

Report to Director-General Hiroki NAKAMURA

To: Hiroki NAKAMURA, Director-General of IMS

From: A. Welford Castleman, Jr., *Eberly Distinguished Chair in Science, Evan Pugh Professor*

Subject: Report of my visit, November 11–16, 2006

Pursuant to your request I visited the IMS during the afore listed dates and reviewed the program accomplishments and activities of number of members of your institute. The following summarizes my findings and brief recommendations.

It is often said that chemistry is the “central science,” and the synergistic activities underway at Institute for Molecular Science represent premier examples of this fact, with programs spanning fundamental activities in areas from biology to materials science. Clearly science in Japan derives a great deal of its recognized prowess from the research activities of the IMS and also the facilities it provides researchers to undertake work at cutting edge of science in a number of areas. Despite the many advances which I witness during my various visits to the IMS, one disturbing trend is the progressively diminishing financial resources provided by government funding, a fact which slowly erodes the breadth of the scientific activities which can be pursued. This is detrimental to the IMS, but on a bigger scales, to science in Japan, in general. An especially shortsighted change made throughout Japan by the government was “privatization,” which requires scientists to seek individual funding of projects and most disturbingly decouples the government from direct funding of institutes as well as university faculty positions. Another financial situation which adversely impacts student choice of science as a career, is the comparatively low stipends available for those pursuing a PhD degree, about half of the financial amount provided to students in the US. In view of the large number of institutions impacted by the above mentioned matters, one can hope that the government will take appropriate action to rectify these very serious problems.

One recent development that I became aware of during my visit is the very promising proposal of “networking” which is under consideration. The idea of country wide sharing of research instrumentation, if implemented, will have a major impact on the ability of universities at all levels to have access to advanced instrumentation and to be able to pursue research activities that they would otherwise not be able to undertake. This unique idea should find support by both university researches as well as government funding decision makers as it will enhance the research capabilities in chemistry, and at the same time reduce the financial pressure on available resources. It should also have the added benefit of furthering interaction and possible collaboration among researchers throughout the country.

The IMS continues its major impact in the area of chemistry and related areas of science. I found its two main activities, namely providing a breadth of fundamental scientific research in key areas and offering advanced research facilities to its Institute members as well as the broader research community to be healthy despite the adverse funding situation. The Director-General and his key scientific staff deserve special commendation.

The state of science at IMS is very healthy. Numerous individuals with whom I met described activities at the cutting edge of their individual research fields. Importantly, it was easy for me to understand and appreciate the synergistic effects arising from cross fertilization of ideas which are emerging among various individuals who are interacting at the IMS.

One area of current world wide interest is nanoscience. Several of the scientists with whom I met are directly involved in the

Nanoscale Science Center, and form a key nucleus of activities. Others were expecting to move to the center in the coming year and in my opinion most everyone with whom I interacted had research activities that would easily fit within the nanoscience umbrella and could actually broaden the intellectual pursuits and scientific directions. At the moment there is clearly a kernel on which to further build. The area of bionanoscience is a very promising future direction and the center is well positioned to make advances in this area.

Professor Kobayashi is undertaking some impressive and important work in the area of novel electronic and magnetic functions, particular photocontrollable molecular conductors and colossal magnetoresistance. I understand that he is expected to retire soon; it would be both to his as well as IMS's benefit if a mechanism could be found whereby he could continue to be active in this field, one in which he continues to make especially valuable contributions. His work relates to superconductivity, an especially interesting area both intellectually as well as in terms of potential applications.

Professor Tsukuda is conducting work at the forefront of nanoscale science, developing in collaboration with Professor Sakurai, methods to synthesize and explore the reactivity of ligated gold nanoparticles. Their findings with test reactions of an aerobic nature show dramatic size dependences. This is significant, and may shed light on the fundamentals of further understanding catalytic behavior, in view of his findings of a relationship with plasmon intensities of the particles. In particular they observe catalytic activity and the plasmon intensity to vary inversely with size. Sakurai's work on carbon systems also provides insight into synthesis of materials including ones of interest for electronic devices.

A valuable interrelationship pertains to the work of others in the center. For example is the interesting work of Professor Ogawa who is also working on gold particles, carbon nanotubes, and especially general issues in molecular electronics. He seems poised to make an important new development of a two probe AFM device that will enable what were heretofore impossible measurements on molecular systems to be accomplished. Professor Jiang has set the course to pursue the topic of dendramers which enable selective encapsulation of molecular species, leading to many new materials with unique properties. The research has the potential for developing materials with broad applications, from biology to new soft magnets. One major goal which will be an important accomplishment will be the use of light to attain spin transitions and charge separation.

Professor Nagata has an intriguing research activity with the goal of devising artificial molecules to accomplish photosynthesis. The work has the potential for important basic findings leading to new understandings how nature undertakes photosynthesis, as well potential applications of light harvesting and eventually solar energy conversion. Another activity which was described to me that involves potential biological applications, was the research program of Professor Urisu. I was particularly intrigued to learn about the research that involves an understanding of ion channels and cell membrane sensors, and potential to understanding of neuro-diseases such as Alzheimer's. Professor Urisu's pathway to this line of research was particularly surprising, but demonstrated how scientific progress depends on past experiences.

One of the major functions of IMS is to make available advanced instrumentation to enable the study of research issues at the cutting edge of modern chemistry. Professor Kosugi directs the UVSOR. Its upgrading several years ago continue to make it a facility of major importance. He has organized its use in a manner which functions well as a valuable user facility for other scientists in Japan, of some 600 in number who use it each year. Appropriately, in addition there are beam lines that are also dedicated for the use by members of the IMS. Historically it was the first advanced light source in Japan built solely for chemistry research, and has been a prime example of the value that derives from the access to such machines. In coming years the IMS should consider proposing

to the government other such major instrumentation beyond the 920 MHz NMR and advanced electron microscope which are other good examples of the benefit of an organization like the IMS.

As I have pointed out above, in my opinion, the IMS has considerable strength in a number of areas that may be administratively separate from nanoscale science, but which would easily fit in and broaden the scope of the center. Three scientists who come to mind include Professors Yokoyama, Suzuki and Yakushi. I understand that Yokoyama is expected to transfer the Nanoscale center in the spring. His discovery of magnetic circular dichroism in the vuv and related work near work function thresholds is particular interesting and the application to ultrathin films provides a direct connection to interests of others in the center, as does his work on Co nanorods. His research is an example of an area that depends heavily on the (Free electron characteristics of) UVSOR facility. The work of Suzuki and Yakushi demonstrate the prowess of the Institute in the area of organic materials and their potential to electronics. Suzuki has a well defined plan to pursue fundamental work on issues in the area of photovoltaics. Yakushi's work on charge ordering in organic conductors is another example of the strengths of IMS in organic electronics. Promising new basic understandings can be expected to arise from work on pressure effects influencing the phase transitions of charge ordering, as well as the onset of superconductivity.

The IMS continues to be a lead organization in chemistry research, known and respected throughout the world scientific community. The Institute has obvious strengths in conducting fundamental research as well providing a focal point for offering advanced instrumentation to the chemistry community throughout Japan. Interest in the fundamentals of nanoscale science are actively being pursued at IMS, and members of the organization have a particular advantage in having strengths in areas such as soft/organic materials. This can be expected to be a field of growing interest and importance, and IMS should capitalize on their strengths in this area. Finally, I wish to thank all of the scientific staff members for taking time to describe their work in detail, and in such a friendly and enthusiastic manner. I greatly enjoyed my visit to the IMS.

訳文

中村宏樹所長への報告

分子科学研究所 中村宏樹所長へ

A. ウェルフォード キャスルマン、ジュニア

(エバーリー科学特別職、エバン ピュー教授)より

事項：2006年11月11日 - 16日の(評価)訪問の報告

貴殿のご要求に従って前記の日程で分子研を訪れ、研究所のメンバーの計画遂行状況と業績の評価を行いました。以下に、私が気付いた点と短い助言を記します。

Chemistryは、しばしば、“中心たる科学”と言われ、分子科学研究所で行われてきた生物学から物質科学にわたる領域で展開されてきた共働的活動は、この事実の重要な例として象徴的でしょう。明らかに、日本の科学は、分子研の研究活動と分子研が様々な分野に於ける最先端の仕事を行うために研究者に提供してきた設備群によって高く認識されているように、研究所の優れた力量から多くを学んでいると思われます。私がこれまで訪問する度に見てきた様々な進展に関わらず、現在起こっている一つの気になる傾向は、政府によって与えられる財政的な支援が徐々に減少しているように見えることです。これは、分子研にとっても困ったことですが、もっと大きな規模で、つまり日本の

科学全体にも言えることです。とりわけ政府によってなされた近視眼的な変化は、“独法化”でしょう。これは、政府が研究所や大学の教授陣に直接支援を行う制度を切り離し、研究者に対してプロジェクトを通して個々に支援を受ける道を捜させることに繋がっています。学生にキャリアとしての科学の選択に逆の影響を与えるもう一つの財政状況は、合衆国ではその半分が支給されている学生の給金に対する比較的低い支援であります。上に述べた事柄に影響を受ける多くの研究機関のことを考えて、政府はこれらの深刻な問題を克服する適切なアクションを取ることが望まれます。

今回の訪問で知ることになった最近の進歩は、現在進行中の（化学設備の）ネットワーク構想です。もし、実行されるとすると、先端の研究設備を国中で共有するという考えは、全ての大学人がこの先端の設備にアクセスできると、あるいは、今のままでは不可能であった進んだ研究を実行できうという大きなインパクトを有しています。このユニークな考え方は、化学の研究能力を増大すると同時に資源配分に対する財政当局が感じる圧力を弱めると言う意味で、大学の研究者ばかりでなく政府の大学支援に関する予算配分担当者からも支持されるでしょう。この制度は、国内の研究者間の相互の刺激を増すという利点があると同時に共同研究をも促進する可能性があります。

分子研は、化学の分野ばかりでなく関連の科学分野にも影響を与えています。私は、2つの主要な働きを見出しました。即ち、重要な分野としての基礎科学に息吹を与えると同時に、財政的には逆境にあるにも関わらず、広い分野の研究者を健全にするために先端の設備を提供しています。所長とその重要なスタッフは、特別の功労があるでしょう。

分子研の科学研究の状態は大変健全です。私が会った多くの研究者は、それぞれの研究領域で最先端の活躍をしています。私にも良く理解できる重要なことは、分子研でお互いに切磋琢磨し合う様々な研究者の中に、そのお互いのアイデアの深まりの中から出てくる共働効果が見られるということでしょう。

最近の世界的な広がりを持つ分野はナノサイエンスです。私が会った何人かの研究者は、ナノスケールサイエンスセンターに直接所属する方々です。他の人々も、近いうちにそこに移るのではと予想されたり、私の印象では、殆どの方がナノサイエンスという傘の下に容易に適合するような研究活動をしています。確実に知的な追求を深め科学の方向を広げておられるでしょう。現在の段階でも、確かに建設的な方向へ向かう核が出来ています。ナノバイオサイエンスの分野は、これから大いに飛躍するでしょうし、このセンターはこの方向へ向かう良い位置を占めていると思われれます。

小林教授は、新しい電氣的磁氣的機能、特に光制御可能な分子伝導体、巨大磁気抵抗の観点から非常に印象的且つ重要な仕事をしています。彼は、まもなく退職すると理解していますが、特に有効な貢献が期待されるこの分野で引き続き研究を続けて行くメカニズムが機能するなら、彼にとっても分子研にとっても益するところが多いでしょう。彼の仕事は、超伝導にも関連しており、知的な興味ばかりでなく応用への可能性も持つという大変興味深い分野です。

佃助教授はナノスケールサイエンスの最先端で指導的な仕事を行っています。これは、また合成法や配位した金ナノ粒子の反応性を高めるという櫻井助教授との共同研究をも発展させています。彼らの有酸素下のテスト反応においては、劇的なサイズ効果が見出されています。この事は大変重要ですが、粒子のプラズモン強度との関係で、触媒反応の挙動を理解する基本的な理解に光を当てるものになるかもしれません。特に、彼らは、サイズが減少すると共に反応活性とプラズモン強度が増加することを見出しています。櫻井助教授の炭素系に関する仕事は、電子デバイスへの興味からも物質合成への識見を与えるでしょう。

センターに於けるメンバー相互間の良い関係が見られます。例えば、小川教授の興味深い仕事には、金のナノ粒子やカーボンナノチューブや、特に一般的な対象となっている分子エレクトロニクスがあります。分子系ではこれまで

不可能とされていた 2 端子 AFM デバイスによる計測を可能にする直前にあるように思えます。江助教授は、分子種を選択的に閉じこめ、ユニークな性質を持つデンドリマーの研究を行おうとしています。この研究は、生物学からソフト磁石に至る広い応用に繋がる多くの新物質をもたらすでしょう。重要な成果に繋がる一つの大きなゴールは、光を用いてスピン転換を実現し電荷分離を起こすことでしょう。

永田助教授は、光合成を実現する人工的な分子系デバイスの構築というゴールを持つ、大変興味深い研究活動を行っています。この仕事は、自然がどの様に光合成を行っているのかを新しい観点で理解するための重要な基本的発見に繋がるでしょうし、光を捕集し太陽エネルギー変換を行う応用への展開も期待されます。私に示されたもう一つの研究活動は、生物学的な応用への可能性を持つものですが、宇理須教授の研究プログラムです。私は、イオンチャンネルや細胞膜センサーの理解、特にアルツハイマーのような神経の病気の理解の可能性を持つ研究に特別の興味を覚えました。宇理須教授のこの線での研究の過程は特に驚くべきものですが、この科学的な進歩が如何に過去の経験に依っているのかを示していました。

分子研の重要な機能の一つは、現代化学の先端的研究課題の遂行を可能にする最先端の装置を提供することでしょう。小杉教授は、UVSOR を主導しています。数年前のアップグレードによって更に重要な施設となっています。彼は、年間 600 人に上る国内の研究者を対象としてこの施設がより有効に働くように運営してきました。また、分子研のメンバーに対してもビームラインが適切に提供されてきました。歴史的には、この施設は化学研究に特化された最初の先端光源を持ち、そのような機器の利用によってもたらされる価値を示す最も重要な例でありました。近いうちに、分子研のような組織の立場で、920MHz NMR や先端の電子顕微鏡を越えた重要な大型装置の導入を政府に提案することを検討する必要があるでしょう。

既に指摘しましたように、分子研はナノスケールサイエンスとは形式上は別の広い多くの分野にも力点を置いておられるのですが、これは、センターの広い視野の中に適合するでしょう。次年度から、横山、薬師教授も重要なメンバーとなられることを聞いています。横山教授は、真空紫外領域での磁気 2 色性を見出しましたし、仕事関数近傍の領域に於ける振る舞いも特に面白いと思いました。また、コバルトナノロッドの仕事と同じように超薄膜への応用も、センターの他の人々の関心と呼ぶでしょう。彼の研究は、UVSOR 施設に依存した研究の重要な例でしょう。鈴木、薬師教授は、有機物質の領域で研究所の有能さと、そのエレクトロニクスへの潜在力を示すものでしょう。鈴木（助教授）は、光起電力の研究領域の問題に寄与をなす基本的な仕事を強調しています。薬師教授の有機伝導体に於ける電荷整列の仕事は、有機エレクトロニクス分野に於ける分子研の強さを示すもう一つの例でしょう。これには、超伝導転移領域と同様に、電荷整列の相転移に影響を与える圧力効果の仕事が新しい基本的な理解をもたらすであろうと期待されます。

分子研は化学研究の分野で指導力ある機関で在り続けるでしょうし、世界の科学のコミュニティーでよく知られ、高い評判を得ています。研究所は、日本の化学のコミュニティーに最先端の設備を提供する拠点となっていると同時に、基礎研究に明確な重点を置いています。ナノサイエンスの基礎的研究が分子研では活発に展開されており、特に、ソフト/有機マテリアルにおいては有力な組織となっています。この領域は、今後も益々興味深く重要なものとなるでしょうし、分子研はこの領域の重要性を広く知らしめるべきでしょう。最後に、皆さんそれぞれが時間を裂いて丁寧に、又、熱心に説明して頂いたことに感謝します。今回の分子研訪問を、大いに楽しみました。