

4 . 点検評価と課題

4-1 外国人運営顧問による点検評価

4-1-1 E. Joseph Nordgren 外国人運営顧問

原文

Report following a visit at IMS, Okazaki on August 16–19 2006

E. Joseph Nordgren

Comments on organization and special matters

During a visit at the Institute of Molecular Science on August 16-19 2006 I had a chance to meet several scientists at IMS and discuss their scientific programmes, as well as making a lab visit. Interaction with IMS scientists was also facilitated during the 66th Okazaki Conference IWSXR “International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena.” Among other matters discussions during the visit also addressed issues regarding the IMS promotion system, interaction with universities, working conditions of senior scientists, *etc.*

Let me briefly address some of the matters discussed during the visit, starting with the promotion system and the interaction with universities. The applied strategy of giving a young researcher with ambitions and a good forecast the possibility to focus on the development of his/her ideas in a resourceful environment as an associate professor is a good one. This is often a quality driving factor for which research institutes historically may have had an advantage compared to universities, at least in some parts of the world. The Max Planck institutes in Germany are good examples of this. However, there are also other examples, where research activities at institutes have run the risk of stagnating due to lack of dynamics. In Sweden, for instance, this notion led to the discontinuing of the operation of some research institutes pursuing basic science (which, according to my own view, may not have been the optimum solution).

It is important to have in place mechanisms that maintain dynamics in terms of inflow of ideas and incentives for renewal. This is preferably accomplished through a balanced interaction with universities, as applied at IMS, where exchanging young scientists offers opportunities for renewal. Scientific exchange through various guest researcher programs is efficient in this respect, and they should preferably go in both directions, and include universities worldwide. The rule that an associate professor can not be promoted at IMS is probably generally a good one. However, there may be very special cases where the institute makes a severe loss of competence when an associate professor has made particularly excellent work and build up of ground-breaking new science. If one can not allow for exceptions one could think of forming a special link to the person in question and to the university where he or she is moving, in order to retain this very special resource in terms of a joint effort.

Regarding the question of a strict retirement age of 65 I would like to make the comment that lack of strict retirement may be a hindrance for renewal. However, as many scientists still have much to offer at the age of 65 one would like to find a way to implement retirement in a way that allows this resource to be utilized. The implementation of such a system could be a question of changing the role from one who leads to one who counsels and guides. The American “retirement-free” system is often attracting prominent European retired scientists who can continue their career in a successful way.

Independence of the full professors at the institute is an important principle. In my view one should put all the effort into the candidate seeking process to assure that one gets the absolutely best people. After being installed as full professor independence with respect to science is crucial, although everyone would of course have to be evaluated at times to assure that high international standing is maintained. These evaluations would also guide funding allocation. Regarding associate professors one should also try to allow maximum independence as this is important for the training, although the integration in a particular project defined in a wider context may put some limitations.

The research groups are generally not very big at IMS, which to some extent is at variance with respect to some other institutes in the world, where one tries to establish over-critical excellent research environments. Although the limited size may give opportunities for a larger number of different activities, under-critical size may limit rapid development of new ideas. One may therefore want to add another research associate to the groups in some cases and to allow for flexibility in hiring postdocs if good candidates are at hand, and one may also want to stimulate collaboration. With intensified collaboration between groups at IMS and project cooperation and integration with university researchers one is likely to maintain efficient research structures with dynamical properties based on group sizes not much bigger than presently found at IMS.

The trend in the world that research is increasingly more difficult to fund unless it has a well defined technical or societal application poses problems to science as well as applied science. Molecular science is subject to rapid development and increased significance in many areas of science and technology. In order to be successful in funding basic molecular science one has to be able to make clear the importance of understanding the connection between the fundamental properties of molecular materials and their applications. Science history is a good companion in this endeavor as it offers ample examples of how basic knowledge emerging from fundamental studies has been crucial for technical applications. This is to some extent a pedagogical problem, and by joining efforts among groups in formulating proposals for future research, painting the picture with the brushes of different groups, one may be able to master this pedagogical problem. This process may also lead to a natural restructuring that, in turn, leads to even more efficient and creative research environments.

Photon science is of utmost importance for the advancement of molecular science. This has been the case and this seems to become even more evident in the future. There is no accident that a few of the largest research facilities in the world, like DESY in Germany and SLAC in USA are shortly redirecting their efforts entirely into photon science, with new projects in synchrotron radiation and free electron laser activities. Lasers and synchrotron radiation facilities will play a very important role for molecular science. Molecular science based on lasers, synchrotron radiation and free electron lasers are likely to be an expanding area with many applications. Ultra-fast processes become accessible for study with these techniques, and very dilute systems, like mass selected clusters, will lend themselves to studies owing to increased brightness of photon sources. Coherence properties also for VUV radiation will allow new classes of experiments. Advancement of the photon facilities and work to co-operate them in highly synchronized modes will form interesting new means of study of molecular materials.

There are good examples of advanced instrument development at IMS. Again, science history clearly shows that significant leaps in science are often associated with new instruments or experiment techniques. By efficient integration of researchers and facility staff this is an area that could be successfully pursued also in the future.

As mentioned above exchange programs should include universities overseas, and one should try to adjust the terms in a way that optimizes the probability for success in engaging scientists as guest researchers. There could be different categories of guest scientists, from postdoctoral level to more prominent senior scientists. It may be valuable to think about a two-way exchange with

the same institution, so that deeper contacts are established between several persons (on various levels) at both IMS and the overseas institution. This may also help to overcome any cultural barriers that might exist, and aid in the planning of visits.

It is very stimulating to note that the Okazaki Conference Program restarted with the 66th Conference in August of 2006. This conference presented a highly appreciated program and was a well-organized meeting. The continuation of this series is likely to have a very positive effect on the rate of exchange with overseas institutions.

The system of engaging foreign councilors for a two-year period to advise on the research at IMS is worth pursuing, possibly with coinciding visits of the councilors. It might be valuable to use a format where an evaluation is carried out based on a written report and future plan account communicated in advance in addition to the visit interviews. It could also be considered whether the councilors should take part as adjunct members at a council meeting when applicable.

Comments on research programmes

Professor Takuji Ogawa is conducting a research programme in the field of molecular electronics. Of great importance is the study of topological and electronic properties of nanostructures, and as a major tool he is using AFM instruments in the point contact current imaging (PCI) mode. This offers information on the topography and electrical conductivity simultaneously avoiding structural damages due to the loading force of the tip. Professor Ogawa is presently also developing a two-probe AFM.

The research is stimulated by the foreseen fundamental limitations of the current use of semiconductor devices and magnetic/optical discs in information technology. Professor Ogawa and his group are studying the prospects and problems of single molecule devices for future information technologies and other advanced applications. The operation principles of these devices are based on single molecule phenomena, such as electron transfer and direct electron-hole recombination. Metallo-porphyrin complexes are examples of systems that have been studied in this context. One finding is that the structure of the axially coordinated complexes depends on the center metal, such that when magnesium was employed as the center metal, a 1:1 coordinated complex was obtained, whereas for zinc or rhodium porphyrins sandwich-bonded complexes form. The single wall nano-tube (SWNT) wiring method and PCI-AFM can be very effectively combined to measure transport across single or several molecules. This combination allows the simultaneous observation of the topography of the molecules on the electrode during measurement, and using this technique, a nano-rectification device has been controllably wired onto an SWNT by chemical synthesis.

Professor Ogawa is conducting a successful programme in molecular scale electronics, showing an intense recent publication rate (12 papers so far in 2006). His main project, combining SWNT for wiring and organic molecules for function, applying advanced measurement techniques, is likely to show continued progress and to deliver interesting results.

Professor Hiromi Okamoto is conducting research in the field of collective excitations of electrons on metal surfaces, surface plasmons. This is an area of considerable interest for many different science fields. Surface plasmons are extensively studied not only for their fundamental interest, but also for applications to sensor technology to characterize molecules on the interface between metals and dielectric media. Extremely sensitive surface enhanced Raman scattering (SERS) has found wide-spread applications, e.g. in sub-diffraction limited microscopy, and plasmonic devices are subject to intense interest for its properties in laterally confined metal structures. Dispersion relations of surface plasmons are of fundamental interest and subject to studies by professor Okamoto and his group. They have, for instance, in a scanning near-field optical two-photon-induced photoluminescence microscopy study of gold nanorods demonstrated that the rods show spatially oscillating patterns along the rod axis, which could be associated with the plasmon-mode wave functions, as the images reveal characteristic features reflecting the eigenfunction of a specific plasmon

mode as well as electric field distributions around the nanorod. The scientific activity of professor Okamoto and his group reflects high quality and well-chosen directions of study.

It is important that the Laser Research Center for Molecular Science can keep a critical mass and replace the associate professors that have moved on to other laboratories. The high-power CW green laser achievement of professor Taira is one of many good examples of the work.

Professor Ohmori is conducting studies of quantum mechanical interference in molecular systems due to the relative motion of the nuclei. Interference results from natural spreading of the wave packets during their propagation. For co-propagating wave packets the interference pattern, which involves components from the different partial waves having the same momentum, is very time-stable, whereas for counter-propagating wave packets the interference pattern is localized in space only during the crossing time. In order to be able to observe the quantum interference professor Ohmori and his group have developed a system with extremely high temporal and spatial resolutions and robustness. This is a highly impressive achievement. Professor Ohmori has proposed a way to perform quantum computations by combining an ensemble of molecular states and weak laser pulses. His work is very advanced and at the very fore-front in the field.

During the 66th Okazaki Conference professor Okazaki presented a molecular dynamics study on vibrational relaxation in solution. It involved *e.g.* investigation of the influence of single- and multiphonon processes, quantum effect influence on relaxation time, as well as coordination depth dependence of the energy flow. The presentation was well made and received, and it reflected significance and validity of the study.

Professor Saito presented a molecular dynamics study of two-dimensional Raman spectroscopy, showing that mode-couplings can be clearly observed as peaks corresponding to frequency sums and differences. In particular, the icosahedric ice anisotropy and amorphous ice local hydrogen bond network structures were shown to be sensitive to 2D Raman spectroscopy, and that this method can probe these properties in water. Professor Saito gave evidence of his significant standing in the field of molecular dynamics and study of water systems in particular.

訳文

2006 年 8 月 16–19 日分子研訪問に関するレポート

ジョセフ・ノルドグレン

組織に対するコメントと特記事項

2006 年 8 月 16 - 19 日の分子科学研究所訪問の際に、私は分子研のいろんな研究者に会って、研究室を訪問すると同時に、彼らの研究計画について議論する機会を得た。また、第 66 回岡崎コンファレンス「軟 X 線ラマン分光法と関連現象に関する国際ワークショップ (IWSXR)」の際には容易に分子研の研究者と交流ができた。訪問中の他の議題として、分子研の人事政策、大学との交流、シニアな研究者の研究環境などについても議論した。

訪問中の議題のいくつかについて簡単に述べておきたい。まずは、人事政策と大学との交流の問題から始める。意欲があり、見通しの良い若手研究者を助教授に採用して、優れた研究環境の中で自分のアイデアの展開に専念させるような戦略は優れたものである。このような戦略はしばしば、研究機関というものが世界の各大学（少なくとも部分的に）と比較して歴史的に優位に立っているところの推進力になっている。その良い例としてドイツのマックスブラ

ンク研究所群がある。しかし、他の例として、研究機関の研究活動がダイナミズムの欠如によって停滞する危険性もある。例えば、スウェーデンでは、このような意見によって基礎学術研究を行っているいくつかの研究機関の運営を中止することとなった（私はこのような中止は最適解ではないであろうと考えているが）。

再生に関する考えや動機付けの観点からダイナミズムを維持するための仕組みを持つことは重要である。このことは、分子研で行われているように、大学とバランスをとった交流を通して達成することが好ましい。分子研では若手研究者の交換によって再生の機会を作り出している。客員研究者を通じての研究交換プログラムも効果的である。客員研究者は大学と分子研の双方向であることが好ましく、また、世界の各大学も交換相手として含むべきである。分子研では助教授が内部昇格できないという規則は恐らく一般的な意味では優れたものであると言える。しかし、特殊なケースかも知れないが、ある助教授が著しく優秀な研究や最先端の新しい科学の構築に成果を挙げたときに分子研は大きな損失を被ることになる。内部昇格という例外を認めることができないのであれば、この特別な財産を共同成果として維持するために当該研究者や異動先の大学と特別な関係を築くことを考えてみたらどうか。

65歳という厳密な定年制度に関して言えることは、その厳密さをなくすことは再生を妨げることになるかも知れないということである。しかし、多くの研究者は65歳でも働けるので、その資産を利用する方向で定年制度を組み込む方法を見つける方がよい。そのような制度では、その人の役目は研究推進者から研究顧問的なものになることになる。アメリカの“定年なし”という制度はうまく研究が続けられるヨーロッパで定年を迎えた研究者を魅了している。

分子研の教授の独立性は重要な原則である。私の考えでは、絶対評価でベストな人材を確実に得られるような候補者選考過程にすべての努力を振り向けるべきである。一旦、教授として採用したなら研究面での独立性は極めて重要である。もちろんすべての研究者は時々、国際的に高い位置にいることを確認するために評価を受けるべきではある。これらの評価結果は研究費配分にも役立てることができよう。助教授に対しては、訓練的な意味でも重要なので、最大限の独立性を許すようにすべきである。かなり広い内容を持つ特定のプロジェクトに統合することもできるが、このことは独立性を制限することになるかも知れない。

分子研では各研究グループは一般的に言ってそれほど大きくない。このことは、際だって優れた研究環境を与えようとしている世界の他の研究機関と比較すると正反対である。研究単位を小さくすることで研究所としているんな分野で研究活動できるが、小さすぎると却って新しいアイデアを早く実現していく際にその勢いを失わせてしまうことにもなる。そのため場合によっては、研究グループにもうひとり助手を加えたり、もしよい候補がいるのであればポストを自分の判断で雇用できるように自由度を認めたり、共同研究を強化したりすることが考えられよう。分子研の各グループ間の共同研究を強化したり、大学の研究者とのプロジェクト的共同研究をまとめたりしながら、分子研の現在あるグループサイズをそれほど越えないようにしてダイナミズムを有する効果的な構造を維持することが好ましい。

世界的傾向として、技術的あるいは社会的な応用がないと研究費を獲得することは益々困難になってきているが、そのことは応用科学に加えて科学そのものにも問題を引き起こしている。分子科学は科学と技術のいろんな側面で急速に発展しており、重要度を増している。基礎分子科学で研究費を首尾よく獲得するためには、分子材料の基本的性質とその応用の間の関係を理解することの重要性をはっきりさせるようにしなければならない。科学の歴史をたどればよくわかるように、基盤研究から生み出される基礎的な知識が技術応用のためには極めて重要であることを、十分な形で例示すべきであろう。これはある種、教育問題である。異なったグループがそれぞれの筆を使って一枚の絵を描きあげるように、異なったグループがそれぞれ努力して将来計画を立案するようにすれば、この教育問題を解決で

きるかもしれない。この過程を経て、より効果的で創造的な研究環境に導くための再構築が自然な形で順序よく行われる。

光科学は分子科学の発展において究極的に重要である。すでに現状としてそうになっているし、将来的にはさらにはつきりするものと思われる。ドイツの DESY やアメリカの SLAC のように、世界的に最大級の研究施設が放射光と自由電子レーザーの新しい研究プロジェクトを携えて光科学に全勢力を傾けるのは偶然ではない。レーザー、放射光、自由電子レーザーを基盤とする分子科学は広い応用が可能な領域に拡大しようとしている。これらの手段を用いれば超高速過程の研究が可能になり、質量を分けたクラスターのような希薄な系も光源の輝度が向上するにつれ可能になる。VUV 光における干渉性は新しい実験を可能とする。光源施設を発展させ、光源同士を同期させることで分子物質の研究に新たな興味深い研究手段を提供する。

分子研では先端的な装置開発において優れた成果が挙がっている。再度言うが、歴史がはっきり語っているように、新しい装置や実験手法によって科学が大きく飛躍することが多い。研究者と施設スタッフの効果的な統合を図れば将来にわたってうまく推進できる分野となる。

上述のように交換プログラムには海外の大学を含むべきである。また、客員研究員を雇って成果を上げやすくするために客員期間をうまく調整するようにすべきである。ポスドクから業績顕著な研究者までいろんな種類の客員研究員がありえる。つまり、分子研と海外の研究機関の複数の研究者間で（いろんなレベルで）より深く接点を持てるように、同じ研究機関と双方向の交換プログラムを考えてみる価値があるであろう。これはまた文化的障壁を克服するためにも役立つと思われるし、訪問を計画する場合の助けにもなる。

2006 年 8 月に第 66 回目として岡崎コンファレンスが再開したことを知り、非常に感銘を受けた。このコンファレンスは高い研究レベルのプログラムから成り、よく組織された会合だった。このコンファレンスを継続することは海外の研究機関との交流を増やす意味でも非常に効果的と思われる。

分子研での研究に関してアドバイスを与えるために 2 年間、外国人運営顧問を雇うシステムは外国人運営顧問の訪問時期に合わせることができれば価値がある。面接に基づき評価することに加えて、事前に書いてもらった報告書と将来計画書に基づき評価する方式を採用することは意味があるかもしれない。可能なら、外国人運営顧問は運営顧問会議の補佐役として参加することも考えてみたらどうだろうか。

研究プログラムに対するコメント

小川琢治教授は、分子エレクトロニクス分野での研究プログラムを推進している。最も重要なポイントは、ナノ構造体のトポグラフィー像と電子特性の同時計測を行うことである。そのための主要な手法として彼は点接触電流像原子間力顕微鏡を用いている。この方法により、チップの荷重により構造体に損傷を与えることなくトポグラフィー像と電気伝導度の計測が可能になる。小川教授は、現在、二探針原子間力顕微鏡も開発している。

この研究は現在の情報技術における半導体デバイスや磁気・光学ディスクのやがて来る原理的限界を契機としている。小川教授と彼のグループは将来の情報技術やその他の先端技術のために、単分子素子の可能性と問題点を研究している。これらの素子の動作原理は、電子輸送や直接電子・ホール結合などの単分子現象に基づいている。この流れの中で、例えば金属ポルフィリン錯体の研究が行われてきた。一つの発見は、中心金属への軸配位型錯体の構造に関するものである。例えば、中心金属としてマグネシウムを用いると 1:1 錯体を得られるが、亜鉛やロジウムポルフィリンではサンドイッチ型錯体が形成する。単層カーボンナノチューブによる配線法と PCI-AFM を用いる方法は、単一ないしは数個の分子の電子輸送現象を計測する、非常に効果的な方法である。この組み合わせにより、計測中に電

極上の分子のトポグラフィ像を得ることに成功している。また、これによりナノ整流素子を化学的合成手法で単層カーボンナノチューブ上に配線することに成功した。

小川教授は、分子スケールエレクトロニクスにおいて研究プログラムをうまく推進している。また、速いスピードで論文を発表している（2006年に関しては12報）。彼の主なプロジェクトであるSWNTを配線に分子を機能部分に用いる手法と進んだ計測技術は、さらなる発展を続け、興味深い結果を発信し続けるであろう。

岡本裕巳教授は、金属表面における電子の集団励起、即ち表面プラズモンに関わる研究を行っている。この研究領域は、多くの異なる研究分野の興味を引いている。表面プラズモンはその基礎的興味のみならず、金属と誘電媒質の界面にある分子をキャラクタライズするためのセンサー技術への応用に関しても、広く研究されている。超高感度の表面増強ラマン散乱（SERS）には多くの応用、例えば回折限界を超える顕微観測手法などが考えられ、またプラズモニック素子の、水平方向に小さい領域に閉じ込めた金属構造体の（光学的）性質に関して、大きな興味が持たれている。表面プラズモンの分散関係は基礎としての興味があり、岡本教授のグループではそれを研究している。彼らは例えば、近接場2光子誘起発光顕微鏡を用いた研究で、像が特定のプラズモンモードの固有関数の特徴やナノロッドの周辺の光電場の分布を反映すること、そして実際に金ナノロッドが、プラズモンモードの波動関数に起因すると考えられる、ロッドの軸に沿って空間的に振動するパターンを与えることを示した。岡本教授のグループの科学研究の活性は、質の高い、方向性を旨く選択した研究を反映したものと言える。

分子制御レーザー開発研究センターに関しては、必要人員を確保し、転出した助教授の後任を埋めることが重要である。センターの高い業績の一例として、平等助教授による高出力CWグリーンレーザーの性能の高さが上げられる。

大森教授は、分子内の核運動に伴う量子力学的干渉を研究している。干渉によって、波束は伝播しながら徐々に広がる。二つの波束が同方向に伝播する場合、干渉パターンは等しい運動量を持つ異なった部分波による成分を含んでおり、時間的にたいへん安定している。しかし、互いに対向する二つの波束の場合、干渉パターンは、波束が交差する間だけ空間的に局在して現れる。このような量子干渉を観測するために、大森教授と彼のグループは、時間的にも空間的にも極めて高分解能かつ安定性の高いシステムを開発した。これは実に目覚ましい成果である。大森教授は、分子状態のアンサンブルと弱いレーザーパルスを組み合わせて量子コンピューティングを行なう方法を提案した。彼の仕事は非常に先進的であり、まさにこの分野の最先端にある。

岡崎教授は、第66回岡崎コンファレンスで、溶液中における振動緩和の分子動力学法による研究を報告した。ここでは、たとえば1フォノン過程と多フォノン過程による緩和、緩和時間に対する量子効果、そしてまたエネルギー移動に対する溶媒の配位の位置依存性などが議論された。講演は優れたものであり、聴衆の反応も良く、研究の重要性和妥当性を反映している。

斉藤教授は、分子動力学計算に基づく2次元ラマン分光について講演を行った。その中で、系の運動モード間のカップリングが和周波や差周波に対応するピークとして見られることを示した。さらに、2次元ラマン分光が氷構造の非等方性やアモルファス氷の局所的な水素結合ネットワーク構造の違いにも感度の良いことを示し、また、この分光法により水の中のこれらの特徴が調べられることを示した。斉藤教授は、分子動力学計算の分野、特に水のダイナミクスの研究における特筆すべき水準にある。