研究である。本研究分野の研究は，既に北川教授が中心となり，大阪大学蛋白質研究所との連携研究としてスタートしている。膜タンパク質は，全タンパク質の3分の1を占めているにもかかわらず，膜タンパク質の取り扱いの困難さにより，それらの構造，反応機構，相互作用等の理解は可溶性タンパク質に比べて大きく遅れている。本研究分野における新たな取り組みの必要性は，「膜生物学」を特集として取り上げた，*Nature* の2005年1月号で大きく取り上げられている。向こう何年間かの間に，膜タンパク質の理解に関しては多くの新展開が予想され，分子研にとっても魅力ある研究領域と成り得るであろう。

高い研究水準を保つためには，多くの若い研究者の存在が必要不可欠である。北川教授を中心とする膜タンパク質に関する連携研究においては，数名のポスドク，学生に対し研究費が援助されている。このような取り組みは，非常に重要である。若手研究者は研究実施の主体であり，研究に新しいアイデアを持ち込むものである。研究所によるポスドク雇用の充実，研究プログラムを進展させ，研究の新しい方向性をもたらす方策であろう。

最後に、貴研究所が岡崎統合バイオサイエンスセンターを設立したことに敬意を表したい。また、岡崎統合バイオサイエンスセンターならびに、さらなる共同研究の促進への強力で継続的な支援の重要性を再度強調しておきたい。研究の方向性は、科学的理解の向上、境界領域での実り多い連携の可能性などの観点からみた重要性によって選択されるべきである。

4-4 運営顧問による点検評価

4-4-1 小間 篤運営顧問

分子科学研究所への提言

分子科学研究所（以下分子研と略す）の運営顧問会議のメンバーの一人として、提言をさせていただく。以下にも述べるが、国立大学並びに大学共同利用機関の法人化とともに、日本の学術研究、高等教育のあり方が大きく変わりつつあり、その行方は不透明な部分が多い。その中で分子研のあり方についてもよく検討し、次の体制、戦略を立てるべき時期にあると思う。

組織

岡崎統合バイオサイエンスセンターの発足により、明大寺と山手の両地区にまたがって分子研のアクティビティが展開される形になった。さらに、新たな定員拡充が容易でない国の財政状況下で統合バイオセンターの発足がなされた結果、自分の所属する系とは異なる系の主幹を併任するなどのいびつな構造をとることが余儀なくされている。この問題の解決の策として、分子研内に置かれた系・施設のあり方検討会では、現在の研究系を廃し、研究所の組織を3から4の研究領域に大きく分け、研究領域はいくつかの研究部門と関連施設から構成する一方、明大寺、山手地区にまたがる研究領域も作る計画が提案されている。定員の拡充が今後も見込めない現状を考えると、上記の案は大変現実的な案と思う。更に細部をつめた検討を進めていただきたい。

分子研は自然科学研究機構の中に置かれた研究所として法人化がなされた結果、5研究所を束ねた機構の中での一体的運営が求められることになった。しかし現実には、機構本部が置かれている東京神谷町と研究所が置かれている三鷹、岡崎、土岐とは地理的にも離れており、相互の行き来には相当の時間を要する上、研究所間の研究分野、適切な運営のあり方に大きな違いがあって、一体的運営が無理な点も多く、このままでは機構法人の実を挙げて行くのはむずかしいように思われる。分子研だけでは解決できない問題であるが、今後、よりゆるい研究所連合の形を目指した機構の構造改革を目指して行くことが必要であろう。

人事

大変残念なことであるが、法人化とともに、運営費交付金の中の人件費が毎年1%ずつ減額されていく仕掛けが導入された。その結果、常勤教職員の数を毎年減少させていかなければならなくなり、この対応策を考える事が是非とも必要となっている。競争的資金を導入して博士研究員などの任期付きポストを用意することでそれを補う考え方もあるが、任期後のキャリアパスの設計が十分なされておらず、有能な研究者を博士研究員に迎えることがむずかしい状況が顕在化しつつある。腰を据えて優れた研究成果を挙げてテニユア付のポジションに移っていく事を定着化させるには、多くの博士研究員のポストのような3年程度の短い任期ではなく、任期付きであっても最低5年以上の任期があり、当初設定された任期後も2年程度の猶予が与えられるポジションが必要と思われる。分子研は以前から助手ポストについては、上記に近い運用をしてきているが、上述のように人件費削減とともに、この助手ポストについても減少を避け得ない状況である。これを補うには、競争的資金の間接経費部分の一体的運用により、個々の競争的資金にリンクした任期ではなく、研究所全体（ないし機構全体）で最低5年以上の任期を保証するポストを作っていくことが一つの方法かと思われる。

共同利用

国立大学及び大学共同利用機関の法人化により、各法人ごとに最適化する仕組みは導入されたが、各法人ごとでなく、国全体の学術進展の観点から最適化する仕組みも同時に導入すべきであったのに、それが十分なされていないのは、大きな問題である。制度設計の観点から言えば、後者については、大学共同利用機関法人がその役割を担うべきだと考えられ、大学共同利用機関法人は、共同利用について今まで以上に、配慮することが求められていると思う。分子研は、UVSOR やスーパーコンピュータ等、一大学では整備、維持がむずかしい大型施設や、分子科学分野の先端的研究機器を、全国の大学研究者の利用に供しているが、今後はそのようなハードウェアの共同利用だけではなく、日本の分子科学の発展に必要な各種研究プロジェクトの提案、国際会議の主催などを率先して進め、法人ごとに閉じた体制を横断する仕掛けを積極的に提案し、国に必要な予算を要求していく事が求められよう。

大学院教育

分子研は総合研究大学院大学の基盤研究機関の一つとして、大学院教育にも大きな努力をしてきた。分子研における研究のアクティビティの高さに惹かれて、全国から優秀な大学院生が分子研に集まり、分子研において研究指導を受け、博士の学位を得た後、多くの修了生が国内外の大学・研究機関において活躍している。平成17年度からは従来の博士課程後期3年制から、博士課程前期も含む5年一貫制に移行したが、入学院生の数にややかげりが見られる。この傾向が平成17年度のみのものであれば問題ないが、国立大学の法人化後、各大学が大学院生数の確保に走る傾向のありで、一度分子研の専攻に入学を決めた学生が、出身大学の指導教官の強い勧めにより、その大学の大学院への進学に変えるなどの事例が出ていることを考慮すると、相当の努力をしなければ、来年度以降もこの傾向が続くおそれがある。毎年若い優秀な学生が分子研の専攻に入学し、分子研で研鑽を積むことは、分子研の教員にとっても大変良い刺激となりプラスになる点が多いので、定常的に大学院生が分子研に来るようにすべく、さまざまな努力をすべきである。各大学の非常勤講師の要請を積極的に受け、学部学生に魅力的な授業をして、分子研の大学院専攻を目指すようにリクルートすることも一つの方法であろう。分子研における最先端の研究のアクティビティを理解して、そこで学位を取りたいと強く希望するには、場合によっては学部段階では無理かもしれないので、博士課程前期の入学者だけでなく、博士課程後期からの編入学生が増えるようにすることも、もう一つの方法であろう。

以上思いつくままに、いくつかの提言をさせていただいたが、分子研のアクティビティの向上に役立てていただけたら幸いである。