

7．点検評価と課題

平成 19 年度には分子研全分野に亘る外部評価を実施した。各研究領域に対する評価の公開部分が以下の節（7-1 - 7-4）に掲載されている。多大なご尽力を頂いた外部の先生方にここで改めてお礼を申し上げる。多くのお褒めの言葉と共に厳しいご意見も頂いており、所員一同改めて気を引き締めて一層の努力をする必要がある。主要なポイントは以下のものである（7-5 も参照）。

内部昇格禁止を緩和したらどうか：色々な議論のあるところであるが、所内で議論した結果、やはり維持することとした。

新分野創出と分野をリードする努力をすること：教授、准教授は改めてこの認識を深め、独自性と気概を持って精進することが必要であろう。

設備インフラの充実を図ること：UVSOR、大型計算機、NMR の世界的レベルの維持・発展を図ると同時にその他設備の充実についても、国の財政逼迫の中で極めて厳しいが、国への要求の努力を続ける必要がある。また、「研究設備有効活用ネットワーク」の拡充も極めて大事である。

研究グループサイズが小さい：厳しい採用人事を行い現在の研究グループ制を維持することはやはり重要であると考え。一方、一部教授に二人目の助教を配分しているが、研究所からの支援は限られるので、科研費を核とする外部資金獲得の努力を一層進めるべきである。また、優れた大学院生の獲得も大きな課題である。奨学金制度の拡充が望まれるが、RA 制度の充実と宣伝の努力も必要であろう。また、所内の研究グループ間の協力研究及び客員教授・准教授との協力研究をもっと推進すべきである。

IMS フェローのあり方についての議論も進んでいる。待遇改善とより柔軟性のある制度の模索を行う必要がある。

以上に加えて、大学共同利用機関としての分子研のあり方についての検討を行い、運営会議等においても議論をして頂いた。7-5 にその内容がまとめられている。

（中村宏樹）

7-1 理論・計算分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 11 日

委員 榊 茂好（京都大学，教授）
樋渡保秋（金沢大学，名誉教授）
前川禎通（東北大学，教授）
北原和夫（国際基督教大学，教授）

国外評価委員面接日：平成 20 年 3 月 17 日～ 21 日

委員 William H. Miller（Professor, University of California, Berkeley）

7-1-1 点検評価国内委員の報告

(1) 当該研究領域の研究分野での分子研の役割，寄与と位置づけ

理論・計算分子科学研究領域は全部で 9 グループ（理論 6，計算 3）を擁し，わが国の大学における化学系学科では最大の陣容を誇り，国際的に第一線の研究成果を数多く発信しているだけでなく，共同利用機関として計算科学研究センターの管理・運営に責任をもち，全国，600 件／年にも及ぶ計算分子科学研究の「中核拠点」としての役割を果たしている。また，これらの活動を通して，数多くの研究者を育て，各レベルの人材（助教，准教授，教授）を全国大学等に輩出している。

(2) 当該研究領域の研究内容と各研究グループに対する個別評価

当該研究領域の研究は分子およびその集合体の構造，物性，ダイナミクスおよび機能を分子科学基礎理論（量子化学，統計力学）および分子シミュレーションに基づき解明することを目的とするものであり，その対象とする物質も電子系から生体分子まで多岐にわたっている。また，対象とする物質の相も気相，液相，固相と全範囲に及んでいる。以下に，過去 3 年間ににおける当該研究領域の活動と各研究グループの特筆すべき研究成果およびその評価について述べる。

当該研究領域の活動

理論・計算分子科学研究領域は領域全体の取り組みとして下記の 3 事業を遂行している。

計算科学研究センターの共同利用事業

NAREGI プロジェクトにおける「ナノサイエンス実証研究」拠点および「次世代スパコン」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としての事業

自然科学研究機構の「中核拠点形成」事業

計算科学研究センターはいわば分子科学研究所における共同利用事業における中核的研究施設のひとつであり，全国の分子科学分野の計算科学者に計算資源を提供するだけでなく，その共同研究を促進し，理論・計算科学分野の発展に貢献している。施設のユーザー数はワークステーションやパソコンクラスターなどの普及とともに漸減傾向にあるが，今なお，60 グループ，約 600 人の大学研究者がこの施設を利用し，100 パーセントに近い稼働率を維持していることは他に類を見ない特長であり高く評価できる。

一方，その利用形態を見てみると注目すべき特徴がある。それは利用者が理論・計算分子科学分野のプロパーの研

研究者と有機化学者などを含む実験研究者に大きく分かれていることである。そして、実験研究者の多くはセンターにインストールされている Gaussian (量子化学) や AMBER (分子シミュレーション) などのプログラムを使用できることにメリットを求めている。これは分子科学分野における理論と実験との実質的な共同であり、分子科学分野の成熟度のひとつの指標でもある。今後、計算科学研究センターが分子科学分野の基盤的研究施設としての位置づけをより一層高めるためには、このような共同研究を促進することが肝要であり、これまで理論・計算分子科学分野で開発してきたプログラムのライブラリ化などを通じて、分子科学分野の研究者に供することが求められる。

理論・計算分子科学研究領域は文部科学省からの委託事業である「NAREGI ナノサイエンス実証研究」を 2003 年度から実施している。この事業は文科省の「超高速コンピュータ網形成」プロジェクトの一貫として、情報科学研究所を拠点としたチームによって作られた「グリッドミドルウェア」の実証計算を行うことを第一のミッションとしている。このプロジェクトチームは分子科学研究所、東大物性研、東北大金研、京大化研、産総研など全国 6 研究機関および 12 大学の研究者から構成され、分子科学研究所はそのプロジェクト拠点としての役割を果たしている。本プロジェクトにおいて達成された学術的成果は 2005 年度に実施された文科省での中間評価の段階ですでに「RISM-FMO」を含む各種連成計算、1000 万原子系の巨大分子動力学計算の実現など多岐にわたっており、高い評価を得ている。また、本プロジェクトでは「グリッドナノシミュレータ」と呼ばれる計算支援ソフトウェアを作成している。このソフトウェアは全く独立に作成された個々のプログラムをシームレスに連成することを可能にすることから、グリッド上での連成計算はいうまでもなく、現在、構築中の「次世代スパコン」においても威力を発揮すると思われる。本年度はプロジェクトの最終年度に当たり、グリッドミドルウェアの最終的な「実証研究」に取組んでおり、その成果が大いに期待される。

一方、「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発」プログラムは 2006 年度に開始された文科省プロジェクト「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」の一貫として、次世代スパコンを有効に活用するソフトウェアの開発を目的としている。この目的のため、1. 次世代情報機能材料、2. 次世代ナノ生体物質、3. 次世代エネルギー、という 3 つの「グランドチャレンジ課題」を設定し、それらの研究課題に沿って研究チームを編成している。これらの課題を達成する上で必要な理論および方法論を構築すると同時に、それらに対応する計算プログラムを作成し、次世代スパコンでの実証計算を行うことを目指している。現時点ではプロジェクトが開始されて未だ 1 年半程しか経っていない現状にあり、何らかの結論的な評価を下す段階にはない。しかしながら、これまでの活動でも、理研で開発を進めているスパコンハードウェアのアーキテクチャ選定における「ターゲットアプリケーション」として、上記のグランドチャレンジ課題に対応する 6 本 (うち 3 本は分子研から提案) のプログラムをベンチマークに供したことは高く評価できる。

理論・計算分子科学領域は自然科学研究機構プロジェクト「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」における「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」プログラムの拠点として活動をしている。このプログラムは機構内におけるシミュレーション分野の連携を促進し、特に、大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現するとともに、それぞれの分野においても方法論に新機軸をもたらし、学際的新分野を形成することを目指している。2005 年度に開始された本プログラムにおいて、すでに、24 回におよぶセミナー、3 回の機構内連携研究会、2 回の国際シンポジウムを開催するなど活発な連携活動を行っており、その活動は高く評価できる。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要性

本研究分野は量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした分子科学分野の理論・方法論を基礎として、分子およびその集合体の構造、物性、化学反応、相転移、ダイナミクスなど物質が示す様々な現象を電子・原子レベルから理論的に考究する学術分野であり、計算機科学の発展とも相俟って、現在、急速にその重要性に対する認識が高まりつつある。とりわけ、現在、急速にその研究が進みつつある「ナノ科学」および「生命科学」においては、分解能や感度などの限界から、実験では到底解明することのできない様々な現象にぶつかっており、理論的な解析なくしては学術分野そのものの発展が停滞してしまう状況にある。一方、これらの分野の諸現象は、例えば、水溶液中の酵素反応に典型的に見られるように、電子から無限の広がりをもつ溶媒まで、広いスケールと複数の物理・化学現象が絡みあった複雑な対象であり、従来の分子科学理論の枠を超えた新しい理論・方法論の発展が期待されている。

理論・計算分子科学の重要性は単に基礎学術研究からのそれだけに止まらない。上に述べた「ナノ科学」や「生命科学」は将来の生産技術や医療技術の科学的基礎としても重要な位置づけを担っており、この分野におけるブレークスルーがそのまま生産や医療におけるブレークスルーに直結する可能性が高い。例えば、分子レベルでの電子デバイスや新しい機能をもつ人工酵素の設計などがそれである。

(4) この分野の発展はあるか、どのような方向か

上に述べたように、この分野の発展は従来の「要素還元型」の研究からより現実的な系（分子およびその集合体）の構造、物性、ダイナミクス、機能を分子レベルから解明していく、いわば、「総合型」研究のフェーズに突入しつつある。その意味において、現代の科学研究において計算機が占める位置を再認識する必要がある。これまでは、現象の背後にある因果関係をモデルによって説明する際に、解析を容易にするために本質的な部分を抽出したモデルを考えることが多かった。しかしながら、現代では、計算機の発達によって、複雑な要因を取り入れたモデルをそのまま数値的に解析することが可能となり、複雑な要因からなる現実的なモデルの有効性を検証しさらにそこでのパラメータを変えることによって新たな現象を予測することも可能となる。このような時代において、理論やモデル構築を行う研究者と、数値解析の高速化のアルゴリズムなどを研究する計算機科学分野の研究者とが出会って協同する可能性を拓く教育の在り方を考えるべきである。また、アルゴリズム研究の成果は広く使えるような仕組みも必要である。以上のことから、我が国の理論・計算分子科学振興のために、以下の施策を提言する。

現在、非常に限られた化学系学科にしか置かれていない理論分子科学（理論化学）部門を全国の高等教育機関に増設し、学部時代から計算機を用いた理論分子科学に親しめる環境を作る。

大型計算機センターをもつ高等教育機関においては、センターを単なる計算機利用施設に留まらず、理学（理論化学、理論物理）と計算機科学あるいは計算機工学の共同研究の実践する教育研究施設とする。

物性研と分子研には、計算ソフトのライブラリーとしての機能を持たせ、基礎研究のための情報発信機能をもたせる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

理論・計算分子科学研究領域は当該分野の全国の研究者の共同研究を促進する上で本質的役割を果たしており、その活動は高く評価できる。今後とも、この方向で努力を継続すべきである。同時に、わが国における理論・計算分子科学分野のさらなる発展という視点からは、いくつかの克服すべき課題も指摘される。

これまで理論・計算分子科学研究領域の共同利用に関する活動は計算科学研究センターの運営と管理に責任をもち、主として、計算機資源を分子科学分野のユーザーに提供することを中心に行われてきた。これまでも量子化学計算ソ

フトとして GAUSSIAN や分子動力学計算ソフトとして AMBER などの市販ないしは公開ソフトをユーザーの利用に供してきたが、それはあくまでも付随的な活動に過ぎなかった。しかしながら、先にも述べたように、現在の分子科学分野における計算科学の研究対象はこれらの市販ないしは公開ソフトだけでは太刀打できないレベルに達しており、わが国の分子科学分野で開発した独自の理論や方法論および計算プログラムを共通の知的財産として共同利用に供すること、すなわち、「ハード」を中心にした共同利用から「ソフト(知識)」を中心にした共同利用へと大きく転回することが求められている。この意味で理論・計算分子科学研究領域は独自に開発した理論・方法論およびソフトウェアを計算科学研究センターのライブラリ化などを通じて積極的に公開してだけでなく、全国の理論・計算分子科学者が開発したすぐれたソフトウェアについてもその開発者にライブラリとして公開していただくよう協力を求める必要がある。また、これらのライブラリを維持・管理し、発展させるためには現在の計算科学研究センターの人員および組織体制では不十分であるため新たな措置を講じる必要がある。

7-1-2 国外委員の評価

原文

To: Hiroki Nakamura, Director-General of IMS

From: William H. Miller, Kenneth S. Pitzer Distinguished Professor of Chemistry, University of California, Berkeley

Subject: Report of my visit to IMS, March 17–21, 2008

Though I have had the pleasure of visiting IMS a number of times, it is sobering to realize that it has been approximately 30 years since my first visit, not long after the Institute was founded. It is clear that this “experiment” in scientific organization in Japan has been a great success in many areas of molecular science, and quite specifically in theoretical/computational chemistry (= molecular science) that is the subject of my review. By almost any measure one can easily conclude that the group in theory and computation at IMS is one of the premier such groups in the world. In size alone—I will comment on its quality below—it ranks at the top. I heard presentations from 9 research groups, and though Professor Okamoto has left for Nagoya University, my understanding is that a recruitment is currently in progress for a new appointment. For comparison, my own institution—the College of Chemistry (the departments of Chemistry and Chemical Engineering) at UC Berkeley—has 6 theorists in Chemistry and 2 in Chemical Engineering, comprising the K. S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry, and we are the largest collection of theoretical chemists in the US. To my knowledge, there is no institution in Europe with this number of independent theoretical research groups in chemistry or molecular science.

Before discussing the scientific programs, I would like to make some comments about issues that I think are relevant to theoretical/computational chemistry in general, and to IMS in particular:

1. There has been such great progress in theoretical methodology (electronic structure theory, molecular dynamics simulation methods, *etc.*) in the last 2 or 3 decades that it can now be fruitfully applied to almost the entire array of molecular phenomena. The work at IMS and elsewhere is testament to this. While we all applaud the energetic *application* of theoretical tools to problems in bio-molecular systems, nano-materials, novel electronic devices, *etc.*, one cannot help but see a tendency to minimize the funding and support for more *fundamental methodological theory*. I am sensitive to this trend in my own country, where most young theorists think (rightly

or wrongly) that they must somehow work “nano” or “bio” into their research proposals in order for them to have any chance of being funded, and I have seen evidence for similar trends here in Japan. My general plea—and recommendation to Japanese funding sources, in particular—is not to minimize support for the creative *applications* of theory that are being pursued at IMS and elsewhere, but that creative research in *basic theoretical methodology* also be supported and encouraged. Not to do so is akin to “eating one’s seed corn” (I hope there is a Japanese version of this expression) and is a recipe for stagnation in the future.

2. I believe that a mandatory retirement age is a good thing. (I think it is a mistake that we abandoned such in the US.) Though the earlier age of 60 certainly seemed too young, something between 65 and 70 does seem about right; each society must of course decide what works best for them. Yes, some persons will still be doing excellent work at retirement age—and there should be provisions for emeritus faculty to maintain scientific viability if they still have a vigorous research program—but it is important that they relinquish their formal positions to make way for new appointments of young faculty.

3. The policy of not promoting Associate Professors at IMS is different from that in the US, where a “stay or go” decision is made at the end of a person’s assistant professorship (the tenure decision, about 5 or 6 years after the initial appointment). It is similar, however, to that of the German system, where a C3 professor (= associate professor) must move to another institution to move up to a C4 (= full professor) position. The only danger I see is that you will lose the best faculty, who will be attracted to senior positions at universities, say, and the ones who remain will thus not be the best. However I see no evidence for this at IMS, so the policy seems to be working well. It does have the positive effect of making positions available for recruiting new beginning faculty, and the importance of this cannot be over-stated. One of the best things about the large size (~50) of our faculty at Berkeley is that we are recruiting for one or two beginning assistant professors every year; it is quite exciting to always be looking for the “best and brightest” and seeing what research directions they are choosing.

4. I find the “privatization” of the national universities and research institutes to be potentially troublesome for theoretical/computational science. Yes, theory and computation are playing an increasingly important role in “practical” research that can attract money from private sources, but it usually is in a supporting role to experimental programs and thus not so visible. I believe that a large part of the success of theory at IMS has been the stable support it has had from the national government over its lifetime. I am unsure how well it will fare if it is forced to sell itself on the open market. I could make these same comments about the US—all these trends seem to be global—where universities (mine included) are aggressively pursuing partnerships with industry to help fund their research programs. This is not necessarily bad, but it certainly could be if not carefully monitored. I fear that our governments are in favor of these directions primarily as a way to lessen the demands on their budgets.

5. I am glad to see that IMS can now offer a doctorate degree to graduate students, for this certainly helps in attracting talented young co-workers. Institutions like IMS, the Max Planck Institutes in Germany, and the National Laboratories in the US, always have difficulties in attracting students since they have no undergraduate teaching role. IMS seems to be doing reasonably well in this regard, though I did see comments in an earlier review that the small size of experimental groups was somewhat of a problem. Fortunately for theoretical research, a large group is usually not necessary—or even desirable—in order to carry out a very successful program.

I was immensely impressed by the quality and variety of the research programs I heard described over an intense two-day period at IMS. Most all of the groups have interesting and novel approaches for new theoretical methodology and as well as creative applications to a wide variety of very timely molecular problems. For purposes of discussion, I comment first on the four research groups dealing primarily with *electronic structure and dynamics*. *Professor Nagase* described some very novel applications of DFT (density functional theory) to show the important role played by bulky substituent groups on the formation of multiple bonds between heavier group 14 elements, and also to the structure and functionalization of endohedral metallofullerenes. He also described the development of very efficient new algorithms for generating energy gradients at the MP2 level of electronic structure theory, the crucial tool for determining reactions paths of chemical reactions, and he also discussed the beginnings of a very novel Monte Carlo approach in electron configuration space (as opposed to the physical coordinate space of the electrons) for highly accurate electronic structure calculations. *Professor Yanai* described two very novel approaches for attacking the fundamental problem of electron correlation: a canonical transformation (CT) approach (similar in spirit, but not the same, as coupled-cluster theory) for treating the short-range dynamic correlation, and a density matrix renormalization group (DMRG) method for greatly enhancing the efficiency of CASSCF methods that treat the valence-mixing, or non-dynamical correlation. The combination of these two allow him to achieve highly accurate results much more efficiently than previous approaches. *Professor Nobusada* described his use of DFT to study gold-methane-thiolate clusters, and of TDDFT (time-dependent DFT) to show how circularly polarized light induces ring current in ring-shaped molecules. He also described an open-boundary cluster model (OCM) he developed to treat adsorbates on finite clusters. The open-boundary (outgoing wave boundary conditions) removes artifacts due to the finiteness of the cluster. *Professor Yonemitsu*, a condensed matter theorist, described projects dealing with electron dynamics strongly coupled to phase transitions in various materials, in particular the effect of photo-excitation of electron-hole pairs on conductivity, permittivity, and magnetic susceptibility. Some of the phenomena he has studied are photo-induced neutral-ionic/paraelectric-ferroelectric phase transitions in charge transfer complexes, charge transfer excitations in 1D dimerized Mott insulators, and effects of electronic correlation and lattice distortion on charge order in 2D organic salts.

The other five groups deal with a variety of complex molecular systems, making extensive use of *molecular dynamics (MD) simulation methods* (including extensions of this methodology), coupled with electronic structure calculations as necessary in some cases. *Professor Hirata* is of course very well known for his extensive work in extending the basic RISM idea far beyond the realm for which it was initially designed. He described applications to site-selective binding of ions to proteins, and in particular how this varies when mutations are introduced into the protein. Another application was to show how water is forced into a protein under high pressure, and how this leads to denaturation of the protein. *Professor Saito's* work deals with dynamics in the condensed phase, primarily aqueous solution. He described an impressive study of conformational changes associated with GTP hydrolysis in the RAS protein, using MD simulations to investigate the fluctuations and conformational changes; structures were characterized by QM/MM energy calculations. He also described MD simulations of the higher order time correlation functions that are necessary to calculate 2D infrared spectra, in particular those related to intermolecular dynamics in water. *Professor Morita* described his very extensive development of MD simulation methodology focused on calculation of sum frequency generation (SFG) spectra, a property most sensitive to interfacial regions of molecular ensembles. He emphasized that such careful theoretical simulations of the spectra are essential for extracting useful information from such experiments. He also described a very careful development of flexible and polarizable potentials that are necessary to make the MD simulations feasible.

Professor Okazaki described state-of-the-art MD simulations of extremely large molecular systems, micelles in water, lipid bilayers, and cholesterol molecules in membranes. He also described an MD simulation for the vibrational relaxation of CN^- ions in water; this was done by using a harmonic influence functional to represent the solvent, the harmonic model coming from the instantaneous normal mode (INM) model of the solvent. In so doing he was able to show that only water molecules in the first solvation shell contribute to the relaxation, and that the vibrational energy from the CN^- is deposited primarily in bending and rotational/librational modes of the water molecules. *Professor Okamoto's* research is also focused on classical MD simulations, primarily on improving the Monte Carlo (MC) and MD sampling methodology that is so important when treating truly complex processes, such as protein folding. Straight-forward approaches tend to get “trapped” in local minima and not sample the entire ensemble correctly. He has been instrumental in developing algorithms such as multi-canonical MC sampling, replica-exchange, parallel tempering, and multi-overlap MD methods. He described the application of some of these approaches to amyloid formation, a critical aspect of Alzheimer's disease.

So as stated in the prolog, the variety of problems being tackled by the IMS theoretical groups is quite astounding. The fact that the quality of the work is so high make this even more impressive. My overall finding is that the theoretical/computational group is in excellent shape. My only recommendation is that in future appointments you continue to focus on the intellectual quality and perceived creativity of the candidates and not too much on the particular topical area of the research (within reason, of course). I have found that departments and committees do a very poor job of trying to predict the most fruitful directions for research; rather, my experience is that the best directions are the ones that the best young people choose.

訳文

To: 中村宏樹 分子科学研究所所長

From: ウィリアム H. ミラー カリフォルニア大学バークレー校ケネス S. ピツァー抜群教授 (化学)

Subject: 2008年3月17 - 21日 分子研訪問の報告

これまで何度も楽しく分子研を訪問しましたが、研究所が創立してまもなくだった最初の訪問から約30年たったことに気づいてハッとしています。日本でこのような科学の組織をつくるという“実験”が、分子科学の多くの分野で偉大な成功を収めてきたことは明らかだと思います。私のレビュー対象の理論化学/計算化学 (= 分子科学) においては特に。ほとんどどの評価基準でみても、分子研の理論・計算分子科学研究領域は世界で一位のグループのひとつであることが容易に結論付けられます。以下では質についてコメントしますが、サイズだけでもトップに位置づけられます。9つの研究グループの発表を聴きました。岡本祐幸教授が名古屋大学に異動しましたが、新たな任命に向けて採用が現在進められていると理解しています。比較のため、私の施設 (カリフォルニア大学バークレー校の化学科と化学工学科からなる化学カレッジ) は化学科に6名、化学工学科に2名の理論家があり、K. S. ピツァー理論化学センターを含んでいて、米国では理論化学者の最大の集団です。私の知る範囲では、ヨーロッパにおいても化学または分子科学においてこれだけの数の独立した理論研究グループがある施設はありません。

科学プログラムを議論する前に、一般に理論化学/計算化学にそして特に分子研に関連すると思う課題にコメントしたいと思います。

1. この20～30年間に理論的方法論（電子構造論，分子動力学シミュレーション法など）は非常に大きく進展し，今では分子の関わる現象のほとんどすべての領域に応用され実りを挙げています。分子研等の業績はその証拠になっています。我々全員が理論的手段を生体分子系，ナノ材料，新規電子デバイスなどの問題に精力的に応用することを称賛していますが，より基本的／原理的な方法論への財政的支援や支持を軽視する傾向を見ざるを得ません。私は自国でこの傾向に敏感になっていて，そこではほとんどの若手理論家が財政的支援を得るため研究計画書に“ナノ”か“バイオ”という言葉何とかして織り込まなければならないと（正しいか間違っているかはさておき）考えていますが，ここ日本においても同様な傾向があるという証拠を見ました。日本の，とりわけ資金源に対して一般に懇願あるいは勧告することは，分子研等で追及されている理論の創造的な応用を過小評価してはならないということです。基礎的な理論的方法論における創造的な研究も支援し奨励するべきです。してはならないのは，“種トウモロコシを食べる”（この表現の日本語版があると思います）ことであり，そうすれば将来低迷して不振に陥ることになります。

2. 私は強制的な定年制はよいことだと信じます。（米国でこれを放棄したことは間違いだと思います。）以前の60歳という年齢は確かに若すぎるように思えますが，65歳から70歳までの年齢なら適当に思えます。個々の社会がもちろん自分たちに最良のものを決めなければなりません。確かに，定年の年齢においても卓越した仕事をまだ行っている人がいます。名誉教授がもし積極的な研究プログラムを持っているなら，科学においての実行可能性を維持できる設備等条件を用意するべきです。若手教員を新規採用する道を譲るために，彼らが正式な地位を放棄することが重要ですが。

3. 分子研では准教授を昇進させないという方針があり，“留まるか出て行くか”の判断が助教の任期終了後（テニユアの決定，最初の任命の約5～6年後）に行われる米国での方針とは異なります。しかし，C3プロフェッサー（准教授）がC4プロフェッサー（教授）に着くためには他の施設に移らなければならないドイツの制度と似ています。私を感じる唯一の危険は，大学の高い地位に引き付けられるような最良の教員を失い，残る教員が最良でなくなることです。しかし分子研ではこのような兆候が見当たりませんし，この方針がよく機能しているように見えます。新しく始める教員を採用する地位をあけておくという建設的な効果が確かにあり，この重要性はどんなに言っても誇張にはなりません。我々のパークレーでの教員の規模が大きいこと（50名ほど）で最良なことのひとつは，毎年1～2名新たに助教になる人を採用していることです。最も優秀で聡明な人を常に探し，どの研究方向を彼らが選んでいるかを見ることは非常に胸を躍らせることです。

4. 国立大学と研究所の法人化が理論科学／計算化学に困難を与えるかもしれないことが見受けられます。確かに，理論と計算は民間の財源から資金を引き出せる“実用的な”研究でますます重要になる役割を果たしています。しかし通常は実験プログラムを支援する役割においてであって，目立つものではありません。分子研の理論の成功の大部分は日本政府から永年にわたって安定した支援を受けたことによると信じます。もしこれが自由市場に売ることを強制されたら，ことがどれだけうまく運ぶか確かではありません。全く同じこれらのコメントを米国にもできます——これらの傾向はグローバルに見えます——（私の所属しているのを含め）大学は研究プログラムに資金を出すのを助ける産業界との提携を強引に追及しています。これは必ずしも悪いことではないかもしれませんが，注意深く監視しない限り悪いことになりえます。日米の政府が予算要求を軽減するためにこれらの方向を主に支持することを恐れます。

5. 分子研がいまや大学院生に博士号を与えられることを知って嬉しいです。これで確かに，能力のある若い共同研究者を引き付ける助けになるでしょう。分子研，ドイツにおけるマックス・プランク研究所，米国における国立研究所のような施設は，学部生を教える役割がないために，常に学生を引き付けるのが難しい状況にあります。分子研はこの点，以前のレビューでは実験グループのサイズが小さいことが問題になっているとのコメントを見たものの，適

度によくやっているように見えます。理論研究では幸いにも、大きなグループは、とても成功したプログラムを遂行するためには、通常は必要ないか、または望ましくありません。

分子研での情熱的な2日間にわたって説明されたことを聴いて、それらの研究プログラムの質と多様性に、私は非常に感銘を受けました。ほとんどすべてのグループが興味深く新規なアプローチで新しい理論的方法論に取り組んでおり、広く多様性を持つとても時宜になかった分子科学の問題に創造的な応用をしています。議論をするために、まず電子構造とダイナミクスを主に扱う4つの研究グループをコメントします。永瀬教授はいくつかとても新しい密度汎関数理論(DFT)の応用を説明して、より重い14属元素の間の多重結合の形成にバルキーな置換基が果たす重要な役割と金属内包フラレンの構造と機能化を示しました。また化学反応の反応経路を決定する重要な手段である、電子構造理論のMP2レベルでのエネルギー勾配生成のとても効率的な新しいアルゴリズムの発展を説明しました。また高精度の電子構造計算のための(電子の物理的な座標空間ではなく)電子配置空間におけるとても新しいモンテカルロ計算によるアプローチの始まりを議論しました。柳井准教授は電子相関の基本的な問題に取り組むための2つのとても新しいアプローチを説明しました。ひとつは短距離動的相関を扱うための(精神としては結合クラスター理論と似ているが、同じではない)正準変換(CT)アプローチで、もうひとつは価数混成または非動的相関を扱うCASSCF法の効率を大いに高める密度行列繰り込み群(DMRG)法です。これら2つの方法の組み合わせで、以前のアプローチよりもずっと効率的に高精度の結果を得ることができます。信定准教授はDFTを使っての金-メタン-チオラートクラスターの研究と、時間依存DFT(TDDFT)を使っていかに円偏光の光が輪状分子上を周る電流を誘導するかを説明しました。また、有限クラスター上の吸着質を扱うために彼の発展させた開いた境界クラスター模型(OCM)を説明しました。開いた境界(外向き波の境界条件)はクラスターの有限性による人為的影響を取り除きます。物性理論研究者の米満准教授はさまざまな物質の相転移に強く結合した電子ダイナミクスを扱う研究課題、具体的に言うと伝導性、誘電性、磁気的感受率に対する電子正孔の光励起効果を説明しました。彼の研究してきた現象は、電荷移動錯体における光誘起中性-イオン性/常誘電-強誘電相転移、1次元二量化モット絶縁体における電荷移動励起、2次元有機塩の電荷秩序に対する電子相関と格子ひずみの効果などです。

他の5つのグループは、分子動力学(MD)シミュレーション法(この方法論の拡張を含む)を大規模に使うことによって必要に応じて電子構造計算と結合させて、さまざまな複雑分子系を扱っています。平田教授は基本的なRISM理論の考えを最初に考案された領域よりもはるかに拡張するという広範囲に及ぶ業績でももちろんとても有名です。蛋白質へのイオンのサイト選択的な結合、特に蛋白質に突然変異を導入したときこれがいかに変わるか、に対する応用を説明しました。ほかの応用は、高圧下の蛋白質にいかに水が押し込められるか、これがいかに蛋白質の変性にいたるかを示すことでした。斉藤教授の仕事は凝縮相におけるダイナミクス、主に水溶液に関わることです。揺らぎと構造変化を調べるためにMDシミュレーションを使って、RAS蛋白質のGTP加水分解に関連する構造変化に対する印象深い研究を説明しました。構造はQM/MMエネルギー計算で特徴付けられました。また2次元赤外分光の計算に必要な高次の時間相関関数、特に水の分子間ダイナミクスに関する相関関数に対するMDシミュレーションを説明しました。森田教授は分子アンサンブルの境界領域に最も敏感な性質である和周波発生(SFG)スペクトルの計算に焦点をあてたMDシミュレーション計算法のとても大規模な発展を説明しました。このような実験から有益な情報を引き出すにはこのように注意深いスペクトルの理論シミュレーションが本質的なことを強調しました。またMDシ

ミュレーションを実行可能にするのに必要な柔軟性と分極性をもったポテンシャルのとても注意深い発展を説明しました。

岡崎教授は水中のミセル、脂質二重層、膜中コレステロール分子など巨大な分子に対する最先端の MD シミュレーションを説明しました。また水中の CN イオンの振動緩和に対する MD シミュレーションを説明しました。これは溶媒を表す調和的な影響関数を使ってなされたもので、調和模型は溶媒の瞬間的なノーマルモード (INM) 模型から来ています。これを行うことで、第一溶媒和殻の水分子だけが緩和に寄与すること、そして CN イオンからの振動エネルギーが主に水分子の曲げモードと回転/秤動モードに蓄積することを示すことができました。岡本教授の研究も古典 MD シミュレーションに焦点をあてており、蛋白質折り畳みなど真に複雑な過程を扱うときに重要なモンテカルロ (MC) 法と MD サンプリング法の改良を主に行っています。直接的なアプローチでは極小点に “ 捉われる ” 傾向があり、アンサンブル全体を正確にサンプルすることができません。マルチカノニカル MC サンプリング、レプリカ交換、並列焼き戻し、マルチオーバーラップ MD 法などのアルゴリズムを発展することで役立ちました。アルツハイマー病の重大な側面であるアミロイド形成へのこれらのアプローチの応用を説明しました。

序文でも述べたように、分子研の理論グループにより取り組まれている問題の多様性はとても驚異的です。業績の質がとても高い事実がこれをさらに目覚ましいものにしていきます。私の総合的な発見は理論 / 計算グループが絶好調であるということです。唯一提言することは、将来の教員選定に際し、候補者の聡明な質と認識される創造性に焦点を当て続け、特定の話題性のある研究領域に (もちろん、理にかなった範囲で) 焦点をあてすぎないことです。私は学科や委員の類が研究の最も実り多い方向を予言しようとするのがとても下手なことを見てきました。むしろ、私の経験では最良の方向は最良の若手研究者が選ぶ方向です。

7-2 光分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 8 日（水）

委員 太田信廣（北海道大学電子科学研究所 教授）
春日俊夫（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授）
高橋 隆（東北大学大学院理学研究科 教授）
大島康裕（分子科学研究所 教授）
大森賢治（分子科学研究所 教授）
岡本裕巳（分子科学研究所 教授）
加藤政博（分子科学研究所 教授）
小杉信博（分子科学研究所 教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 10 月 15 日～17 日

委員 Alfred Laubereau（Professor, Technische Universität München）

7-2-1 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なった。

光分子科学第一研究部門 岡本グループ、大島グループ
光分子科学第二研究部門 大森グループ
光分子科学第三研究部門 小杉グループ、見附グループ、菱川グループ
分子制御レーザー開発研究センター 平等グループ
極端紫外光研究施設 加藤グループ、木村グループ、繁政グループ

(1) 全体討論

所内委員 F H：（組織の再編と領域の新設について概要説明）

所内委員 F：このような組織再編に関して、所外の立場からのご意見やアドバイスがあれば伺いたい。

外部委員 B：UVSOR のメンバーが施設と領域の両方に入っているのはどのような趣旨か。

所内委員 F H：施設のメンバーは二重国籍のような形とし、施設外のメンバーも施設を自分の問題と考えることを目論んでいる。

外部委員 C：そのような形にしたことにより具体的に新たな協力体制はできたのか。

所内委員 H：具体的には今後の課題と考えている。レーザーセンター等で検討中である。自由電子レーザー等の将来構想もあり、UVSOR 教授がレーザーセンターを併任している。

外部委員 A：領域内の各グループの方向性のバランスが取れている感じがする。各種波長，時間領域の分光，空間分解分光，高強度光等。一方で，グループの独立性に固執せず，数グループで一つのことにとりかかるようなことを考えてもよいのではないか。

所内委員 E：エクストリームフォトンクス事業はそれに近い考え方で進めている。レーザーセンターでは共同利用の負担が減り，研究上 3 本の柱（光源開発，超高速・量子制御，空間分解観測）を進めるような方向で考えている。

外部委員 A：昨今では理論との共同研究も大切になっているが，これはどうなっているか。

所内委員 E：一部の研究グループでは理論のグループとの共同研究を開始している。

外部委員 A：大学等では、特任等の枠組みを利用して、グループ内に異なるバックグラウンドを持つメンバーを入れるようなことも行われつつある。いずれにしても、バランスはよく取れた構成だと思う。

外部委員 C：施設のメンバーが領域に入ったことで、施設の研究者が自分の研究を進めるにあたっての環境にも配慮されているか？

所内委員 H：UVSOR の研究者は、自分専用のビームラインを作る、施設のビームラインを用いて自分の課題を進める等のことを行っている。以前に比べてサービスの負担は減っている。

外部委員 C：サービス中心でなく、自らの研究でアクティビティを是非上げてほしい。

外部委員 B：分子研内では UVSOR は大きな組織だが、その中で大きな装置を維持するグループ、使うグループの切り分けをどの程度しているか。

所内委員 H：現在では全グループについて、自分のグループのアクティビティを上げることを優先している。人事を進めるときには研究面を重視して採用する。

外部委員 B：技術職員に維持管理を任せる等の方法で、各グループがより研究アクティビティを挙げる環境を作ることはいかないか。技術職員への高給与が前提となるかもしれないが。

所内委員 H：通常のビームラインではそれに近くなっている。研究者は維持と老朽化対策よりも、将来を見据えた開発を優先して行い、維持については技術職員にかなり任されている面が大きい。それが結果的に UVSOR の性能を時代に合わせて維持することになる。

外部委員 A：大学では技術職員が大幅に削減されているが、分子研ではその点はどうか。

所内委員 H：研究技官が減っている。施設は現在までのところ、減らさずに来ている。

所内委員 F：施設の技術職員が大きく削減になれば、分子研の存在意義の根幹にも関わってくる。

外部委員 A：施設の技術職員の確保は守ってほしい。退職後の再雇用、技術継承等はどうなっているか。

所内委員 H：技術課長になってからの退職の場合は、既に現場を離れており、再雇用は困難になる。今後、必ずしも技術課長からの退職のケースだけではなくるので、再雇用を考える必要はあるだろう。

外部委員 A：研究グループの人数が 5 名前後で、大学と比べて人数が少ないが。

(所内委員)：本当は是非とも増やしたい。

外部委員 C：総研大の学生数はどの程度か。

所内委員 F：定員としては 1 学年 12 名程度。

所内委員 H：平均でその程度だが、実際に分子研 2 専攻への志望については合成系が多く、光分子科学領域への志望学生は比較的少ない。受託学生等が増えればよいのだが。

外部委員 A：公費を人件費に使える自由度が必要では。研究者の質と数は重要なので、予算に関する自由裁量があるのであれば、必要に応じて増やせるようにするのがよい。

所内委員 F：現在大学附置研に関して見直しの圧力があり、その先には分子研を含む共同利用機関にもその圧力がかかる可能性が十分ある。そのときに、共同利用機関としての機能をうまく果たしているかどうかの重要になるが、その側面に関する分子研の評価をお尋ねしたい。

外部委員 A：例えば今年度開始した化学系ネットワークを考えると、大型装置の共同利用等は、大学の教員（特に准教授や助教）が独立性を保っていくには必須である。小さいグループになると、大きな装置をグループ単位で持ったり維持することは困難になる。今後グループの細分化が加速することは十分ありうる。分子研はその役割においても重要である。

所内委員 F：聞くところでは、現状では化学系ネットワークの大学間の利用が少ない点が問題で、改善の必要があるとのこと。現場でのこの事業に対する必要度はどうか。

外部委員 A：現場で、まだ「あそこに行けばあの装置が使える」という意識がまだ十分にない。周知が進んで一般的になれば、相互利用も頻繁になるのではないかと。アイデアのある研究者は積極的に利用するはず。

所内委員 H：大学の一部の研究者は大きな予算を持っていて、そのような事業を必要としなくなっているが、一方で予算削減が厳しく、このような事業に対する要求が高まっているようにも感じる。

外部委員 C：自分も分子研の共同利用の枠組みは利用させてもらっている。共同利用は重要な側面として機能していると思う。しかし分子研のレベルを保つためには、それだけでよいはずはなく、しっかりした研究者をおいておかないと、大学との競争にも勝てなくなってくる。共同利用と独自研究の両方が必要である。

外部委員 A：その意味では、学生が少ないというのは困難な状況。

所内委員 F：大学と連携大学院を組むという動きが分子研内でも一部で検討されている。

外部委員 C：最近の学生は研究設備等の面を結構よく見ており、それで志望先を考えている。分子研では設備が充実しているが、学生の志望の状況はどうか？

所内委員 F：学生の志望は多くなく、集めるのが大変である。博士後期への入学金等も問題である。

外部委員 B：入学金は、何とかして免除すべきである。

外部委員 A：大学では COE 等の予算があり、学生に対するケアが手厚くなってきている。そのような手段を使って、学生の引止めにも必死である。大学の中でさえ大変な状況である。

(2) 国内委員の意見書

委員 A

I. 研究領域の評価

光分子科学研究領域に所属する岡本、大森、大島、菱川、平等、松本氏らの各グループは、何れもレーザーが関与した研究を進めているが、そのレベルは総じて極めて高いと評価できる。

(1) 分子研の役割、寄与と位置付け

分子科学研究所の役割は、分子科学の研究分野において世界をリードし、世界にその成果を発信し、社会への学術的および文化的貢献を果たすことにあると思われる。分子科学の大きな柱として、電子構造や分子構造に関する研究、種々の反応ダイナミクスとその機構解明に関する研究、分子集合体により形成される機能物性研究が考えられており、さらに最近では生命現象の分子論的解明も対象となっている。これらは勿論、お互いに強い相関をもっている。今回の評価対象グループは、分子科学の中でも光、特にレーザーが関与した研究を行っている。岡本氏らのレーザー光を用いた独自の二光子励起蛍光イメージング分光計測法の開発による金ナノロッドの研究はナノ粒子の電子構造に関する研究であり、大森、大島、菱川の各グループの研究は、生成する電子状態、振動状態の制御、さらには反応ダイナミクスの制御をレーザー光により行うものである。平等グループは光源としてセラミックを用いた固体レーザーの開発を進めている。松本グループは触媒反応等も密接に関係する表面吸着種の電子構造や反応ダイナミクスをレーザー

光を用いた分光法の開発により進めてきた。このように研究の方向性は、主にレーザー光を用いた構造と反応ダイナミクスの解明およびその制御を目指しており、いずれも世界をリードする成果につながっている。

(2) 各研究分野の研究内容と各研究グループに対する個別評価

岡本氏らは、近接場二光子励起分光・イメージング測定により金ナノロッドの励起状態の波動関数の形状を顕微分光学手法で初めて直接明瞭に可視化することに成功し、関係する一連の研究を精力的に行っている。金の二光子励起発光を用いた研究を最近よくみかけますが、その先鞭をきった研究といえる。また金属微粒子の集合体では、光照射により微粒子間の空隙に強い光電場が発生し、それが表面増強ラマン散乱の主な起源になると理論的に考えられていたが、二光子励起発光イメージング法を適用し、回折限界以下の空間分解能で光電場を可視化することに成功し、実験的にその妥当性を明らかにしている。これらの研究は非常に高く評価されるべきである。今後、これらの研究がどのように進展するのかに多いに注目したい。

大森氏らは、二つの分子波束の量子干渉をコントロールできることをお互いの位相がアト秒時間スケール以内でロックされている対のフェムト秒パルスを使って波束を発生させ、別のフェムト秒パルスにより時間発展を観測することにより明らかにしている。量子波束の衝突と干渉がリアルタイムで観測されたのは、非常に優れた業績である。量子干渉の時間発展がロックされたレーザーパルス間の相対位相の関数として変化することを示し、このことを利用して分子の波動関数に含まれる振幅と位相の両方の情報を読み出せることを示している。小さな気相分子を用いての研究は確実に進展しており、今後の固体試料への発展を多いに期待したい。

大島氏らは、振動や回転に関する量子波束や状態分布を操作する方法論を、高輝度かつコヒーレンスを有する光との相互作用を活用することに開発している。具体的には、光電場と分子との相互作用を利用することにより、回転状態分布を特定の準位に集中させ、その量子波束を特定できることを示した。またメチル基内部回転の量子波束運動の実時間観測にも成功するとともに、量子波束の緩和過程への振動・回転相互作用の効果を実験的に示している。高分解分光法による分子構造の精密決定に関するこれまでの深い知識を基にした、独自の方向性が感じられ、着実に進展していることが伺える。

菱川氏らは、極短パルス強レーザー照射時のクーロン爆発過程およびその他の分子ダイナミクスに関する研究を行っている。例えば、コインシデンス運動量イメージング法により、分子座標系の配向とフラグメントの運動量の相関をクーロン爆発事象毎に計測し、電子および核のダイナミクスがレーザーの偏光方向に応じて変化すること、すなわち電子をどの方向に揺さぶるかで分子構造を制御できることを示した。必要に応じてサブ10フェムト秒のパルスレーザーの作製等も兼ねながら進めているので、研究には時間がかかるが、その方向性および進展が確実に見てとれる。

平等氏らは先鞭をつけたマイクロチップレーザー、セラミックレーザーの開発を精力的に行っている。透明なポリクリスタル状のセラミックを用いることにより、単結晶を用いた固体レーザーに比して、多くの製作面での利点があり、最近ではフェムト秒の非常に高速のものや、非常に小型のマイクロチップを用いた高出力のCWレーザー等を開発することで産業界との連携も深めながらその研究を積極的に進めている。「マイクロ固体フォトニクス」を提唱し、レーザー光の高輝度化を実現すると共に、新たな波長変換素子の開発により紫外光から可視光、近赤外光、中赤外光から遠赤外光のテラヘルツ波領域までを手のひらサイズ光源でカバーすることにすでに成功しており、これら開発している光源は、今後幅広い応用が期待される。

松本氏らはキャラクタライズされた固体表面に原子や分子が吸着された系での超高束ダイナミクスを、フェムト秒パルスを照射することにより調べている。例えば、固体表面でのコヒーレントな核運動を時間分解SHGにより観測するとともに、振動コヒーレンスがコントロールできることを示している。固体表面での反応ダイナミクスへの研究

は非常にユニークであり、この研究分野をリードしている松本教授の転任は分子研にとっては大変残念ではあるが、今後いろんな面での共同研究を期待したい。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要度

光分子科学研究といった場合、これまでは光と物質（分子）の相互作用を摂動としてとらえ、種々の分光法を用いて物質の性質を調べる研究が主であった。かかる研究は現在も物質科学や生物科学研究において分析手段として常套的に用いられている。最近、回折限界を超えた分光手法の開発により、無侵襲かつ分子レベルで物を観るための研究が活発に行われている。この点で、岡本氏らの近接場二光子励起蛍光イメージング法による波動関数の可視化は重要な貢献と考えられる。さらに最近の技術革新により、数フェムト秒の時間幅で位相制御された光や非常に高出力のパルス光といった極限的な光を取り出すことができたようになった技術的革新により、従来になかった新たな研究領域が開発されつつある。光は単なる摂動ではなく、積極的に光で分子の状態を制御し、さらには反応を制御しようというものである。これに関しては、国内外の多くの理論研究が先行している感があるが、レーザー技術の進歩により、実験的な検証が行われるようになってきたといえる。大森、大島、菱川の各氏が果敢に取り組んでいる領域である。分子の量子制御や反応制御が光で自由自在にできるようになれば、光と分子を利用した量子情報通信、光量子コンピューターが可能とする説もある。そのための具体的な道筋が見えているとはとても思えないが、かかる可能性にも注目しておく必要がある。また光分子科学研究には光の存在は不可欠であり、平等氏らが推進しているような種々のレーザーの開発は大変重要である。

(4) この分野の発展はあるか、どの方向か

光分子科学研究領域を分子と光の相互作用を調べる研究分野と定義するのであれば、物質科学や生命科学の発展のためにもこの分野の発展を期待せずにはいられない。新たな実験手法をたえず考えながら、光技術の発展により得られる新たな光と分子の相互作用を調べることが必要である。その結果として高空間分解能、高時間分解能の新分光法が得られるのであれば、それは確実に他の研究領域の研究に有用となるであろうことは、最近の生物科学の発展が種々の光イメージング測定の発展に密接に結びついていることから明らかである。また光で反応を自由自在に制御できるようになると期待したい。興味や研究の対象を深く掘り下げていくことは勿論重要であるが、興味の対象を広く持つことも重要である。一見異なる領域間の共同研究は大変重要であり、現在行っている研究が他の分野とどのような関係にあるかを広くアンテナを広げておくことが研究の新たな展開に結びつくように思われる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

高空間分解、高速時間分解分光に基づいて、気相、固体（表面）の各層を対象とする研究者が構造と反応を主として研究を行っている。お互いの研究は非常に関連すると思われるにもかかわらず、所内での共同研究はほとんど行われていないのは残念である。表面や固体ナノ量子を扱う研究者もいるが、気相分子を対象としている方が多いという印象をもつ。気相以外に、凝集系を独自の視点から扱う研究者の存在も望ましいように思われる。この研究領域には、X線から、紫外、可視、赤外の広い波長領域にわたり、しかも連続光から超短パルス光の異なる時間幅を有する光を扱っている研究者が所属しており、また、レーザー開発に携わっている研究者も所属していることを考えると、この領域内で一つのプロジェクトを立ち上げて一緒に同じ問題に取り組むことが可能ではないか。学生数が少ないということもあり、各グループの人数は決して多いというわけではないので、グループ間の連携を是非検討して欲しい。そしてプロジェクトに必要であれば、外部の方も組み込むようなシステムを考えてはどうだろうか。将来的には大きな国際プロジェクトへと発展する可能性を視野にいれてはどうだろうか。その際に基本となるのは、各グループ独自の研究手法および実験手法である。周波数分解分光および時間分解分光を得意とする研究者と多種多彩であり、この

点では分子研の過去の良き伝統を受け継いでおり、これらの特徴を活かしたプロジェクトが考えられるように思われる。さらに分子研には、多くの理論研究者がおられることから、実験グループと理論グループの所内共同研究をもっと押し進めることも必要ではないか。

II. 分子研全体に対する意見

「大学共同利用機関としての分子研の存在意義と将来への展望」

分子研で行っている研究を中心としたプロジェクトを編成し、他の組織の方々を巻き込んでの共同研究をたえず行っている状況が理想的と考える。ただ、分子研のみならず多くの大学や研究所においても最新の大型設備が整備されている現状においては、研究設備も含めて分子研だけが突出しているとはいいいにくい。しかし、大学教員を含む多くの研究者は、一部の研究者を除けば一般にいわれているほど研究資金は潤沢ではなく、慢性的な研究費不足に悩まされているのが実状ではないだろうか。そのようなことを考えた場合、たとえば分子研が中心に行っているように、装置に関してのネットワークを構築し、それを利用することによりアイデアがあれば研究を進めることが可能なようにシステムを構築することが分子科学研究の基盤を拡げるためにも重要ではないだろうか。

ただし、このようなシステムを構築し運用することが、最先端の研究を行っている分子研の研究者の雑用を増やし、足を引っ張ることになってはこまるので、共通機器の整備だけではなく、依頼測定も可能なように測定に携わる人員を増やすことはできないであろうか。現在分子研の共同研究に関わっておられる方はある程度に限られており、まだ全国の大学が利用している、とはいえないような気がしており、お互いの共同研究がしやすいような環境造りがまだ必要なのではないかと考えている。また、国際的な観点から、たとえば分子研をアジアネットワークの中心として、5～10年任期の外国人教授のポストを造るのも一つの考えではないか。

委員 B

分子研光科学研究領域に関する評価（極短紫外光研究施設光源分野）

1) 光源性能向上について

直線部の四極電磁石の配置を変更し、エミッタンスを従来 160nm.rad から 27nm.rad まで大幅に向上させると共に、挿入光源用の直線部を確保した。比較的低いエネルギーで高輝度の電子ストレージリングの場合、電子ビーム寿命の制約が問題となる。これを解決すべくトップアップ入射実現のための計画を着実に遂行している。計画の一環であるブラスターシンクロトロンエネルギー増強はすでに終了した。この様に、第2世代のシンクロトロン放射光源であった UVSOR を、短期間の改造で第3世代光源と同等の性能にまで高めるのに成功したことは大いに評価できる。これらの光源自体の改造と共に、多様な挿入光源の整備を行っていることは大いに評価できる。

2) 光源加速器を用いた研究について

放射光源グループの研究活動に関して特記すべきことは、光源性能を着実に向上させる努力のみならず、光源加速器を用いた特徴ある研究を遂行していることである。自由電子レーザーの研究、レーザーライニング法の開発、コヒーレント放射、テラヘルツ光発生の研究などである。これらの研究水準は世界に抜きでたレベルにあり、外国研究機関との共同研究が活発になされている。また、これらの研究成果を即放射光利用研究者が共有できている。すなわち、これらの研究成果として得られた特徴ある放射光を用いた利用研究が行われている。これらの研究活動は大いに賞賛されるべきものである。

3) 将来の展望、他機関との共同研究

光源グループは光源性能をより向上させるべく、エミッタンスのより一層の低減（15nm.rad）、挿入光源のための直

線部を確保すべく、新しいリングの設計を行っている。さらに同グループは、国外を含む多くの大学、研究機関との共同研究を遂行していることは評価出来る。

4) 提言

これらの研究活動は、少数の優秀な光源研究者により遂行されていることは賞賛に値する。しかしながら、放射光源を含む加速器の研究は広大な学問分野の集大成により成り立っている。この観点から、広範囲な研究分野をカバーすべく加速器研究者を確保・拡充することは重要であろう。また加速器研究者の育成は、優秀な光源を有し、特徴ある研究を遂行している研究施設の責務であろう。他大学との共同のもとに学生、大学院生の教育に積極的に関与し、多くの加速器研究者の養成を行っているが、より一層の努力をお願いしたい。

委員 C

光分子科学研究領域には、主にレーザーを使用するグループと放射光を使用するグループがある。レーザーを用いた研究グループでは、まさに state-of-art とも言うべき緻密で高精度の光分子科学研究が強力に推進されている。各研究グループの研究ピークは非常に高く、どれをとっても世界の第一線に伍している。ただ惜しむらくは、各研究グループ間の協力の成果がはっきりとした形では見えていない。ピークを保ちつつその間の谷を埋めることで大きな山を作れることを期待したい。

放射光を利用する研究グループは、比較的少人数の構成でありながら、性能を飛躍的に向上させることに成功した UVSOR-II を用いて世界最先端の研究を推進している。以下に個別に意見を述べる。

小杉グループ

比較的単純な構造を持つ原子分子の高分解能内殻励起スペクトルの実験および理論的研究を精力的に推進しており、世界のこの研究分野をリードする研究グループである。とりわけ、内殻励起状態において振電相互作用や Rydberg - 価電子混合などポテンシャルエネルギー曲面の詳細な知見が得られることを明確に示した最近の対称性分離内殻励起分光法の研究成果は、国際会議の基調講演や招待講演に取り上げられるなど、世界的に高く評価されている。また、理研・阪大グループと共同で行った「DNA の共鳴光電子分光」は、生体物質に光電子分光を適用してその伝導機構を探るというオリジナリティの高いユニークな研究であり、今後の研究発展の一つの方向を示すものと言えよう。

見附グループ

フラーレン C₆₀ の真空紫外線から軟 X 線領域の光による光励起電離解離過程の非常に詳細な精度の高い実験的研究を行っており、当該研究領域において注目を集めている。今後、本研究を通して蓄積してきた高い実験技術や解析法の、より広範な分子系への適用発展が強く望まれる。

繁政グループ

分子の内殻励起における多電子過程とその崩壊ダイナミクスの研究と、そのための新しい計測法や計測装置の開発を行っており、本研究領域における世界のフロントランナーである。とりわけ、窒素分子の 1s 電離しきい値近傍で中性準安定解離種が効率的に生成することを見出した最近の研究は、光電子の再捕獲を示唆するものとして大きな注目を集めている。さらに KEK-PF と共同で開発した新型磁気ポトル電子エネルギー分析器は、高い捕獲効率と高効率の多電子同時計測を可能とするもので、本装置を用いた今後の研究の進展に期待したい。

木村グループ

赤外および光電子分光を用いて、f 電子系を中心とした強相関化合物の物性発現機構と電子構造の関係を研究して

いる。放射光を用いた多重極限下での赤外分光研究のパイオニア的存在であり、豊富な経験と実績を有している。とりわけ最近行われた CeSb の低温・高圧・高磁場下での測定で、擬ギャップの存在を初めて実験的に見出した成果は、長年の問題を解決するものとして大きな注目を集めている。また、本グループが中心となって建設を進めてきた超高分解能光電子ビームラインは、低光エネルギー領域に的を絞って固体バルクの電子構造を直接観測しようというものであり、現在の光電子分光研究の目指す方向に合致しており、今後の大きな進展が期待できる。

7-2-2 国外委員の評価

原文

Director-General Hiroki Nakamura

Institute for Molecular Science

Okazaki, Japan

Report

of my visit of the Institute for Molecular Science (IMS), October 15–17, 2007

During my visit of the IMS on October 15 to 17, 2007 the opportunity was given to me to meet the leading scientists of the Department of Photo-molecular Science including the Laser Research Center for Molecular Science and of the UVSOR facility. I had intensive open discussions of the current scientific work with inspiring displays of scientific ideas and analyses of the present frontiers of research. The present report is focused onto this Department and all subsequent statements refer to the Department and not necessarily to the IMS in general. The informal interviews of the group leaders provided information about future developments and of possible shortcomings due to the limitations of available funds. I also visited several labs and the UVSOR facility giving me direct insight in the experimental investigations and the developed experimental techniques. The level of sophistication of the acquired and self-built instrumentation is impressive and is highly competitive to the equipment and facilities in other world-wide leading research institutions in the field.

Professor Hiromi Okamoto investigates collective electronic excitations of nano-structured air:metal interfaces by the help of scanning near-field spectroscopy, which is a field of particularly great interest. The experimental techniques involve one- and two-photon induced luminescence, surface-enhanced Raman scattering and different approaches of near-field transmission measurements providing state-of-the-art images of nanoplatelets, -rods and other structures with a spatial resolution of 100–50 nm. Most important, a time resolution of 100 fs was implemented in the interface spectroscopy using ultrashort laser pulses. The inventive combination of local, temporal and spectral information provides a deeper understanding of the observed features, *e.g.* of longitudinal plasmon resonances of gold nanorods. The work has been also extended to molecular nanowires observing longitudinal propagation of the optical excitations.

Professor Yasuhiro Ohshima has been developing methods for the optical manipulation of quantum state distributions. Current activities are focused on nuclear motions, *i.e.* rotational and low-frequency vibrational wave packets relevant for chemical processes. Both ultrashort laser pulses and laser sources with high spectral resolution are used to study molecules at low temperatures in the

supersonic expansion including molecular clusters. The investigations pave the way for a fully state-resolved measurement of reaction dynamics. To this end, new techniques have been developed. An example is excitation pulse sequences representing significant progress for the manipulation of quantum state distributions.

A remarkable achievement are the measurements of phase-controlled interferences of vibrational wave-packets of Professor Kenji Ohmori, investigating small molecules in the supersonic expansion. Using highly reproducible femtosecond laser pulses attosecond time resolution is obtained using a special, amazingly stable Michelson interferometer that generates the phase-controlled linear superposition of two excitation pulses. It is demonstrated that the phase information of the pulse pair is transferred to the vibronic excitation of the molecules *e.g.* I₂ yielding both the amplitude and phase information of the wave function of the molecular ensemble. In addition the population distribution of vibrational eigenstates is measured with narrow-band ns-pulses. The results of this work allow novel quantum computational applications, *e.g.* the development of logical quantum gates.

Coherent control is also the key word for the work of Professor Akiyoshi Hishikawa, studying atoms and molecules with high-intensity sub-10-fs laser pulses in the range of 10¹⁵ W/cm². Under such conditions the external laser field is comparable with the internal Coulomb field of the molecules leading to new phenomena. An example is the Coulomb explosion of hydrogen sulfide, the dynamics of which was studied by coincidence momentum imaging of the fragment ions. The results were interpreted in terms of charge-transfer states that control the structural deformation. It was shown that the explosion process can be manipulated by the help of the polarization of the laser pulse. For other molecules the same imaging technique provided evidence for transient hydrogen migration that competes with the dissociation process. The generation of attosecond pulses via high-harmonic generation in neon is in progress implementing even higher temporal resolution in these investigations.

Considerable progress was achieved in the field of diode-pumped lasers by Professor Takunori Taira, who demonstrated novel laser systems with high cw output power exceeding 300 W. The properties of the developed microchip solid state lasers and nonlinear frequency conversion schemes are striking and will attract considerable technological interest. The impact on the fundamental research of the IMS is not obvious.

It is an important function of the IMS to make advanced instrumentation available for guest scientists, in particular beam lines of the UVSOR facility. Under the direction by Professor Nobuhiro Kosugi and in collaboration with Professor Masahiro Katoh important progress has been achieved. Installing bending-magnet and undulator beamlines the upgrading of the system to UVSOR-II was completed with reliable operation for beam energies of 750 MeV. Options for a further increase of emittance and photon energies in the soft X-ray region are pursued at the present, demonstrating the special expertise of Professor Katoh. An example is the free-electron laser of UVSOR-II, the short-wavelength limit of which has been shifted below 200 nm, with a pulse duration of 10 ps and a maximum output power of 1 W. Using the laser bunch slicing technique with a synchronized femtosecond Ti:Sa laser, intense THz pulses are now available in the 1 ps range.

The research of Professor Kosugi is at the fore-front of inner-shell excitations dynamics of molecules in the vacuum UV that were studied by resonant photoelectron spectroscopy and soft X-ray emission spectroscopy. The wide range of interests includes VUV and X-ray spectroscopy of free molecules, molecular clusters and solids.

Another IMS group using the UVSOR system is the one of professor Koichiro Mitsuke who has an impressive record of publications on photoionization and photofragmentation phenomena. His most recent work that is concentrated on the multiple ionization of C₆₀ and C₇₀ and the photoabsorption of metallofullerenes in the soft X-ray region will receive great interest of the scientific community.

He has developed a new design of a ZEKE photoelectron spectrometer that utilizes the UVSOR storage ring.

An important application of the UVSOR machine in the infrared is devoted to strongly correlated electron systems investigated by Professor Shin-ichi Kimura. The electronic structure of bulk metallic glasses and multi-element amorphous alloys was obtained by synchrotron light photoemission spectroscopy and compared with theoretical simulations advancing the understanding of the glass forming ability of these compounds. The results are significant.

Professor Eiji Shigemasa also benefits from the UVSOR facility in his investigations of molecular inner-shell processes of gas-phase molecules in the soft X-ray region. Topics are multi-electron processes induced by single photon absorption that reveal the properties of multiply excited states (including decay dynamics) and the dissociation dynamics of core-excited molecules. In this context an innovative momentum imaging spectrometer for anions was developed. Examples are double photoionization of Ne, Xe atoms and N₂ molecules, photo-fragmentation of CF₄ and electron correlation in the Auger decay of noble gases. Very detailed, quantitative results were obtained in these studies.

In summary I can say that the scope of scientific interest is wide spread and addresses the key areas of fundamental research in molecular science. The expertise of the scientists is excellent. The scientific output as confirmed by the numerous publications in the leading international journals is significant, in spite of short comings to be addressed below.

Comments

One general impression is that the research groups in the institute are not very large, especially the number of graduate students and post-docs is rather small. Although the limited size may allow for a larger number of different activities, under-critical size limits the progress of the scientific work. In fact, comparing the structure of the groups with other places in Europe and North America the shortage of graduate students and post-docs is evident. It is proposed to attract more graduate students to the institute, intensifying in this way also the collaboration with universities. The effort required for the training of students is paid back by the contribution of young coworkers to the research. Most important, the acquired expertise may be furtherly used in subsequent post-doc activities. In other words the availability of highly gifted post-doc researchers is notably favored by a reasonable PhD-program.

The obvious explanation for the present lack of graduate students and post-docs in the Department of Photo-Molecular Science obviously is the lack of funds for these purposes. The Department should make an effort to enlarge funds available for stipends and scholarships as well as for current expenses required for the intensified experimental activities. In addition, the personal support of the individuals has to improved, i.e. the size of the stipends that seems unattractive for students from abroad. I understand that the IMS is involved in collaborative programs in this respect, but I seriously doubt that the financial frame of these programs compares with the actual requirements.

Another point in the personal structure is the limited size of the technical staff both of the Department and of the UVSOR facility. Compared to the situation for related research at Max Planck Institutes and German universities there is a notable difference and the size of the technical staff appears to me as non-optimal. I propose to re-consider the number of technicians that directly contribute to the experimental investigations. Again, this includes a financial problem since additional resources would be required for a larger technical staff.

The funds available for instrumentation at the IMS appear unsatisfactory. The present situation at the IMS obviously reflects the result of a world-wide trend that until recently politics supported projects in technology and applied research rather than fundamental science. Since molecular science is rapidly developing the relation between basic research and applications is rather close and a sound balance between the different directions of research and development has to be regained. This was recognized in the meantime and the mentioned trend stopped in several industrial countries. An example here is Germany where substantial additional funds have been made available for selected institutions towards basic research. To my understanding similar plans are being discussed in Japan and positive decisions in this respect are urgently needed to maintain first rank research. I wish to emphasize that the IMS with the Department of Photo-Molecular Science should participate notably in such an improved funding.

Garching, December 19th, 2007

A. Laubereau

訳文

分子科学研究所 中村宏樹 所長 殿
日本，岡崎市

分子科学研究所（IMS）訪問にかかる報告書，2007年10月15 - 17日

私が2007年10月15日から17日に分子研を訪問した際，レーザーセンターとUVSORを含む光分子科学研究領域の研究グループリーダーたちと会うことができました。進行中の研究に関して突っ込んだ率直な議論を行ないましたが，それらは研究の最前線における科学的なアイデアと解析の着想に満ちたものでした。この報告書はこの領域（光分子科学研究領域）に関する事に絞っており，以下の記述は必ずしも分子研全体に係ることではないことをお断りしておきます。グループリーダーとのインフォーマルな面談を通じて，将来の発展の可能性や資金不足のために十分でない点等に関する事も知ることができました。UVSORの幾つかの研究室も回り，実験研究と開発された実験技術に関して直接知ることができました。購入された装置や自作装置群は洗練されたもので，そのレベルに感銘を受けました。これらはこの分野における他の先導的な研究施設の装置と比較しても世界的に高い競争力を持つものです。

岡本裕巳教授は，走査型近接場分光を用いて金属ナノ構造：空気界面における電子の集団励起を研究しており，極めて興味深い研究分野であると言えます。用いられている実験法は一光子及び二光子励起発光，表面増強ラマン散乱，及び異なった手法として近接場透過測定で，これらを用いてナノプレート，ナノロッド，その他の構造体について，空間分解能100-50 nmの最先端のイメージングを可能としています。特に重要なのは，超短レーザーパルスを用いて100 fsの時間分解能で界面の分光に成功したことです。局所的，時間的，分光学的情報の独創的なコンビネーションによって，金ナノロッドの縦プラズモン共鳴などの特徴的な観察結果に対して深い理解を可能としています。またこの研究法は分子ナノワイヤの光学励起の伝搬の観測にも適用しています。

大島康裕教授は量子状態の分布を光学的に操作するための方法論を開発しています。現在，分子の回転や化学過程に関する低振動数核波束運動等，原子核の運動に焦点を当てた研究活動を行っています。超短パルスレーザーと高

スペクトル分解レーザー光源の双方を使い、超音速噴流中の低温分子や分子クラスターを研究しています。この研究は反応ダイナミクスの完全な状態選別測定への道筋を付けるものです。それを実現するための新たな技術開発も行なわれています。量子状態の分布操作についての重要な進展を提示したパルスシーケンスの開発はその一例です。

大森賢治教授は超音速噴流中の小分子で、振動波束の位相を制御した干渉を観測するという、目覚ましい成果をあげています。再現性の高いフェムト秒レーザーパルスを用い、独特な驚くべき安定性をもつマイケルソン干渉計で、二つの励起パルスの位相制御された線形重ね合わせを実現し、アト秒時間分解を可能としています。パルス対の位相情報が I_2 分子等に転写でき、分子集団の波動関数の振幅及び位相情報を与えることが可能であることを示しています。更に、振動固有状態の分布を狭帯域ナノ秒パルスで測定しています。この研究の成果は量子論理ゲートの開発等、新たな量子計算への応用を可能とするものです。

コヒーレント制御は菱川明栄准教授の研究キーワードでもあり、彼らは 10^{15} W/cm²領域のサブ10フェムト秒高強度レーザーパルスを用いて原子・分子の研究を行っています。このような環境下では、外部レーザー電場は分子内のクーロン電場と同程度となり、新たな現象を引き起こします。例えば、彼らは硫化水素のクーロン爆発の動的過程がフラグメントイオンの運動量コインシデンスイメージング法により研究しています。その実験結果は、電荷移動状態が構造変形を決定するとして解釈しています。爆発過程がレーザーパルスの偏光によって制御可能であることも示されました。他の分子についても同じイメージング法を適用し、水素原子の移動が解離と競合することを示すことを突き止めています。ネオン中の高次高調波発生によるアト秒パルス発生の研究が進行中で、それはこれらの研究に更に高い時間分解能を与えるものです。

平等拓範准教授のダイオード励起レーザーの分野での成果は注目すべきもので、新たなレーザーシステムで300 Wを超える高出力cw発振を立証しました。開発されたマイクロチップ固体レーザーや非線形波長変換の方法は目覚ましいもので、技術的にも大きな興味を引くものとなるでしょう。分子研における基礎研究へのインパクトについては未知数です。

分子研、とりわけUVSORのビームラインでは、外来の研究者が利用できる高度な装置群を制作することが、重要な機能の一つです。小杉信博教授の指揮下、また加藤政博教授の協力により、重要な進展がなされています。偏向磁石やアンジュレータービームラインの設置により、システムのUVSOR-IIへのアップグレードが完了し、750 MeVのビームエネルギーで信頼性の高い運転が可能となっています。現在更に、加藤教授の高度で専門的な技術を活かした、エミッタンスや軟X線領域の光エネルギーの改善に向けた努力がなされています。例えばUVSOR-IIの自由電子レーザーでは、10 psのパルス幅で、短波長の限界は200 nm以下に及び、最大出力は1 Wに達しています。フェムト秒チタンサファイアレーザーと同期したレーザーバンチスライス技術により、現在、強いテラヘルツパルスが1 psの領域で得られるようになってきました。

小杉教授の研究は、真空紫外域の共鳴光電子分光や軟X線発光分光を用いた、分子の内殻励起ダイナミクスの最前線に位置づけられるものです。その興味は多岐にわたり、自由分子、分子クラスター、固体等を含む系について、VUVやX線の分光を行なっています。

UVSORを利用している今一つの分子研のグループである見附孝一郎准教授のグループでは、光イオン化と光フラグメンテーション現象に関する印象深い論文を出しています。彼は最近では、軟X線領域における C_{60} と C_{70} 分子の光イオン化と金属内包フラーレンの光吸収に集中しており、この仕事は研究コミュニティの大きな興味を引くと思われます。彼はUVSOR蓄積リングを用いたZEKE光電子分光の新装置設計・開発も行なっています。

木村真一准教授による強相関係の研究において、UVSOR 装置の赤外域での重要な応用が行なわれています。バルクの金属ガラスや多成分アモルファス合金の電子構造が、放射光による発光分光によって得られ、理論シミュレーションとの比較により、これらの化合物のガラス生成能に関する理解を深めました。この成果は意義のあるものです。

繁政英治准教授も、UVSOR 施設を利用して、気相分子の軟 X 線領域における内殻過程の研究を行っています。1 光子吸収で誘起される多電子過程を用いた、多電子励起の性質（緩和のダイナミクスを含む）の研究や、内殻励起分子の解離ダイナミクスの研究をテーマとしています。この目的のために、革新的な陰イオンの運動量イメージング分光装置を開発しています。例えば、Ne 原子や Xe 原子、 N_2 分子の二重光イオン化、 CF_4 分子の光フラグメンテーション、また希ガスのオージェ緩和における電子相関の研究等がなされています。これらの研究では非常に詳細で定量的な結果が得られています。

結論として、研究対象の範囲は多岐にわたり、また分子科学における基礎研究の重要な分野に取り組んでいると言えます。研究者の各専門領域における研究レベルは非常に優れています。下記に述べるような問題点はあるものの、サイエンティフィックな成果の高さは、国際的な一流の論文誌に多数論文が公表されていることから裏付けられています。

コメント

印象として、研究所内の各研究グループはあまり大きくなく、特に大学院生や博士研究員の数はかなり少ないと感じます。限られたサイズであることによって多くの異なる研究活動が可能になるという面はありますが、限界以下のサイズでは科学研究の進展を制限してしまいます。実際に、ヨーロッパや北アメリカの他の機関のグループ構成に比べて、大学院生や博士研究員の不足は明らかです。より多くの大学院生を研究所に引きつけることが望まれます。それによって大学との協力も強固になるでしょう。学生の養成に必要な取り組みによって、若手共同研究者の研究への寄与という見返りが得られます。そして特に重要なのは、彼らが獲得した専門知識が更にそれ以降の博士研究員としての活動に役立つということです。言い換えると、高い能力を持つ博士研究員の供給には適切な博士課程プログラムが強く望まれるということです。

現在光分子科学研究領域に大学院生や博士研究員が不足しているのは、明らかにそのための資金が足りないからでしょう。当該研究領域では、実験研究を強化して行くのに必要な資金を得ることに加えて、給与や奨学金のための資金を拡大することへの努力が必要です。加えて、各個人への待遇の改善、具体的には外国人留学生にとって魅力に欠ける現在の給与を改善する必要があります。これに係る研究協力プログラムに分子研が関わっていることは知っていますが、その財源が実際に必要な額に見合っているとはとても思えません。

人員構成に関して今一つの問題点は、研究領域と UVSOR 施設の両方で、技術スタッフの人数が限られていることです。関連研究領域のマックスプランク研究所やドイツ国内の大学に比較すると、技術スタッフの人数には大きな差があり、私にはこれが適正規模であるようには思えません。私は、実験研究に直接関わることでできる技術職員の人数を見直すことを提案致します。これもまた、技術スタッフの数を増やすことには費用が必要で、財政的な問題が含まれることになります。

分子研の研究設備構築のための資金は十分とは言えないように見受けます。この分子研の現状は、政府が最近に至るまで、基礎研究よりも技術や応用研究に関するプロジェクトを支援して来たという、世界的な傾向を反映したものでしょう。分子科学は急速に発展して来ており、基礎研究と応用の間は相当近づいています。研究と開発の方向性の違いの、適正なバランスを回復することが必要です。幾つかの先進工業国では、このことが認識されるようになり、上述の世界的傾向は終息しています。例えばドイツでは、いくつかの研究機関で、基礎研究のための付加的な資金が相当額得られるようになって来ています。私の理解するところでは、日本でも同様な計画が議論されていると聞きますが、一流の研究水準を維持するには、この点での積極的な決定が早急になされる必要があります。私は分子研と光分子科学研究領域が、とりわけそのような資金強化に参画すべきであるということを、強調したいと思います。

2007年12月19日, Garching にて

A. Laubereau

7-3 物質分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 7 月 10 日

外部委員 福山秀敏（東京大学，名誉教授・東京理科大学，教授）

榎 敏明（東京工業大学大学院，教授）

齋藤軍治（京都大学大学院，教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 7 月 23 日～24 日

委員 Peter Day（Professor, Davy Faraday Research Laboratory）

7-3-1 点検評価国内委員会の報告

物質分子科学研究領域では，平成 19 年 7 月 10 日に福山秀敏東京大学名誉教授・東京理科大学教授，榎敏明東京工業大学大学院教授，齋藤軍治京都大学大学院教授に外部委員として来所頂き，これに領域主幹が司会者として加わり，領域内の関連教授・准教授の業績発表と外部委員による評価点検の会を持った。以下に，外部評価委員による書面に記入された総合評価と個別評価の結果を記載する。

(1) 物質分子科学研究領域における研究展開に対する総合評価

委員 A

孤立した分子についての理解は十分進み，そこには挑戦すべき科学研究の大きな対象は多くない。対照的に，分子を構成要素とする「物質」の性質究明はこれからの重要な研究テーマである。分子性結晶はもとより蛋白質・DNA 等の生物物質が分子凝縮系であることを考えるとこの傾向は自然である。このような状況において，分子科学研究所に「物質分子科学研究領域」が置かれていることの意義は極めて大きく，先見性に改めて敬意を表す。実際，この領域から既に興味ある重要な成果が数多く報告されている。インパクトの大きいテーマの選択・明確なメッセージを持つ成果の提示等，「分子系の物性研究」をさらに推進するためには「物性研究」における発想法・実験手法についてより深く理解を進めることが有効であり，「物性物理」コミュニティとのより系統的な連携体制の構築が望まれる。このような「文化の異なる研究者の連携」は双方にとって大きな刺激となり重要な成果が生まれやすい。「化学」「物理」の学問としてのそれぞれの軸足を確固に保ちつつ，「分子を基礎とした物質科学」を総体的に強力に推進することが分子科学研究所には期待されている。

委員 B

分子研物質分子科学研究領域の研究活動は全体的にかなり高い水準で活動が行われている。材料開拓とその物性研究では，小林，西，薬師，中村，鈴木，佃グループは大きな存在感のある研究を行っており，小林グループの π -d 系分子導体，新規分子導体，分子性ポーラス強誘電体の実現，西グループでの銅からなるナノワイヤーの作成とその構造の解明，ナノ構造体を基礎とする新たなナノ電子機能の開拓，薬師，中村グループのラマン分光法，磁気共鳴法をもちいた有機伝導体の電荷秩序詳細の解明，鈴木グループの新しい有機ドラッグスタ材料の開拓での貢献，佃グループの構造を特定した金クラスターの開拓等は特筆すべきものである。また，実験手法では横山グループがナノ磁気構造の解明への展開に波長可変レーザーを用いることができる興味ある手法を展開しており，超高速時間分解測定への道を築くものとして期待される。また，小川グループの単一分子の電気特性と分子増の同時計測も重要な貢献である。生体物質に関しては，加藤グループは，たんぱく質分解系の制御因子である NEDD8 の作動機構に重要な情報を与え

る研究を展開し、国際的に高く評価されている。以上、分子科学における日本を代表する研究所として、その研究活動は高く評価できる。

(2) 外部評価委員 3 名による個別評価（個別の評価を（順不同）で示す）

電子構造研究部門

西グループ

ナノ構造作成と物性機能の開拓の独創的な研究である。これからの展開で新しい分野の発展が期待できる。基礎から応用にまたがっている。非常にユニークな課題に取り組み面白い結果を得ている。データを如何に論理的にまとめるかに苦労する感じである。簡単な手法による導電性ナノワイヤーの作成は非常に波及効果を持つ。また、光照射による金属クラスターやスポンジの作成も将来触媒他の応用も想定され重要である。課題として、(ナノ構造体の)電気伝導度や物性の直接測定法の確立が要請される。金属アセチリドを対象として光照射後の金属ナノワイヤーの作成過程を追求。伝導度、磁性等の直接測定手法の確立が期待される。

横山グループ

UV 磁気円 2 色性の増大の発見、高感度紫外磁気円 2 色性光電子顕微鏡の開発等大きな研究を展開しており、重要な成果として位置づけられる。測定法の開発として超高速時間分解によるスピンドYNAMIKSの研究は非常に重要である。明確なサイエンスの方向を意識した上でのユニークな装置開発を展開している。

佃グループ

金ナノ粒子の独創的な研究であり、興味ある成果が得られている。これから大きな展開が期待され、新しい成果も生まれるであろう。金クラスターの作成、物性、また触媒作用について興味深い結果を得ている。物性測定に関してより深い検討が必要であろう。新手法により、ナノサイズ金クラスターの電子状態について新しい知見が得られている。

電子物性研究部門

薬師グループ

Raman スペクトルを用いた電荷秩序を研究する着実な研究であり、関連分野への貢献も大きい。今後の研究展開にも興味がある。CO 状態の光学的な観測と詳細な相図の作成と、しっかりした成果を挙げている。SRO 相、ferroelectricity 状態の詳しい情報を得る事が将来の課題であろう。分子性結晶での重要な電子状態変化である電荷秩序に関する赤外・ラマン分光を用いた徹底した研究。電荷の自由度とスピンの自由度との相互作用過程が解明出来れば大変面白い。

中村(敏)グループ

TMTTF 系における電荷秩序状態の詳細な研究結果は、基礎科学に大きく貢献する多彩な磁気共鳴手法による研究である。機能性材料への展開が面白い。但し、小さな研究グループなので守備範囲のある程度絞る必要がある。よくやっている。着実な研究を地道に展開しているが全般的に研究の発想に後追い感がある。新しい展開を示されたが今後の活躍に期待したい。分子性結晶における電荷秩序に関して NMR を手段とした徹底した研究により新しい知見を得ている。更に、将来的に興味のある多くのテーマを追求。

小林グループ (旧分子集団動力学研究部門)

研究業績が優れており大きな実績が残されたと評価される。これからの発展も期待される。従来からの多くの業績に加えて、分子性ポラス強誘電体の初めての合成に成功した。

分子機能研究部門

江グループ

興味あるナノ物質開拓の研究であり、新しい物理化学の展開となっている。これからの研究発展が期待される。提出された論文の質は良い。(今後の)課題としてデンドリマーの配向制御、分子間相互作用の制御、単分子素子としての開発の必要性等がある。物質合成という観点からは見事。

西村グループ

NMRの測定法の開拓を基礎とした研究である。着任直後の為、これからの研究の展開が本番である。実績を積んでおり、今後の展開が期待される。可溶性の無い重要な生理活性を示す膜タンパク質の構造を解析できる固体NMR解析法、手法の開発は長いスパンでの仕事であり重要である。これからの展開が期待される。

分子スケールナノサイエンスセンター

ナノ分子科学研究部門

小川グループ

分子ナノ構造集合体を用いた電子輸送現象の研究展開であり、高いポテンシャルを持っている。優れた研究展開を行っている。カーボンナノチューブに物理吸着したZnポルフィリンの整流作用は、極めて重要な発見である。Znポルフィリンの吸着状態と整流との関係の解明が重要である。I-V特性、フォトカレント、整流性の測定に関して再現性の確認が必要。LB膜やSAMでの整流、I-V特性との比較で重要である。様々な重要な知見が得られている。ポルフィリン中の金属イオンを変えて状況の可能性を増やすことによって良い多くの知見が得られると期待される。

鈴木グループ

アクセプター性のFET材料を狙った研究であり、応用の観点から評価できる研究である。n型半導体の開発に関し良い。設計指針を立てて成功している。デバイス作成の研究者、電子構造解析の研究者らとの議論を通して優れた分子設計、更に経済設計を行って欲しい。フッ素を含む新しい有機半導体の合成に成功。

先導分子科学研究部門

加藤(晃)グループ

大きな成果がでていし、関連分野の発展にも大きな寄与が認められる。糖鎖蛋白のライブラリーを完成する事により生体超分子の溶液内での構造解明を行っており、非常に先端的な研究を進めている。蛋白質の3次構造と生体機能の関連を探るために時間分解NMRの開拓が望まれる。見事な成果であり、将来の更なる発展が期待される。印象的であった。

Comments and advice about the Department of Materials Molecular Science

Review Report, July 2007

Prof. Peter Day

Davy Faraday Research Laboratory

Royal Institution of Great Britain

London, UK

First, a most generic comment: Research at IMS in the Department of Molecular Materials Science is of a very high standard indeed, both as regards Technical accomplishment and, just as important, in attacking some important issues in this still quite new and enlarging field of science. An Institute like IMS is especially well suited to identify and solve key problems in molecular materials science because the field is, of its very nature, multidisciplinary, embracing all the traditional sub-divisions of chemistry but also crucially calling on input from physicists, crystallographers, materials scientists, as, well as people skilled in developing new physical and characterisation tools. Such cross-cutting activities are often difficult to initiate and sustain in a university environment organized along traditional disciplinary lines. As well as the quality of the individuals hired and supported to carry out the work, that factor in itself gives an important advantage to an organisation such as IMS.

In those circumstances it is legitimate to ask oneself the question whether, overall, the work coming out of the Department of Molecular Materials Science at IMS capitalises on the advantages just mentioned. There can be no doubt that much of it is highly distinguished and some of its scientists are recognised throughout the world as leaders and authorities in their particular fields. The harder question to answer is the extent to which the work is shaped by the special circumstances prevailing at IMS. By “special circumstances” I mean those pertaining to a stand-alone research institute, as opposed to what in Britain or the USA has become known as a “research university.” In the former, a Professor devotes himself full-time to research, though aided by only a small group of co-workers while, in the latter, he devotes a significant amount of effort to teaching, though often aided by a larger number of Research Associates, postdocs and graduate students. Even in many of the world’s leading research universities there remain barriers to inter-disciplinary contact and cooperation, brought about by the traditional Departmental structures (*e.g.* organic, inorganic, physical chemistry and solid state physics) which result from the demands of teaching. Where a relatively new and highly multi-disciplinary subject is concerned, in an environment freed from such Departmental barriers, one might expect to see more coordination between the individual research programmes, so that the undoubted talents of the research group leaders may reinforce one another.

General comments and suggestions about IMS

The phrase “molecular sciences” means many different things to different people. It could be said to encompass high resolution gas phase spectroscopy of small molecules, organic superconductors and most biological structures and processes. Hence it is very hard (and perhaps even misguided) to identify common themes as far as specific research topics are concerned. Looking as far as possible dispassionately from the outside, I would say that historically, IMS has achieved its highest reputation and visibility in two

fields: Vacuum ultraviolet and soft X-ray spectroscopy based especially on the UVSOR facility and electronic properties of crystalline molecular solids. It is certainly right that such topics should continue to figure in the research portfolio but equally important to look more widely when selecting new areas and the staff to pursue them.

If, on the other hand, one does not wish to define a research strategy in terms of specific topics, I see several functions which IMS is well placed to emphasise.

· Hosting unique state-of-the-art equipment for multi-user access, building on a strong in-house programme in relevant fields. Here UVSOR showed the way, and the 920Mhz NMR facility is an excellent new example. Could there be more?

· As an “incubator” of talented young researchers who, liberated from the demands of teaching for a few years, are given the opportunity to open up a new topic and cement the foundations of a career. Present policy against internal promotions certainly works in that direction.

· More speculatively, the structure of IMS could make it a suitable platform for mounting attacks on carefully chosen “Grand Challenge” problems.

A final point, which I also recall making on my previous review visit in 2003, is that attention really should be given to protecting (and then hopefully licencing) intellectual property arising from the research. From my interviews it appeared that more than one group may be doing work that carries such opportunities.

Having seen IMS evolve over the last 15 years or so, I am confident it will maintain its place as one of the world’s leading laboratories for the molecular sciences. I wish it every success in meeting the new challenges.

I would like to thank all the members of the Department of Molecular Materials Science for making me welcome and giving me such a lot to think about, and especially Profs. Nishi and Yakushi for overseeing the arrangements.

訳文

物質分子科学研究領域への批評と助言

2007年7月

Prof. Peter Day

Davy Faraday Research Laboratory

Royal Institution of Great Britain

London, UK

最初に最も総括的な意見を述べましょう。分子科学研究所の物質分子科学研究領域で展開されている研究は、専門的な実績ばかりでなく、大変重要な事なのですが、科学における尚新鮮で更に拡大しつつある分野における幾つかの重要な課題に取り組んでいるという点において、極めて高い水準にあると言えます。(周辺分野のスタッフを有する)分子研のような研究所は、それぞれの領域自体が、必然的に周囲の様々な分野を包含する、即ち、化学の伝統的な小分野ばかりではなく新しい物理学的な手法の発展に専門的な貢献をして来た人々と同様に、物理学者や結晶学者、そ

して材料科学者をも含めた人々からの大きな貢献を必要としていますから、分子物質科学の鍵となる諸問題を見だし解決して行く為には最適の場所と言えるでしょう。このような分野交差型の研究を活性化させ又維持して行くことは、従来の伝統的な専門領域研究の線に沿って組織された大学環境ではしばしば困難となるでありましょう。分子研のような組織では、この目的の為に質の高い研究者を雇用し、その研究活動を支援することは大変好都合な状況にあると言えるでしょう。

このような環境において、分子研の物質分子科学研究領域から出てくる仕事が全体的にこの組織の利点を最大限活用したものになっているかどうかを問う事は正当なことでしょう。疑いもなく、その多くが極めて顕著なものであり、何人かの科学者は世界的なリーダーであり専門分野の権威として認められています。分子研が持っている“特別な環境”によってそれぞれの仕事かどの程度有効な結果を得ているかを判断することは少しばかり難しいことかもしれませんが。この“特別な環境”という言葉によって私は(分子研が)英国やアメリカ合衆国において“研究大学(Research University)”と呼ばれているものとは、全く異なった比類のない独自の研究所であることを指摘したいのです。英国のResearch Universityの教授は、少数の共同研究者と一緒にその全時間を研究に没頭することが出来ませんが、米国においては、かなりの数の助手や博士研究員、そして大学院生の助けを得ながら、教育にも多くの時間を割かねばなりません。世界の多くの著名な研究大学においてさえ、その教育上の要請による伝統的な学科の構成(例えば、有機、無機、物理化学、そして固体物理)に起因して、学際的な接触や共同研究を実行するには大きな障害があるのです。比較的新しく、高度に学際的な課題に関しては、個々の研究者の研究計画の間での更に有機的なつながりを期待できるでしょう。これによって、研究グループリーダーの真の才能が互いに磨き上げられるでしょう。

分子研への一般的な意見と提言

“分子科学”という言葉は、それぞれの人によって異なった対象を意味するかもしれません。この言葉は、小さな分子の気相高分解能分光、有機超伝導体、多くの生物構造や(生物活性)過程を網羅していると言えるでしょう。従って、それぞれ特定の研究課題が関係するような共通なテーマを規定する事は大変困難であり、むしろ誤った方向に導く恐れがあるでしょう。外部から出来るだけ冷静に眺めてみて、分子研は歴史的に、UVSOR施設を用いた真空紫外および軟X線分光学と分子性結晶の電子物性と言う点で、高い評判と知名度を挙げてきました。確かに、このような研究課題を研究資産として受け継いで行くことも正しい道ではありますが、それと同時に重要な事は、更に広い分野を開拓し、その仕事を遂行できるスタッフを選考する事でしょう。

一方で、もし特別な課題を設定した研究戦略を定めようと望まないのであれば、私は分子研が努めて果たすべき幾つかの機能があると思います。

- ・関連する領域のコミュニティー内での強力なプログラムを作り、多くの利用者のアクセスが可能な特徴のある最高水準の装置の導入。これに関しては、すでにUVSORがその道を示しましたし、920MHz NMRは素晴らしい新規な例でしょう。他にもこのような装置の可能性があるのでないでしょうか。

- ・才能のある若い研究者が教育の義務を数年間離れて新しい研究課題を開拓し、経歴の基礎を固めるための機会を与える、いわば“培養器”としての機能を果たす。現在取られている内部昇進の禁止という方針は、明らかにこの方向に機能するでしょう。

- ・更に思いを馳せると、分子研は、慎重に選ばれた“Grand Challenge: これから挑戦すべき大きなテーマへの野心的な取り組み”を実行する適切なプラットフォームでしょう。

最後のポイントは、2003年に行った評価の際に述べた事を思い出しますが、研究から生じた知的財産を保護する

(そして望むらくは、これを権利化する)ことに真の努力が必要なことです。私が、面談した中では、少なくとも幾つかのグループがそのような可能性を持った研究を展開していると思います。

これまでのおよそ15年間の分子研の発展を見て、私は研究所が分子科学の分野において世界の指導的立場にある研究機関の一つである事を確信します。新しい挑戦に出会い、これらが全て成功する事を期待します。

物質分子科学研究領域の皆さんが私を快く迎えられ、このような多くの思索の機会を与えて頂いた事に感謝したいと思います。とりわけ、この機会の準備を頂いた西・薬師教授に感謝します。

7-4 生命・錯体分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 7 月 20 日～ 21 日，8 月 21 日～ 22 日

委員 山下正廣（東北大学大学院理学研究科，教授）
西原 寛（東京大学大学院理学系研究科，教授）
長野哲雄（東京大学大学院薬学系研究科，教授）
西野武士（日本医科大学大学院医科生物化学分野，教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 9 月 10 日，8 月 21 日

委員 Dan DuBois (Senior Scientist, Pacific Northwest National Laboratory)
Peter E. Wright (Professor, The Scripps Research Institute)

7-4-1 国内委員の評価（錯体分子科学分野）

委員 A

(1) 現状の問題

分子科学研究所が設立されてから 30 年以上が経過し，その間に「錯体化学研究所」設立に向けて錯体化学実験施設が開設された。その開設からおよそ 20 年が経過し，「生命・錯体分子科学研究領域」に改組された（あくまで錯体化学分野からの見方である）。分子科学研究所のような直轄研（全国共同利用研）は大学の附置研とも大学の講座制研究室とも違った研究体制と運営ならびに研究テーマ設定が要求される。このような変遷の中で，「生命・錯体分子科学研究領域」が今後どのような方向性を見いだすかを思索，決定する大変重要な時期を迎えている。

分子科学研究所の設立時は 10 年以上にわたって分子科学分野を中心に熱心な議論が古手や若手研究者の区別なく行われた。それは，分子科学研究所を設立した目的に合うものであった。その目的とは，当時の分子科学分野が世界的に，大型の測定装置やコンピューターを必要とする時期に向かいつつあり，それらの機器を各大学でばらばらに購入することは不可能だったため，分子科学のセンターとして分子科学研究所を設立し，そこに最新の大型機器を導入して全国共同利用研として全国の分子科学者が集まり，分子科学分野の研究者の世界トップレベルを維持することであった。更に分子研には化合物を合成し所内の測定研究者に試料を提供することを目的の一部として，関連領域や化学試料室も設置された。設立当時の分子研のスタッフは教授から助手まで錚々たるメンバーであり，身分の違いに関係なく朝早くから夜遅くまでサイエンスに対する熱い議論が毎日行われていた。その当時の助手が現在の日本の分子科学分野だけにとどまらず，化学会全体のリーダーとして活躍しているのを見れば先端のサイエンスを先導していたのは明らかである。また，数年前のノーベル賞受賞に関連する研究の一部が分子研化学試料室や関連領域で行われていたことから当時の高い研究レベルは明らかである。分子科学研究所設立の目的は十分に果たされていたと言える。

事態が変化し始めたのは設立後 20 年弱が経過した頃からであろうか？ その要因には外面的なものと同内的なものが有る。外面的なものとして，各大学において大型の機器が購入できるようになり，分子研まで出張してきて測定する必要がなくなったことである。更に「科研費」を初めとして多様・多額な競争資金を個人が獲得できるようになり，その結果，一部の研究者は分子研で共同研究や「研究会」開催の必然性が薄れてきたのが外的要因としてあげられる。

内的なものとしては，人事制度や運営制度，研究の方向性などの問題があげられる。助教には任期が付き，准教授は教授に昇任できない。よって上のポジションを得るには他の研究機関へ移らなければならないため，研究者の交流を促進する利点があるが，合成化学のような時間のかかる研究に取り組むにはリスクが大きい。また教授も含めて半講座制であるが，合成化学のようなマンパワーが必要な研究テーマは不利である。半講座が良い場合もあり，また

完全講座が良い場合も有るので、研究分野に応じて柔軟に研究室体制を変えられる制度を取り入れるのも一案であろう。また半講座であるにも関わらず、特定の教授に雑用が集中するのを防ぐためにも、マネジメントや広報を専任とする教員を雇用する対策も検討する必要があるだろう。一方、日本の研究・教育機関のなかでは、分子研教員の流動性は群を抜いて高いことは事実であり、そのために日本の殆どの分子科学研究者は何らかの形で分子研にかかわり合いを持っている。その意味で分子研の存在意義は今でも充分大きいし、影響力も大きい。

21世紀に入り、科学技術政策が大きく変わりつつある。例えば科研費のなかで「学術創成研究」がなくなり、「特定領域研究」が「新学術領域研究」へと小規模なものに改変されようとしている。このような中で分子研の存在意義は以下のような意味で重要になると考えられる。一つは「情報の集約と発信」である。直轄研の特徴を生かし情報収集を積極的に行い全国の分子科学研究者へ迅速かつ正確に発信することで分子研の存在意義は重要となる。また、特定領域研究がなくなることにより、分子研研究会の存在意義が増し、岡崎コンファレンスの重要性が増すと考えられる。このような研究会や会議への援助を増やすべきである。また、これまで特定研究により中小規模の大学の研究者は大いに助けられていたが、この機会が極端に減る可能性があり、全国大学共同利用機関としての分子研の役割は再び大きくなることから共同研究制度の充実と拡充が期待される。さらに、科学技術政策の中で「ナノ」、「バイオ」、「情報」、「環境」の重要性が強調されているが、教員の高い流動性から分子研では、この分野の研究組織の先取りは大学に比してはるかに容易であることから、積極的な対応により、21世紀にふさわしい分子研への変革が期待される。

このような過程の中で、「錯体化学実験施設」は当初は独立した「錯体化学研究所」設立に向けての準備段階として分子研内に施設として発足したが、「独立研究所」の可能性は皆無となり、「生命・錯体分子科学研究領域」に改組された。共同利用研の存在の正否はその分野のすそ野がどれだけ大きいか、かつそのすそ野の研究者たちのサポートがどれだけ得られるかに懸かっている。その意味で、全国の錯体化学者を巻き込んだ議論を、分子研がマネジメントの中核を担い、全国の広範な錯体化学者の組織である「錯体化学会」を核として進めることが重要である。これらの問題を解決するには、第一に「生命・錯体分子科学研究領域」が世界をリードする研究をすることである。この問題は、研究所にふさわしい研究テーマを行うことのできる研究者を集める人事を行うことで、ある程度の解決は可能である。第2番目としては全国の錯体化学者が共同利用研として分子研をどれだけ利用するかである。この問題も、現在、大学の運営費交付金は極端に減額されており、特に、中小規模の大学では科研費などの外部資金がなければ全く研究できない状況にある。このような状況から、分子研での共同研究や施設利用などを行うことで、大きく研究が発展することが期待できる大学の研究者を分子研の客員教授・客員准教授として採用し、それ相当の研究費を支給し、共同研究を行うことができれば、大学の苦しい研究資金状況も大幅に解決可能である。さらに共同実験のために分子研に同行した学生、大学院生が、分子研および総研大をよく理解する機会を与え、結果的に分子研の求心力を生み、錯体化学の全体の活性化に繋がると考えられる。このように、共同研究制度を質・量ともに、より充実させ財政的なサポートを全国の錯体化学者を分子研に集める努力をすることが必要である。

以上、述べたことは独断と偏見による部分も多いと思われるが今こそ、総点検をして21世紀の分子科学、錯体化学をリードするような研究所の展開に向けて日本中の分子科学者や錯体化学者を総動員して議論をすることが重要である。

(2) 個別評価

今回、面接を行った、田中グループ、魚住グループ、川口グループ、永田グループ、櫻井グループのいずれも少人数の研究グループながらすべて平均値以上の研究成果をあげている。しかし、世界でトップかといわれればそれぞれ

課題が残されている。共通しているのは、もう少しグループが大きければもっと色々な方向の研究のテーマとアプローチが可能となり、大きな発展が期待されることである。総研大生を集めることや、博士研究員（PD）を増やすことなどの方法が考えられる。最低、10名の研究メンバーは必要である。また、共通的なキーワードとして、「触媒」や「エネルギー問題」があげられるがこれでグループ間の共同研究はできないか？ 共同研究ができれば「触媒」や「エネルギー問題」をキーワードとして世界的に「生命・錯体分子科学研究領域」のカラーが強調できるのではないか？

田中グループ

炭酸ガス還元錯体触媒開発のために Ru - カテコール錯体に焦点を絞ってかなり良い成果が上がっている。他の金属、例えばイリジウムなどや他の有機配位子ではどうかなど研究の方向性は考えられるが、小グループのためにターゲットを絞らざるを得ない。研究体制の充実が課題である。

川口グループ

多座フェノール配位子を持つ金属錯体を用いた小分子の活性化について大変素晴らしい成果が上がっておりつつある。早急に論文を作成し、良いジャーナルに外部発表をすべきである。

魚住グループ

水中における不均一触媒、ナノ金属粒子の触媒、不斉触媒など、グリーンケミストリーを目指した研究が着実に進んでいる。共同研究における Lab-on-chip も将来性の有る研究テーマである。今後の展開が期待される。

永田グループ

光合成を人工分子で行わせることはエネルギー問題などの観点で興味深い。そのアプローチとしてポリカルボン酸配位子や dendrimer-porphyrin 錯体などを用いた研究の今後の成果が期待される。早急に論文を発表すべきである。

櫻井グループ

バッキーボールの最終目的はフラレンの全合成と考えられる。世界中で一時期、取り組まれていたがいまだ誰も成功していない。このテーマに集中し世界初の全合成をすることは大変興味ぶかい。金属ナノクラスター触媒を用いた研究は所内での共同研究が上手く進んでおり、今後も追及すべきである。

委員 B

(1) 全般的な問題

国立大学の法人化、国の研究支援制度の改革に伴って、現在、産官学全ての研究者の状況が急速に変化している。この時期に、30年間、分子科学の中心としての役割を担い、かつ共同利用研として国内外の研究者を支援してきた分子科学研究所は変革の時期にある。その中の「生命・錯体分子科学研究領域」も、その前身である「錯体化学実験施設」が「錯体化学研究所」設立を目指していた経緯と離別し、新しい組織としての役割が求められている。具体的には、大別して二つの役割が考えられる。第一に、最先端の測定、解析、理論に基づく「物理化学」が主流の分子研の中で、合成化学を基盤とするユニークな研究グループの集まりである本研究領域が重要な役割を担っている。なぜ

なら、「物理化学」においても特殊な構造、優れた物性、特異な化学反応性を示す「分子」を対象とすることが不可欠であり、それらの分子を合成することのできる研究者と組むことが必要だからである。逆に、新しい分子や反応を見つければ、積極的に研究所内の解析、測定グループと共同研究をできる状況にある。第二に、「錯体化学」のまとめ役、牽引者としての役割も重大である。これまで錯体化学会の事務局として、日本の錯体研究者のネットワークの基点となり、特に若手を中心とする錯体化学者の集会を数多く開催してきた。それらの実績を踏まえ、これまで以上に拡大する錯体化学の発展のための拠点として様々な施策をリードする立場を築いてほしい。そのために、本研究領域の拡充を求めたい。

しかし、上記の両役割を果たすには、現在の本研究拠点の組織は不十分といわざるを得ない。最大の問題は、いまだに合成化学研究に必須な研究者数が絶対的に不足していることである。それは、単に絶対的な研究パワーの不足のみならず、研究室主宰者（教授、准教授）の事務的な負担（雑用）を過度に増加させる結果も招いている。それらの問題を解決するのは、本研究拠点の自助努力だけでは困難であり、総合的に分子研や総研大の制度・システムを改革する必要があるだろう。1グループあたりのスタッフ数の増加、内外の共同研究の推進、積極的な外国人大学院生、ポスドクの勧誘、採用などにより、1グループあたりの研究者数を10名程度までに増やす抜本的対策に取り組むことが切望される。

本領域の5つの研究グループのインタビューを2日にわたり行なったが、いずれのグループも本質的に上記のような研究者数の制限を受けている状況で、可能な最善の研究を行っているとの印象を受けた。すなわち、研究対象を新しい視点のもとに他の研究者と競合しにくい独創性の高いものに設定している。また、分子研内外の研究グループとの共同によって、研究の広がりを目指している。今後は、研究者数の課題をクリアするとともに、各グループの研究をいくつかの共通のキーワード（例えば、「エネルギー」、「環境」、「新反応」、「生体」など）でくくった新領域、融合領域の核としての立場を鮮明に打ち出し、錯体化学の新しい方向性を示す先鋭組織としてアピールされることを期待したい。

(2) 個別評価

田中グループ

従来からライフワークとされている化学エネルギーと電気エネルギーの変換に関して、最近のCRESTの研究プロジェクトで非常に目覚ましい成果を挙げている。二大テーマのアルコールの酸素酸化反応の電気エネルギー系への変換およびCO₂の光還元は、これまでの独自のアイデアの集大成となる成果が得られつつある。CRESTが終了したので、これらの研究を続けるための研究者数の確保が望まれる。

川口グループ

フェノキシド配位子の特性に着目して、H₂、N₂、CO、CO₂などの小分子を巧みに活性化する独創性のある金属錯体の合成やユニークな反応の発見に成功している。今後、研究員を増やすことによって、見出した興味深い研究の種の発展が期待される。

魚住グループ

高分子錯体触媒の有用性を精力的に追求し、特にその疎水場効果を水中で利用した環境調和型触媒やマイクロチャンネルリアクターへの応用展開など多彩なアイデアで、興味深い成果を挙げている。CRESTなどの大型外部資金の獲得などへも力を入れている。

永田グループ

光合成系に焦点をあてた錯体化学を展開している。特に、生体系の構造もまだはっきりと分からない研究のハードルが高い酸素発生中心のモデルとなるマンガンクラスター錯体の合成的なアプローチに果敢にチャレンジしている点が評価される。国際共同研究による生体系の再構成などを積極的に続け、この分野の先端的な成果を挙げることを期待したい。そのためにも、今後、研究員を増やすことが望まれる。

櫻井グループ

フラレンの部分構造となるバッキーボウルの合成を、巧みな有機合成の組み合わせによって世界で最初に実現し、さらに色々な構造へ展開している点が評価される。そのほかに分子研内での、金属ナノ粒子の触媒反応などの共同研究に積極的にとりこんでおり、持ち前の有機合成のセンスとパワーを十分に発揮にしている。研究員の増加による大きな研究展開を期待する。

7-4-2 国内委員の評価（生命分子科学分野）

委員 C

(1) 当該研究領域の研究分野での分子研での役割、寄与と位置付け

分子科学研究所は、分子の構造と機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行い、さらに分子の科学の研究を推進するために、その中核として全国の研究者の共同利用を目的に大学共同利用機関としての役割をミッションとして担っている。

生命・錯体分子科学研究領域においては、この領域の世界最先端の研究を行うと同時に、分子研・基生研・生理研の三研究所の岡崎共通研究施設である岡崎統合バイオサイエンスセンターに所属する教員もおり、学際領域にまたがる新しいバイオサイエンスを切り開くことが求められている。

このようなミッションに基づいて研究を遂行している下記の5グループから研究成果の報告を受けた。

総合的評価として、いずれも極めて質の高い研究をおこなっており、この分野での先端的研究に位置付けられる。学際領域の観点からも研究内容のオリジナリティーは高く、分子研の掲げる壮大なミッションに応えつつある。

惜しむらくは、いずれの研究内容も実験科学であることから、それなりの研究者数が必要であるにもかかわらず、一部のグループは研究者数が少ないため、爆発的に世界を席捲・先導できる迄には至っていないように見える。今後大学院生数の増加もあまり期待できないと予想されることから、この点が今後、生命・錯体分子科学研究領域が抱える課題として大きく顕在化してくるであろう。

なお、大学共同利用機関として生命・錯体分子科学研究領域がどのような役割を果たしたかについては十分には理解できなかった。

(2) 当該研究領域の研究内容と各研究グループに対する個別評価

青野グループ：青野グループは気体分子センサータンパク質を研究対象にしているが、分子生物学、分光学、錯体化学などの全く異なる実験手法を駆使して、この興味あるテーマに取り組んでいる。まさに学際研究である。気体分子である酸素、一酸化窒素、一酸化炭素などが転写調節など生体内での新たな役割を果たしていることを明らかにしつつ、その活性発現機構を詳細に分子レベルで解明した成果は特筆に値する。

桑島グループ：タンパク質のフォールディングの分子機構解明が研究テーマである。タンパク質は生命の現象の多

くを担っていることから、極めて大きなそして生命科学において根源的研究課題である。桑島グループはこのような競争が激しく、難しい研究テーマに取り組み、成果をあげている。同グループの報告論文の引用回数からも同グループの研究レベルの高さが窺える。研究の更なる発展も大いに期待できる。

藤井グループ：金属酵素の構造と機能の相関を研究課題としている。このグループは極めて少ない人数で、金属酵素活性部位のモデル錯体の合成と解析、金属酵素の機能改変などの研究に挑んでいる。得られた成果は興味深く、注目できるが、研究内容は人手に頼る要素が大きいと思われるので、更なる展開を図る上からはポストドクあるいは大学院生の確保、更に積極的な共同研究などが求められるであろう。分子研全体でこれを支援する体制も必要と思われる。

宇理須グループ：AFM, IRRAS, Fluorescence microscopy, computer simulation を用いて、リピッドと膜タンパク等あるいはアルツハイマー病との関連で A β の aggregation の解析を研究テーマとしている。また、イオンチャネルのバイオセンサーの開発もテーマの一つである。学際的でユニークな研究と思われる。しかしながら、私の専門とは異なるため正確な評価ができないのが残念である。具体的には、例えば新たなパッチクランプのバイオセンサーが開発できた暁には、世界的に見て電気生理学の分野でどれ程重要で汎用性のあるものとなるのか、十分には理解できなかった。成果の論文での発表に評価を委ねたい。

小澤グループ：生体分子の可視化が研究課題である。現在、アメリカ NIH のロードマップにおいても分子イメージングの重要性が唱えられている。生体分子の機能あるいは細胞内動態をリアルタイムで解析することは、細胞内ネットワーク解析などの基礎生命科学においても、また疾病との関わりから応用的生命科学研究においても重要である。この分野で小澤グループは他を圧倒しており、群を抜いている。スプリットタンパク質を用いて蛍光顕微鏡システムによる生体分子の細胞内動態観察は独創的であり、世界を先導していると言える。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要度

上記したように、各グループともに国内外で重要と考えられている研究課題に取り組んでおり、些末で矮小なテーマではない。分野として極めて重要と考えられる。

(4) この分野の発展はあるか、どのような方向か

この分野の研究は今後益々、*in vivo* 系に近づいて行くであろう。すなわち、酵素から細胞、細胞から生体組織、生体組織から個体 (*in vivo*) に研究に向かっていくことは必定。そして最終的に、酵素、受容体、遺伝子、糖、生理活性小分子などの生体分子の個体での動態を解析し、それらの機能の解析を化学の分子レベルで行うことになる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

分子研の抱える問題は前述したように、少人数の研究員でどの様にして世界のトップを維持していくかであろう。

大学での研究に対する最近の国の政策は、まさに弱肉強食である。競争的資金を増やし、運営交付金を減らす方向にある。そして、実は総額は減っている。それに対して、分子研の研究資金は大学に比べ余裕があるように見える。この資金を総花的に配布するのではなく、研究を絞り込んでそこに研究員も投入してその領域の世界最高峰の研究を構築するのが、分子研の最も良い将来の方向であると思う。

研究所の方針には、卑近な例で恐縮であるが、いわゆる総合デパート方式と専門店（秋葉原）方式があると思う。人も研究費も潤沢にあれば、総合デパート方式で世界一を各領域で勝ち取れるかもしれない。しかしながら、最近では大型資金が、極く一部ではあるが大学にも出るようになってきており、大型資金で購入した装置機器で世界をリー

ドし続けることは至難の技である。分子研が今後とも人的資源が見込まれないのであれば、専門店方式でその分野の専門家を集め、研究分野が近い研究者同士で切磋琢磨することで、その分野の世界最高峰を維持することは可能であると考えられる。

委員 D

生体分子機能研究部門および生体情報研究部門の全体的な評価と意見

部門の教授 3 名および准教授 2 名のそれぞれの過去 5 年間ほどの論文発表および口頭による研究内容の説明および質疑による全体の評価および印象を報告させていただきます。

今まで分子科学研究所としては、大学にない突出した高度な分析機器や施設を有し、生物、化学、物理の境界領域を『分子科学』という切り口で研究を進め、大学等の研究機関の研究者との共同研究が行われ独特の大きな役割を果たしてきたと評価しています。しかし、生命科学分野はいまやその他の研究所（理化学研究所など）や大学において広範な研究者が分子科学の性格をもち、それぞれ大規模な研究に着手している状況にあるといえます。分子科学研究所としての特色とインパクトを与えるには難しい状況になりつつあるとも思われます。そのような状況にある当研究所の当部門については、個別の研究内容はそれぞれ特徴のある独自の研究領域や手法を持ち、国際的標準からみれば幾つかの部門は学問的には高い水準にあると評価できると思われませんが、研究全体の印象は、分子科学研究所の期待される役割から見ればまだ弱く、小さな大学のあるレベルがそろった研究集団という感じを否めません。もちろん生命科学の研究がえてして表面的に流れる傾向が日本全体の研究のなかで見られる中で、基礎的で本質的な課題を深める研究がある一面でなされており、分子科学研究所の特色としては評価できます。しかし、生命科学の研究は、全体としては総合科学と考えられるため、それぞれ個別の研究の水準とレベルの深さとともに、より多くの組織集団としての取り組みが期待されます。

次の事項をご検討いただければと思います。

1) 小さな研究者集団である当部門としては研究者の分野が分散しており、相互に深め合うのが難しい状況にあると思われま。現在のいくつかの研究の質の高さを考えれば、若く活発な研究者をスカウトしてより多くの独立した部門をつくり相互作用が深まるようにするか、それぞれの部門の研究者の数をマックスプランク研究所の一部門のように補強するかしないと外部へのインパクトも弱く内部的にも息切れするおそれがあります。現在は特に競争的研究資金が研究費の中心となりつつあり、その獲得のためにも重要と考えます。現在は若手の研究者の研究費は競争的研究資金でも重視されており、優れた若手にとってむしろより容易で潤沢である点も考慮が必要です。

2) 研究は人事が全てといっても過言ではありません。研究所の人事について言えば、今までは内部昇進はできない原則があったそうです。それは旧態依然として適当にしていれば内部昇格できるということの反省から取り入れた手法でしょうが、国内評価が重要な時代では一定の役割をしたかも知れません。しかし、現在ではその内部昇格禁止の方法を採用していることが、むしろ保守的で、国内でのみ通用するような研究機関の権威と魅力の上に成り立つ仕方と思われま。即ち、自然と外部から優れた研究者が応募して集まる研究所の権威と魅力ある状況があれば成り立つ話と思われま。人事は選考と論文評価では不十分で、養成を含めた戦略が必要です。外部依存ばかりでなく、内部的活力を生み出す戦略をつくりだす必要があります。分子科学研究所が望まれる研究のレベルは世界一級の研究であり、研究費の体制も変わっているのですから、実力本位の選考をより積極的アグレッシブに取り入れるべきで、形式的ではなくより本質的に人事の戦略をとるべきだと思います。例えば、英国や米国の一部の活発な大学がおこなっ

ているような、独立して研究したがっている若手の准教授レベルをスカウトしその研究所在職中の研究状況を観察評価し、その証明された実力の評価に基づき、厳正に教授昇任の道をつくる仕方を取りいれるべきです。もちろん外部からすぐれた人材が教授として獲得することもあり得るので、一面的にはいけないのは当然ですが、外部からの応募者は実際来てみればそれほどでないとか、外から判明しない別の評判の悪さが露呈するとかの危険性もあり得ます。重要なことは、内外区別なく真に実力本位をおこなうことであり、実際の研究の実施を厳正に評価し、それに基づく、本質的な人事を行うことであり、そのような人事が行われる体制づくりです。過去ではなく、採用した場所（分子研）での生まれた研究成果の評価を重視し、大きく発展する人材の養成を取り入れるべきではないかと思えます。そうでないと本当に良い人は去りますし、良い人をスカウトできません。

3) それにしても、分子科学研究所は国内外の他の研究機関との研究者が来訪共同研究をするような施設の現代にふさわしい再設定とそれに相応する人員の確保が一方では戦略として望まれます。論文などの発表はどこでも行われ、その研究機関の重要性を認識させるには限界があります。若手の研究者が体験的に認識するような体制と戦略（機器と人員を含め）の構築が望まれます。

7-4-3 国外委員の評価（錯体分子科学分野）

原文

Review of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science

Sep. 10, 2007

Dan DuBois

Fundamental Sciences Directorate

Pacific Northwest National Laboratory

Richland, WA USA

Overview of Activities

This report is the result of an on site review of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science (IMS) conducted on Sep. 10, 2007. The programs reviewed were those of Professor Koji Tanaka, Professor Yasuhiro Uozumi, Associate Professor Hidehiro Sakurai, Associate Professor Hiroyuki Kawaguchi, and Associate Professor Toshi Nagata. All of these programs are very basic and fundamental in nature, but all are also focused on providing the fundamental science required for achieving the sustainable and environmentally benign production of energy and materials necessary to maintain a high quality of life in our modern society.

Current production of energy and many useful materials (chemicals) is closely tied to the use of fossil energy reserves such as oil, natural gas, and coal. To accommodate the future energy and material needs of mankind without increasing the atmospheric concentration of CO₂ (a greenhouse gas) will require advances in our knowledge of how to produce fuels and chemicals from non-fossil sources such as solar, wind and nuclear energy and abundant raw materials such as water, carbon dioxide, nitrogen. In addition, the future production of fuels and chemicals from these non-fossil sources must be carried out with minimal impact on our environment. These are the considerations guiding the fundamental research efforts of the Coordination Chemistry Group. These efforts can be broadly divided into three areas. One is the development of catalysts for the interconversion of electrical energy and chemical energy.

A second area is the development of new materials, specifically carbon nanotubes, which can improve the efficiencies of fuel cells, photoelectrochemical cells, and other energy conversion devices. The third area involves green chemistry, or the ability to produce the chemicals we need in our daily lives with a minimal impact on the environment in terms of waste solvents and materials.

Non-fossil sources of energy include hydroelectric, solar, wind, nuclear, geothermal, and biomass. Although biomass can produce some of the fuels that will be needed in the future, this source of energy and materials is competitive with needs for agricultural and will only be able to supply a fraction of our future fuel and chemical needs. The other non-fossil energy sources all produce electricity and not fuels or chemicals as their primary product. As a consequence, this energy is not easily stored and results in a temporal mismatch between energy production and energy demand. Although batteries could in principle meet this storage requirement, the materials used in their construction and their energy densities will preclude their use on the scale required to replace fossil fuels. Scientific advances in the storage of electrical energy as chemical energy will be required to achieve energy storage on the enormous scales necessary to meet the demands of our modern society. This will necessitate the development of new catalysts for the electrochemical reduction of abundant small molecules such as CO_2 , H_2O , N_2 , *etc.* to form H_2 , CH_3OH , CH_4 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, and NH_3 with the concomitant production of O_2 . It will also be necessary to reconvert this stored chemical energy back to electricity upon demand. It is these considerations that lead to the focus of several of the efforts of the coordination chemistry group (Tanaka, Kawaguchi, Nagata) on the development of molecular catalysts for the inter-conversion of small molecules and electrical energy. These reactions all require the development of new, highly efficient, and inexpensive catalysts that do not currently exist.

In addition to new catalyst development, efficient energy production and storage will require the development of new materials for fuel cells, solar cells, batteries, photoelectrochemical cells, and other devices. A limiting feature of many of these devices is the inability to control the transport of electrons and protons over nanometer to micrometer distances while interfacing these materials with the molecular scales of catalysts and the macroscopic scales required for device applications. The ability to control the structures, dimensions, and relative orientations of carbon nanotubes will play an important role in the development of superior electron transport properties in many energy conversion devices. The use of new fundamental synthetic approaches for precisely controlling the geometry and electronic properties of bucky bowls and ultimately carbon nanotubes is the focus of the research of Associate Professor Hidehiro Sakurai.

The ability to carry out chemical transformations efficiently (both in terms of energy and materials) will also play an important role in meeting the future needs for producing the chemicals without adversely impacting the environment. Ideally it is desirable to perform chemical reactions using either no solvent or an environmentally benign solvent such as water with very high selectivities and control of stereochemistry. The development of such processes is the focus of the research of Professor Yasuhiro Uozumi.

The independent and very distinct research efforts of the members of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science are complementary and their combined success will play an important role in providing the fundamental science required for a more energy secure and environmentally friendly future.

Discussions of Individual Research Efforts

Professor Koji Tanaka

Professor Koji Tanaka is the Director of the Coordination Chemistry Laboratory at IMS. His research focuses on the development of molecular catalysts for the reversible conversion between electrical energy and chemical energy. In particular, his work has focused on the development of molecular electrocatalysts for CO_2 reduction, methanol oxidation, and water oxidation. He has made insightful

contributions that have earned him international recognition in each of these areas. He is widely published in top quality journals of the American Chemical Society, leading European journals such as *Angewandte Chemie* and others, as well as Japanese journals. He has received numerous invitations to present his work at various national and international meetings as a result.

Professor Tanaka is one of the most original and innovative chemists in molecular catalysis. A distinguishing feature of his work is the use of ligands of various types to assist or participate in the chemical transformations of various substrates. For example, in his development of water oxidation catalysts, catecholate or dioxolene ligands were incorporated as an integral part of the catalyst design. The ability of these ligands to undergo redox reactions separate from those occurring on the metal underlies much of the unique chemistry observed for his catalysts. Professor Tanaka was the first to recognize and demonstrate the important role such ligands could play in water oxidation catalysts. Water oxidation/O₂ reduction catalysis is an extremely active area of research at the present time, because this half-reaction is involved in all fuel production and fuel utilization schemes. Professor Tanaka's catalysts are certainly among the most effective and unique molecular catalysts currently known. His work will certainly form the basis of much future work by many other research groups - the best criterion by which to judge the importance of research contributions.

Professor Tanaka is also successfully using a similar approach for developing catalysts for methanol oxidation. Again the inclusion of redox active dioxolene ligands plays an important role in the ability of these catalysts to function as alcohol oxidation catalysts. Understanding these catalysts will provide a strong basis for future development of methanol fuel cells.

Many molecular electrocatalysts for the electrochemical reduction of CO₂ have been reported, and some of them exhibit high activities and relatively low overpotentials. However, the products produced by the most active catalysts are either CO or formic acid (two electron reductions). The development of catalysts that can more completely reduce CO₂ to methanol is highly desirable. Professor Tanaka is currently engaged in an effort to develop catalysts that are capable of achieving such so-called "deep reductions." Once again he is using a novel approach in which a ligand is being used to carry out an extremely important role in the catalytic cycle. In this case the ligand possesses a functional unit that is similar to the biological hydride (H⁻) relay NADH. The role of this hydride donor ligand is to supply an intramolecular hydride source that can deliver a hydride ligand to coordinated CO. Although a CO reduction catalyst based on this approach has not been developed yet, the approach is novel, and given Professor Tanaka's past successes with other difficult catalytic processes, it certainly has an excellent chance of success. More importantly, his research is demonstrating the importance and generality of using ligands to play an active role in multi-proton and multi-electron processes that are required for efficient conversion between electrical energy and chemical energy (*i.e.* fuel production and utilization reactions).

Important collaborations have been sought out and developed with chemists Jim Muckerman and Etsuko Fujita at Brookhaven National Laboratory in the US. These collaborations provide access to fast kinetic experiments and theoretical capabilities. Because of Fujita's and Muckerman's interest in developing molecular catalysts for the reversible conversion between electrical energy and chemical energy using their respective strengths in fast kinetics and theory, this collaboration with Professor Tanaka, who excels at catalyst design, is very natural and productive.

Associate Professor Hiroyuki Kawaguchi

Associate Professor Kawaguchi's research focuses on the activation of small molecules such as N₂, CO, and CO₂ using early transition metals. In this research, efforts are being made to control the reactivity of the metal complexes (niobium, tantalum, and zirconium) by controlling the geometry of the complexes via ligand design. The ligands studied were either linear or tripodal tridentate phenoxide ligands. Impressive reactivity of these complexes with molecular nitrogen (N₂) has been observed in which the triple bond

of dinitrogen has been completely cleaved. Protonation and alkylation of the resulting nitrido ligands has also been observed. In addition, cycles of stoichiometric reactions for producing ammonia from N_2 and strong reducing agents followed by protonation have been demonstrated. These data clearly indicate that production of ammonia by these early transition metal complexes is feasible, but not catalytic.

Studies of low-valent ditantalum species resulted in intramolecular C–H and C–O bond cleavage reactions. In addition, an unprecedented coupling of six carbon monoxide ligands via C–C bond formation was observed upon the reaction of two low-valent ditantalum species with CO. Although the ligand resulting from the coupling of the six CO ligands has not yet been successfully removed from the metal, this result illustrates the ability of these low-valent early transition metal complexes to activate small molecules in new and exciting ways. In related chemistry, Zr complexes were used to demonstrate a cycle of stoichiometric reactions in which benzyl anions, two CO ligands, and H_2 were used to generate allene derivatives, again demonstrating the ability to activate and couple CO molecules as well as cleave the C–O triple bond. Finally the reduction of CO_2 to methane using triethylhydrosilane as the reductant has been demonstrated.

These results taken together demonstrate a remarkable ability of these low-valent early transition metal complexes containing triphenoxide based ligands to carry out the activation of a variety of small molecules. The observed reactions involve cleavage of extremely strong N–N and C–O triple bonds as well as remarkable and extensive C–C coupling reactions. These reactions are facilitated by the formation of strong M–O between the early transition metals and oxygen atoms, which require the use of highly energetic reagents to achieve cycle processes. Future studies will involve mechanistic studies that will provide additional insights on how these very interesting transformations occur, and hopefully lead to truly catalytic processes in which the unusual ability to cleave the strong triple bonds of CO and N_2 are preserved, but that do not require high energy reagents currently used to achieve a cyclic process.

Frequent publications of the research results outlined above in a variety of first tier ACS journals and European journals is consistent with an excellent research program that is very competitive with other international research programs on activation of small molecules using early transition metal complexes.

Associate Professor Toshi Nagata

Associate Professor Nagata's research is ambitious in that it seeks to reproduce photosynthesis using artificial molecules. Such a project requires multiple activities, and he has focused on two. The light-harvesting portion of his research involves the study of dendrimers with Zn porphyrins at the core and with quinone molecules attached to the branches of successive generations of dendritic molecules. The purpose of this research is to provide a mechanism for matching catalytic rates for redox reactions such as water oxidation, which are relatively slow reactions, with the rates of the photon adsorption, charge separation, and recombination which are much faster than the catalytic reaction. The quinone molecules attached to the dendrimer are expected to function as a pool for accepting and releasing multiple electrons. This is a novel approach to matching the reactivity of catalyst and light harvesting components. In a first step towards realizing this goal, the photoreduction of the quinone pool to hydroquinones by irradiation of the zinc porphyrin/quinone dendrimer ensemble using thiophenol as a sacrificial electron donor has been demonstrated.

The next step in the construction of this photosynthetic ensemble is to couple the quinone pool to a redox catalyst. Efforts are underway to develop highly active water oxidation catalysts that mimic the structure and function of the oxygen-evolving complex (OEC), the enzyme that catalyzes H_2O oxidation in natural photosynthetic systems. To achieve this goal, a pre-organized ligand

template has been synthesized that is designed to position three Mn centers in an arrangement like that observed in the OEC. This result has been achieved using Fe as the metal rather than Mn. This result is in contrast to previous efforts in other laboratories that use two positioned carboxylate ligands and self-assembly in attempts to mimic the structure and function of the OEC. Future research will explore the incorporation of Mn and the addition of a fourth Mn center in an asymmetric position to mimic the structure and hopefully the function of the OEC.

The effort to achieve a fully functional artificial photosynthetic system is a daunting task that will require the careful design and assembly of a multi-component system in which a large number of functional components will have to be very carefully arranged in space and matched in energy. Although this research is ambitious, the structures of the individual components are well conceived, and the approach to the assembly of these components is an original and interesting one. The publication record is consistent with an active research program for this young researcher.

Associate Professor Hidehiro Sakurai

Associate Professor Sakurai's work is focused in two main areas: (1) the development of highly efficient and selective synthetic routes to buckybowl (curved fragments of buckyballs, C_{60}), and (2) the exploration of gold nanoclusters as catalysts for organic transformations. In the first area, new and very elegant synthetic methods have been developed for the synthesis of sumanene and the homochiral trimethyl substituted sumanene. This synthetic methodology has required some very significant advances including the cyclotrimerization of chiral haloalkenes by Pd nanoclusters, the use of tandem ring opening and ring closing metathesis reactions, and low temperature electrolytic oxidation in the last step of sumanene synthesis. These studies have permitted the inversion barrier of sumanene (flipping from one bowl form to another) to be determined (21 kcal/mol). This elegant synthetic approach to sumanene derivatives forms a strong basis for the more long term goals of constructing larger bowls, bowls with precisely placed heteroatoms, and ultimately the controlled synthesis of high purity carbon nanotubes with specific structures. Such materials are not currently available, but would be of much interest for their potential use in a broad range of applications.

The second area of research under investigation is the use of poly(vinylpyrrolidone) stabilized Au nanoclusters as quasi-homogeneous catalysts in organic transformations. In this area an interesting size dependence has been observed for the catalytic aerobic oxidation of alcohols. These reactions also exhibit surprising structural specificity and selectivity that is very similar to that of molecular or homogeneous catalysts. This is unusual for what appears to be a surface catalyzed reaction. These unusual selectivity patterns suggest that the very small nanoparticles with diameters of 1–2 nm, the catalytic sites resemble those of single site molecular catalysts. Traditionally, synthetic organic chemists have not explored the utility of nano-catalysts in detail. These studies suggest that there may be much to be learned in the area of catalyzed organic transformations using metal nanoparticles and that both size and surface treatment will play an important role in catalyst performance.

This is a robust and active program in both areas under investigation. Numerous publications in *Science*, *JACS*, and other international journals reflect well on both the productivity and quality of the work being done. Overall the work is very creative and competitive at the international level.

Professor Yasuhiro Uozumi

The focus of this program is on green chemistry. In particular, Professor Uozumi's research deals with the development of heterogeneous catalysts for organic reactions that function in water with high efficiency and selectivity. One highly successful

approach to this goal has been the attachment of homogeneous metal complexes of Pd and Rh to supported phosphine ligands bound to poly(ethylenglycol) (PEG) modified polystyrene (PS) particles (PEG-PS). This design allows for the formation of an amphiphilic region produced by the PEG region that is compatible with both water and organic substrates and a hydrophobic pocket formed by the metal complexes. This hydrophobic region provides a microreactor within the bulk aqueous phase that results in high local concentrations of organic reagents that facilitate the catalytic reaction. Using these PEG-PS beads modified with Pd and Rh phosphine complexes, a variety of known organic transforms that are normally conducted in organic solvents can be carried out in an aqueous solution, eliminating the need for an organic solvent. This method also results in a number of other significant advantages. Among these are the ability to easily recover the catalyst by simple filtration and to reuse the catalyst many times. It also results in the ability to use combinatorial methods for both catalyst development and for combinatorial screening of reactions for a large range of reagents. This method has been extended to the synthesis of chiral compounds with both high yields and high selectivities. Overall, this is an extremely powerful tool for achieving cleaner and safer organic reactions. Professor Ouzumi's work in this area has been recognized by his being awarded the Ministerial Award for Green Sustainable Chemistry and the Japan Chemical Society Award for Creative Research.

More recent work in collaboration with Dr. Yoichi Yamada involves the extension of the heterogenizing of homogeneous catalysts to the formation of catalytic membranes in microchannel reactors. Such approaches can have many advantages, such as much shorter reaction times and the facile separation of products.

In summary, Professor Uozumi has made a substantial contribution in the area of 'green' chemistry that has resulted in publications in high quality journals and earned him international recognition in this area. These recognitions and accomplishments are a reflection of the high quality and productivity of his research group.

Summary

The overall quality of the research programs of the Coordination Chemistry Group of the Institute for Molecular Science is excellent. The research covers a broad range of activities in the molecular sciences and is fundamental in nature. The scientific focus of these research projects suggest that they will contribute to improvements in energy production without emissions of greenhouse gases and to more environmentally benign methods for producing the materials that we need in our daily lives.

訳文

分子科学研究所錯体分子科学研究領域に関する報告 (2007年9月10日)

パシフィックノースウエスト国立研究所
基礎科学総本部
ダン・ドゥボア

活動についての概説

2007年9月10日に実施した、分子科学研究所錯体化学領域の点検評価に関する報告を述べる。対象研究は田中晃二教授、魚住泰広教授、櫻井英博准教授、川口博之准教授、永田央准教授によって推進されている内容である。全

ての研究は非常に基礎的研究であるが、同時に、現代社会におけるハイクオリティな生活を保つために必要な、持続的かつ環境調和的なエネルギー／物質生産の達成のための基礎科学を提供することにも焦点が向けられている。

現在、エネルギーや多くの有用物質（化成品）の生産は、石油、天然ガス、石炭といった化石エネルギー埋蔵量に依存している。大気中の二酸化炭素（グリーンハウスガス）濃度を増加させることなく、人類が将来必要とするエネルギー／物質生産のためには、太陽光や、風力、核エネルギー、または豊富に存在する水、二酸化炭素、窒素などの非化石原料からの、燃料や化成品の生産手法についてさらなる知識の進展が求められるであろう。さらに、将来における非化石原料からの燃料・化成品生産では、環境に対する負荷を最小限にすることが求められる。こうした観点を根本的な方向性として、錯体化学領域における研究は進められている。それは3分野に大別される。第1の分野は電気エネルギーと化学エネルギーの相互変換のための触媒開発である。第2の分野は新素材、とりわけカーボンナノチューブの開発である。カーボンナノチューブは燃料電池、光電気化学電池、他のエネルギー変換デバイスの効率性を向上させることができる。第3の分野はグリーンケミストリーに関することで、すなわち廃棄物（溶媒、化合物など）による環境に対する影響を最小限にしながら、日常生活に必要な化合物を生産する手法の開発に関する研究である。

非化石エネルギー源とは、水力発電、太陽光、風力、核、地熱、およびバイオマスを指す。バイオマスは相応量の燃料の生産は可能になるだろうが、バイオマス燃料源の多くは農産物としても必要であり、また供給できる燃料や化合物は必要量のごく一部にすぎないと考えられる。他の非化石エネルギー源は全て、一次生産物としては燃料や化合物ではなく電力を生産する。その結果、エネルギー貯蓄は容易ではなく、エネルギーの生産と需要との間に一時的なミスマッチを引き起こす。もちろん電池はこのエネルギー貯蓄の必要条件是満たしているものの、電池に用いられる材料やエネルギーの量を考えると、化石燃料を全て置き換えるほどのスケールで使用することはできないであろう。科学の発展によって電気エネルギーを化学エネルギーとして貯蓄することができるようになれば、現代社会の要求量を満たすだけの莫大なエネルギーを貯蓄することができるようになると思われる。これには、電気化学還元によってCO₂、H₂O、N₂などの無尽蔵な小分子からH₂、CH₃OH、CH₄、C₂H₅OH、NH₃、それと同時にO₂を合成する新しい触媒の開発が必要である。また同時に、このように貯蓄された化学エネルギーを需要に応じて再び電気エネルギーに再変換することも必要である。これらの検討については、錯体化学領域のいくつかのグループ（田中G、川口G、永田G）によって小分子と電気エネルギーの相互変換のための分子触媒の開発に関して精力的に研究されている。これらの反応には全て、現在知られていない新しい、高効率でかつ安価な触媒の開発が求められている。

新触媒の開発だけでなく、効率的なエネルギー生産と貯蓄には、燃料電池、太陽電池、電池、光電気化学電池、あるいは他のデバイスのための新材料の開発も求められる。これらのデバイスの多くは、ナノメートルを超えマイクロメートルにまでいたる距離では、電子／ホール伝導制御が不可能であるという限界を抱えている。それは分子スケールの触媒とデバイス応用に要求されるマクロスコピックなスケールとの界面の問題である。カーボンナノチューブの構造、次元、相対配向制御を実現することは、多くのエネルギー変換デバイスの電気伝導性の向上にとって大きな役割を果たすこととなる。新たな基本的な合成手法によって、バッキーボール、そして最終的にはカーボンナノチューブの構造や電子的性質を精密制御しようというアプローチは櫻井英博准教授によって行われている。

効率的な化学変換（エネルギー、物質いずれの場合においても）を可能にすることもまた、将来環境に悪影響を与えずに化合物を生産する要求を満たす上で重要な役割を果たすであろう。理想的には、無溶媒、あるいは水などの環境調和型の溶媒を用いて化学反応を行い、なお且つ高い選択性立体制御が実現することが望ましい。このような手法の開発に関しては魚住泰広教授が中心に研究を行っている。

分子科学研究所錯体化学領域のメンバーによって各々独立かつ独自に進められている研究は相補的であり、その結

集した成果は、さらなるエネルギーの確保や環境調和が求められる将来のための基礎科学を提供するうえで重要な役割を果たすであろう。

各研究成果に関する議論

田中晃二教授

田中晃二教授は、分子研錯体化学領域の主幹である。研究内容は電気エネルギーと化学エネルギー間の可逆的変換のための分子触媒の開発である。特に、CO₂還元、メタノール酸化、水酸化に対する電気化学的分子触媒の開発が中心である。田中教授はこれらの各々の分野において、洞察力に富んだ結果を残しており、既に国際的に認知されている。日本のジャーナルのみならず、アメリカ化学会のいくつかのトップジャーナル、*Angewandte Chemie*などのヨーロッパの先導的ジャーナルなどに数多く論文を報告している。その結果、国内外の学会から数多くの講演の招待を受けている。

田中教授は分子触媒の分野において、最も独創的かつ革新的な化学者の一人である。特筆すべき成果として、様々な基質の化学変換の補助的役割をする、あるいは化学変換に直接関与する多種多様な配位子の利用法を挙げることができる。例えば、水酸化触媒においては、カテコラート、ジオキソレン配位子が触媒設計において不可欠である。これらの配位子が持つ、金属上で起こるレドックス反応を切り離す能力が、彼の触媒で観測されるユニークな化学の多くの根底となっている。田中教授は、水酸化触媒においてこれらの配位子が重要な役割を果たすことを初めて認識し、立証した。水酸化/酸素還元触媒は、この半反応が全ての燃料生成と燃料利用スキームに含まれているために、現在極めて精力的に研究が行われている分野である。田中教授の触媒は現在知られている触媒の中でも、明らかに最も効率的かつ独創的な分子触媒の一つである。田中教授の成果は間違いなく、今後進められる他の研究グループの仕事の基礎——すなわち研究寄与の重要性を判断する上での最も良い基準——となるであろう。

さらに、田中教授は同様の手法によりメタノール酸化触媒の開発に成功している。ここでも同様にレドックス活性なジオキソレン配位子を導入することが鍵となり、アルコール酸化触媒活性を発現している。これらの触媒を理解することが、将来のメタノール燃料電池開発の非常に大きな基礎となっている。

二酸化炭素の電気化学還元触媒に関しては多くの報告例があり、その中には高い活性と比較的低い過電圧を示すものも報告されている。しかしながら、最も高活性を示す触媒による生成物は、一酸化炭素かギ酸(2電子還元)である。二酸化炭素をメタノールまで完全還元する触媒の開発が求められている。田中教授は現在、いわゆる「deep reduction」を可能にする触媒の開発に専心している。ここでも彼は新しいアプローチ、すなわち触媒サイクルにおいて極めて重要な役割を果たすような配位子の開発、を推進している。今回は、配位子内に生体内反応におけるヒドリド中継分子であるNADHと同様な官能基を導入している。このヒドリド供与配位子は、分子内反応によってヒドリドを配位子上から金属上に配位している一酸化炭素へ供給する役割を果たす。このようなアプローチに基づくCO還元触媒はこれまで開発されたことがないが、斬新であり、これまで田中教授によって行われてきた他の困難な触媒開発の成功過程を鑑みると、間違いなく成功の可能性が高い。より重要なのは、配位子に多プロトン、多電子過程に重要な役割を与えるという考え方が、重要かつ普遍的であることが示されている点にある。これらの多プロトン、多電子過程は、電気エネルギーと化学エネルギー間の変換(燃料生成/利用)において効率的におこることが求められている。

アメリカブルックハイブン国立研究所のJim MuckermanとEtsuko Fujitaと重要な共同研究が行われ、成果をあげている。共同研究によって、高速速度論実験や理論研究が行われている。FujitaとMuckermanの関心は、彼らがそれぞれ得意としているこれら高速速度論実験や理論計算を用いた、電気エネルギーと化学エネルギー間の可逆的変換のた

めの分子触媒の開発にあるので、触媒デザインに秀でた田中教授との共同研究は極めて自然な流れであり、プロダクティブである。

川口博之准教授

川口准教授は、前周期遷移金属を用いた N_2 , CO , CO_2 などの小分子の活性化に関する研究を行っている。配位子のデザインにより構造制御を行うことで、金属錯体（ニオブ、タンタル、ジルコニウム）の反応性を制御している。ここで用いられている配位子は、直線状あるいは三脚型のフェノキシ配位子である。これらの錯体は分子状窒素に対して特筆すべき反応性を示し、窒素 - 窒素 3 重結合が完全に切断される。また生じたニトリド配位子に対するプロトン化やアルキル化なども観測されている。さらに、強還元剤とそれに続くプロトン化反応によって、分子状窒素からアンモニアへの化学量論的な反応サイクルが実現している。これらのデータは、触媒的ではないものの、前周期遷移金属錯体を用いたアンモニア合成が可能であることを明確に示している。

低原子価タンタル二核錯体を用いた研究では、分子内 C-H, C-O 結合の切断反応が見いだされている。また、2 分子のタンタル二核錯体と一酸化炭素との反応においては、C-C 結合の生成を伴って 6 分子の一酸化炭素がカップリングするという予期せぬ反応が観測されている。この 6 分子の CO の反応で生成した配位子はまだ金属から取り出すことには成功していないものの、この結果は、これらの低原子価前周期遷移金属錯体が新奇かつ驚くべき様式で小分子の活性化を行うことができることを示している。以上に関連した化学として、ジルコニウム錯体によって、ベンジルアニオン、2 分子の CO , および H_2 から、アレン誘導体を生成するという化学量論的反応サイクルも報告されている。この反応では、先の反応と同様 CO が活性化されてカップリングすると同時に炭素 - 酸素 3 重結合も切断されている。また最後に、トリエチルヒドロシランを還元剤として用い、二酸化炭素からメタンを生成する反応も示されている。

以上の結果は全て、トリフェノキシドを基盤とする配位子を有する低原子価前周期遷移金属錯体が、様々な小分子の活性化に対して極めて高い活性を有していることを示している。観測された反応には、極めて強固な化学結合である窒素 - 窒素 3 重結合や、炭素 - 酸素 3 重結合の切断や、また驚くべきかつ多数の炭素 - 炭素結合生成反応などが含まれている。これらの反応は前周期金属と酸素間の強固な結合の生成によって促進されており、サイクルプロセスを実現するには高活性な試薬を必要とする。今後反応機構に関する研究が行われ、どのようにしてこれらの興味深い変換反応が進行しているかについての更なる知見が得られるであろう。そして、この強固な CO や N_2 の 3 重結合が切断されるという異常な反応性を損なわずに、かつ現在の触媒サイクルで使われているような高活性な試薬を用いることなく、真の触媒反応が実現することが期待される。

前周期遷移金属錯体を用いた小分子の活性化に関する研究は、国際的にも様々な研究が行われている激しい競争分野であるが、その中で、以上に示した結果は既に論文としてアメリカ化学会のいくつかのトップジャーナルや、ヨーロッパのジャーナルに数多く報告されていることは、本研究が秀逸であることを物語っている。

永田央准教授

永田准教授の研究は、人工的な分子を用いて光合成を再現しようとする野心的な内容である。このような研究の場合、多くの取り組みが必要であるが、彼はそのうち 2 点に焦点を絞って検討してきた。集光部位に関する研究では、亜鉛ポルフィリンをコアに有し、ブランチ部にあたるデンドロンの各世代にキノン分子を導入したデンドリマーについて検討を行っている。この研究の目的は、水酸化などのレドックス反応における反応速度にちょうどマッチした機構を実現することにある。このようなレドックス反応は、触媒反応よりも遥かに早い反応である光子吸収、電荷分離、

電荷再結合などに比べ、比較的遅い反応である。デンドリマーに導入されたキノン部位は多電子授受のプールとしての役割が期待される。これは触媒と集光部位との反応性を一致させる方法論として新しいアプローチである。このゴールを実現する第一歩として、チオフェノールを犠牲電子供与体として用いた、亜鉛ポルフィリン/キノンデンドリマー集合体の光励起による、キノンプール部位のヒドロキノンへの光還元反応が行われている。

この光合成集合体構築の次の段階は、キノンプールをレドックス触媒につなげることである。実際の光合成系において水酸化を触媒する酵素の酸素発生中心(OEC)に構造と機能を模倣した、高活性な水酸化触媒の開発が進行中である。OECで観測されているような配置で、3つのマンガン中心が位置するようにデザインされた、配位子のテンプレートをあらかじめ合成した。現段階ではマンガンではなく鉄を金属として用いている。これまで他の研究室によってカルボキシラートを二カ所有する配位子を用いて自己組織化するという手法でOECの構造や機能の再現が試みられてきたが、今回の試みはそれらの結果とは対照的である。OECの構造や、願わくは機能を再現できるように、今後は、実際に中心金属にマンガンを用い、さらに4番目のマンガン中心を不斉の位置に導入した系が検討されることになっている。

完全な人工光合成系を実現することは困難であり、数多くの機能部位が空間的にもエネルギー的にもマッチした形で非常に注意深く配置されていなくてはならないことから、これらの注意深いデザインと組織化が求められる。本研究は野心的であるが、個々の部位の構造はよく考えられており、各部位の組織化に対するアプローチは独創的で興味深いものである。論文発表状況は若い研究者の活発な研究に相応なものである。

櫻井英博准教授

櫻井准教授の研究は以下の二分野に大別される。 バッキーボウル(C₆₀などのバッキーボールの非平面部分構造)の高効率かつ選択的合成手法の開発、有機変換反応触媒としての金ナノクラスターに関する研究。第1の研究においては、スマネンおよびホモキラルなトリメチル置換スマネンの、新規でエレガントな合成手法が開発されている。本合成手法は、Pdナノクラスターによるキラルハロアルケンの環化三量化反応、タンデム開環/閉環メタセシス反応、スマネン合成の最終段階における低温での電解酸化反応など、いくつかの重要な進展のもとに成り立っている。この研究によってスマネンの反転障壁(片方のボウル構造から他方のボウル構造へのフリッピング)を決定することができた(21 kcal/mol)。このスマネン誘導体へのエレガントな合成アプローチは、長期的目標である、より大きなボウルの合成、ヘテロ原子を精密に導入したボウルの合成、そして究極的には単一構造を有する高純度カーボンナノチューブの選択的合成に至るまでの全ての手法の根幹となるものである。これらの物質は未だ入手不可能であるものの、広範囲の応用に活用されることが期待される。

第2の現在進行中の研究内容は、ポリビニルピロリドンで安定化された金ナノクラスターの擬均一系触媒としての有機合成反応への利用である。ここでは、アルコールの触媒的空気酸化反応において興味深いサイズ依存性が観測されている。また、これらの反応では分子触媒や均一系触媒に酷似した驚くべき構造特異性、選択性が発現している。これは表面触媒反応ではあまり見られないことである。このような異常な選択性の発現は、直径1-2 nm程度の非常に小さなナノ粒子における触媒サイトは、シングルサイトである分子触媒と類似していることを示唆している。これまで有機合成化学者はナノ触媒の活用についてあまり深く追求してこなかった。以上の研究は、金属ナノ粒子を用いた触媒的有機合成反応研究には多くの課題が残されており、またサイズと表面処理が共に触媒活性に重要な役割を示すことを示唆している。

現在進行中のいずれの研究もしっかりとしており活発に行われている。多くの論文がすでにサイエンスやJACS,

他の国際ジャーナルに発表されており、これは本研究のプロダクティビティとクオリティをよく反映している。総合的に、本研究は非常に創造的で、国際的に競争力のある内容である。

魚住泰広教授

本研究の中心はグリーンケミストリーである。特に、魚住教授の研究では水中で機能しかつ高い活性と選択性を示す不均一系有機反応触媒の開発が行われている。この目標に対する非常に成功した例として、ポリエチレングリコール(PEG)修飾ポリスチレン(PS)粒子(PS-PEG)に結合した担持型リン配位子を用いたPdやRhの均一系金属錯体の導入が挙げられる。この設計によって、水と有機基質双方に親和性の高いPEGによってもたらされる両親媒性部位が生成し、金属錯体付近には疎水性ポケットが生じる。この疎水性部位が巨大な水相の中でマイクロリアクターとしての役割を果たし、結果として有機試薬が局所的に高濃度で濃縮され、触媒反応が促進されることになる。これらPdやRhのリン錯体で修飾されたPEG-PSビーズを用いることで、通常有機溶媒中で行われる多くの反応が水中で行うことができ、有機溶媒を使用する必要がない。本手法は他にも多くの重要な進歩をもたらしている。例えば、触媒が単なる過剰操作だけで簡単に除去することができ、また何度も再利用することができる。また、コンビナトリアル手法にも利用することができ、触媒開発においても、また広範囲の試薬を用いた反応のスクリーニングにおいても、本触媒によるコンビナトリアル手法を用いることができる。本手法は、キラル化合物の合成にも用いられており、高収率、高選択性を実現している。総じて、本手法は有機反応をよりきれいに、より安全に行うための極めてパワフルなツールであるといえる。この分野における魚住教授の業績に対して、グリーンサステナブルケミストリー文部科学大臣賞、日本化学会学術賞が授与されている。

山田陽一博士との最近の共同研究においては、均一系触媒の不均一化へと研究を展開し、マイクロチャンネルリアクター中での触媒膜の生成についての検討を行っている。このようなアプローチには、反応時間の短縮や、生成物の容易な分離など、多くの利点がある。

結論として、魚住教授は「グリーン」ケミストリーの分野において多大な貢献を果たしてきており、その結果、高クオリティのジャーナルへの論文発表が行われており、またこの分野において国際的に高く認知されている。このような認知と業績は、彼の研究グループの高いクオリティとプロダクティビティを反映している。

総括

分子科学研究所錯体化学領域の研究内容の全体的なクオリティは素晴らしいものがある。分子科学の広範囲の領域を網羅しており、また基礎的である。各研究プロジェクトの注目点から判断すると、これらのプロジェクトは、グリーンハウスガスを排出せずにエネルギーを生産するための進歩や、日常生活に必要な物質の生産におけるより環境調和的手法に、貢献するものと思われる。

7-4-4 国外委員の評価(生命分子科学分野)

原文

General Comments about the Institute for Integrative Bioscience
and Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science

The IMS is internationally regarded as a center of excellence in the physical and molecular sciences. It is perhaps less well known

in the areas of biomolecular research than in the physical sciences and it is therefore worth considering what might be done to enhance the reputation and impact of IMS in the biosciences.

Current Trends in Biomolecular Research

The current trend in the US is to encourage collaborative interactions between scientists to promote cross-disciplinary research, to develop new technologies, and to create new research directions. Both the National Science Foundation and the National Institutes of Health have evolved funding mechanisms to support and promote such collaborative research efforts. The NIH Roadmap, for example, aims to create new organizational models to stimulate interdisciplinary research and foster an integrated approach to advance our understanding of complex biomolecular and biological systems. Disciplines that have been identified as central to this effort include chemistry, structural biology, computational biology, molecular and cellular imaging, and nanotechnology. Much effort is being made, especially in research institutes, to create cohesive research programs that cross disciplines. Many institutions also strive to achieve critical mass in key research areas, emphasizing recruitment of scientists who bring different techniques to bear on related research problems. This strategy helps to increase the visibility and impact of an institution.

Impact of the IMS in Biomolecular Science

The research performed by the laboratories that I visited in the Institute for Integrative Bioscience and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science is uniformly outstanding. The individual laboratories are extremely well equipped with state of the art instrumentation and each group is making important and highly influential contributions in its own specialized field. However, the overall research program lacks cohesion and the individual laboratories largely work on unrelated projects. As a result, the overall impact of the IMS in the area of the biosciences is essentially the sum of the impact of each individual group. Increased focus and collaboration between groups would greatly increase the visibility of the IMS in this area, leveraging the current research effort so that the overall impact is much greater than the sum of its parts. All of the disciplines identified as central to the NIH Roadmap (chemistry, structural biology, computation and molecular simulation, molecular and cellular imaging, and nanotechnology) are well represented in the IMS, but there currently appears to be little communication or collaboration across disciplines. The potential already exists within the IMS, and the key technologies and resources are already in place, to make significant interdisciplinary advances in bioscience, provided that collaborative interactions between research groups can be promoted and financially supported.

While the laboratory facilities and instrumentation available to each research group are outstanding and the scientific staff are performing highly original and innovative research, many laboratories currently lack a critical mass of research personnel. The scientific output and reputation of IMS as an international center of excellence in molecular science could be greatly enhanced by increasing the number of junior scientists, postdoctoral fellows, and graduate students in the research programs. If there is a shortage of Japanese postdoctoral research associates, then it is important to look to other countries, especially other Asian countries, to recruit highly qualified postdoctoral researchers. Recruitment of additional postdoctoral fellows to IMS would greatly benefit individual research programs, would help bring in new ideas, and could provide a mechanism to enhance interdisciplinary collaborations. A second concern is the small number of graduate students at IMS. I gained the impression from my discussions that it is very difficult to recruit outstanding graduate students to IMS, in part because they tend to join the graduate schools at the universities from which

they receive their undergraduate degrees. A possible solution to this dilemma might be to increase the visibility of IMS in undergraduate institutions by establishing an outreach program. This might take the form of presentations at undergraduate colleges about the exciting science at IMS or introduction of a program in which senior undergraduate students are offered an opportunity to work in laboratories at IMS during the summer. Such undergraduate internships are common in US universities and research institutes.

Finally, it is important to consider how the reputation and impact of the IMS in the area of biosciences can be enhanced in future years. IMS is fortunate to have a nucleus of outstanding faculty whose research in the biosciences is at the highest level and who are achieving international recognition for their work. The recent addition of Professors Kuwajima and Kato to the biosciences program will go a long way towards increasing the visibility and impact of IMS in this field. Priority should be given to recruiting additional research groups working in complementary areas. Research areas that would complement existing programs include protein misfolding and disease, mass spectrometry based proteomics, structural biology of membrane proteins or macromolecular machines, single molecule spectroscopy of biomolecules, and systems biology. Single molecule spectroscopy, in particular, would tie in well with IMS' existing strength in spectroscopy and laser technology and would help to promote interdisciplinary collaborations. However, all of the above fields are rapidly growing and any one of them would interface well with existing research programs at the IMS and would greatly enhance the visibility and impact of the Okazaki Institute for Integrative Bioscience and the Department of Life and Coordination Complex Molecular Science.

Peter E. Wright

Cecil H. and Ida M. Green Investigator

Professor and Chairman

Department of Molecular Biology

The Scripps Research Institute

訳文

岡崎統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域に関する一般的コメント

分子科学研究所（IMS）は、物理科学や分子科学の研究領域において国際的にも中核的研究機関と見なされている。しかし、生命科学の研究領域においては、恐らく、物理科学研究領域におけるほど有名ではない。したがって、生命科学におけるIMSの評判や影響力を上げるために何ができるかを問うことは考慮に値する。

生体分子研究の現在の動向

米国の現在の動向は科学者間の共同研究による相互作用を促進することに向けられており、これによって、領域横断的な研究を促進し、新技術を開発し、新しい研究の方向性を創造することができる。米国国立科学財団（NSF）と国立衛生研究所（NIH）は、このような共同研究を支援し促進するための研究費補助制度を展開している。例えば、NIHのロードマップは、複雑な生体分子系や生物系の理解をより一層高めるために、学際的な研究を振興し、統合的アプローチを促進することができる新たな組織モデルの制定を目指している。このような取り組みの中心にあると見られる研究分野が、化学、構造生物学、コンピュータ生物学、分子細胞イメージング技術、ナノテクノロジーなどで

ある。領域を横断する分野融合的な研究プログラムを創出するために、多くの努力が特に研究所等においてなされている。さらに、多くの研究機関が、これらの鍵となる重要な研究分野を本格化するために努力しており、関連した研究上の問題の解決に向かう技術を持ったいろいろな科学者を採用すると強調している。かかる戦略は、研究機関の知名度と影響力の拡大に役立つ。

生体分子科学における IMS の影響力

今回訪問した統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域の研究室で行われている研究は一様に傑出している。個々の研究室は最先端の研究設備で大変よく整備されており、各研究グループはそれぞれの専門分野において重要でかつ大きな影響力のある業績を上げている。しかし、全体の研究プログラムはつながりに欠いており、個々の研究室は大部分互いに無関係な研究を行っている。その結果、生命科学分野における IMS の全体的な影響力は、実質上個々の研究グループの影響力の総和となっている。グループ間の興味の焦点を合わせ共同研究を促進するならば、現在の研究上の努力によって各グループの総和をはるかに超える大きな影響力を実現し、この分野における IMS の知名度を大幅に上げることができるかもしれない。NIH ロードマップによって中心課題と認められた学問分野のすべて（化学、構造生物学、計算機分子シミュレーション、分子細胞イメージング、ナノテクノロジー）が IMS においては十分な地位を占めているが、現在のところ異なる分野間のコミュニケーションや共同研究はほとんどないように見える。生命科学における学際的な前進を遂げるための可能性が既に IMS には存在し、鍵となる技術や人的資源も既にあるので、研究グループ間の共同研究を促進し研究費援助を行うことによってこれを実現することができる。

各研究グループが利用できる実験室設備や装置は大変優れており、研究員達は創造性高い革新的な研究を行っている一方で、多くの研究室が現在必要最少限の研究人員数を欠いている。研究プログラム中の若手研究者、博士研究員、大学院生の数を拡大することにより、分子科学の国際的な中核拠点としての IMS の科学的研究成果や評判を大幅に増強できるかもしれない。日本人博士研究員が不足しているなら、他の国々、特に、他のアジア諸国に目を向け、有能な博士研究員を募集することが重要である。IMS がより多くの博士研究員を採用すれば、それは個々の研究プログラムに大変役立つとともに、新しい考えを持ち込むことができ、学際的な共同研究を増強するためのメカニズムを提供することになるであろう。もう一つの心配事は IMS では大学院生が少ないことである。私は今回の議論の中で以下の印象をもった。つまり、一部には、日本の大学生は自らが卒業した大学の大学院に進学する傾向があるという理由のため、極めて優秀な大学院生を IMS で獲得するのは大変困難であるということである。このジレンマの可能な解決策は、アウトリーチ・プログラムを開設することによって、学部をもつ大学機関における IMS の知名度を上げることがかもしれない。これは、IMS のエキサイティングな科学に関するプレゼンテーションを大学の学部で行う、あるいは、上級学部生が夏に IMS の研究室で研究に参加する機会が提供されるプログラムを導入するなどの形式をとるかもしれない。このような学部学生のインターンシップは米国の大学や研究所では一般的である。

最後に、今後将来、生命科学分野において IMS の評判と影響力をいかにして高めることができるかを考えることは重要である。幸い IMS は、生命科学において研究が最も高い水準にあり、研究に関して国際的な認知を得ている、大変優れた核となる教授陣を持っている。生命科学プログラムへ桑島教授と加藤教授を最近加えたことは、この分野における IMS の知名度と影響力を拡大するのに大いに役立つであろう。相補的な研究分野で研究している研究グループをさらに補充することを優先しなければならない。既存のプログラムに相補的な研究分野とは、蛋白質ミスフォール

ディングと疾病，質量分析法を利用したプロテオミクス，膜蛋白質や巨大分子機械の構造生物学，生体分子の一分子分光法，システム生物学などである。特に，一分子分光法は，IMS に既存の分光法やレーザー技術の強みとよく結びつき，学際的な共同研究を促進させるであろう。しかしながら，上記の分野はすべて急速に成長しており，それらのいずれであっても IMS の既存の研究プログラムとうまく結びつけ，岡崎統合バイオサイエンスセンターと生命・錯体分子科学研究領域の知名度と影響力を大幅に向上させるであろう。

ピーター E. ライト

Cecil H. and Ida M. Green Investigator

教授，部門長

分子生物学部門

スクリップス研究所

7-5 大学共同利用機関としての在り方

7-5-1 はじめに

分子研創設以来30年以上が経ち、その間における学問の発展状況を鑑みると共に共同利用研究体制の充実を目指して、2年有余に及び議論の後平成19年4月から大幅な組織再編を実行した。それと共に、国内における研究環境の変化、国立大学等の法人化、国の財政逼迫等々の状況から、大学共同利用機関のあり方及び分子研のあり方を改めて議論しておくことの必要性を強く感じ、所内のみならず運営会議等においても議論を行って頂いた。議論の背景には次の二つの状況がある：

- (1) 30年前に比べて大学における研究設備の充実が進み「分子研に来なくては研究が出来ない」と言うほどの状況ではなくなった。
- (2) 反面、最近の国の財政逼迫と共に、応用研究と短兵急な社会還元の要求、及び、技術的イノベーション重視の施策からくる基礎学術研究軽視の風潮。

かかる背景においても、いや、かかる状況にあるからこそ、世界的にも大変ユニークな日本の共同利用研究体制を守り発展させていくことは極めて重要であると考え¹⁾。また、国家100年の計にとって「学術と文化」が如何に重要であり、それなくしては日本の将来が危ないと言うことを強く訴えていく必要がある^{2,3)}。国の高等教育や学術研究への投資が先進国としては低すぎるのである。

大学共同利用機関としての役割には、施設共同利用機能の中核と 頭脳共同利用機能の中核の二つがあると考え⁴⁾。は大学の研究設備の充実が進んだ中においてもなおかつ重要な役割を担っていると考える。研究設備の進歩は日進月歩であり、新しい中・大型設備を大学共同利用機関に集中配備し、全国の研究者の利用に供することは依然として極めて大事なことである。これと共に、「研究設備有効活用ネットワーク」の充実は焦眉の急であり、共同利用機関がその中核的役割を果たすことが肝要である。については、共同利用・共同研究の場を提供する拠点として最初に建設された京都大学基礎物理学研究所（湯川記念館）の理念が示すとおり、共同利用機関は、全国の最先端の研究者が一堂に会する梁山泊となり、独自の哲学を持って未踏分野を開拓し卓越した研究成果を上げて、分野をリードして行く役割を担う拠点となるべきである⁴⁾。

以上を踏まえて、分子研のあり方について所内の検討委員会や運営会議等で行われた議論が次節以降にまとめられている。

1)「新たな全国共同利用研究体制の確立に期待する」、松尾研究会報、財団法人 松尾学術振興財団, Vol.13 (2004).

2) 中村宏樹,「先進文化国家日本を築くために」(上、下) 中日新聞, 2007年11月1日, 2日, 夕刊.

3) 中村宏樹,「基礎学術研究とは?」, 中部経済新聞, 2006年12月18日, 「国立大学等の法人化 日本の将来は大丈夫か?」, 中部経済新聞, 2007年2月5日.

4) 中村宏樹,「いい加減にしよう、西洋かぶれ」, 中部経済新聞, 2007年3月26日, 「独創的科学と東洋哲学」, 中部経済新聞, 2007年5月14日.

(中村宏樹)

7-5-2 系と施設の在り方等の検討（特に大学共同利用機関として）

平成 17 年度に、分子研の今後の進むべき方向とその受け皿となる研究体制（特に研究系及び施設の在り方）を探るために系・施設の在り方等検討委員会が設置され、そこで議論された内容を報告書の形でまとめたところである（分子研レポート 2005, p.340, 分子研レポート 2006, p.286, 分子研レターズ 53 (2006.3) p.14 参照）。今回、共同利用研としての在り方についてさらに突っ込んだ議論をするために、委員会を再開した。今回の委員会メンバーは以下の 8 人である。

青野重利（岡崎統合バイオサイエンスセンター教授，生命・錯体分子科学研究領域兼務）

魚住泰広（生命・錯体分子科学研究領域教授）

川口博之（生命・錯体分子科学研究領域准教授）

大森賢治（光分子科学研究領域教授，分子制御レーザー開発研究センター長）

小杉信博（光分子科学研究領域教授，極端紫外光研究施設長，委員会まとめ役）

中村敏和（物質分子科学研究領域准教授）

横山利彦（物質分子科学研究領域教授，分子スケールナノサイエンスセンター長）

斉藤真司（理論・計算分子科学研究領域教授，計算科学研究センター教授兼務）

前回，2 年前の 8 人のメンバーの内，松本吉泰教授と森田明弘助教授の 2 人は転出したため，横山利彦教授，斉藤真司教授に入れ替えを行った。また，2 年前の検討に従って行われた再編により所属が全員変更になっている。

平成 19 年 5 月，6 月にそれぞれ 2 時間以上の時間を掛けて議論した。その内容を報告書案としてまとめ，それを元に各研究領域，主幹施設長会議，教授会議，運営会議で議論を行い，最終的に平成 19 年 10 月に本報告書を所長に提出した。本報告書をベースに次年度，コミュニティの意見を聴取する予定である。

なお，自然科学研究機構等における分野間連携，国家基幹技術等への参画，産学連携などのように分子科学コミュニティを越えた新たな活動に関することについては今回の検討対象から除いた。

(1) 分子研の位置づけの変遷

30 年以上前，大学で不可能な研究を実現するため分子研が作られた。研究部門や施設に採用された初代の研究者達はそのことを強く意識しながら，機器センター，装置開発室，化学試料室などの研究支援組織を立ち上げるとともに，レーザーや磁気共鳴のような特徴ある中型機器に加えて大型施設としてスーパーコンピュータ，放射光源加速器を導入することで，分子科学の新展開に中心的役割を果たしてきた。新規分子物性の観点で物質開発にも力を入れてきた。分子科学分野の国際化にも顕著な貢献を果たしてきた。

分子研の際だった特徴は，研究者の内部昇格禁止の内規によって人事流動が活発に行われるために，広く大学に研究成果が流動し行きわたることである。少数精鋭を基本として研究グループを構成してきたのも研究者及び研究分野の流動性を意識したものであった。総合研究大学院大学での博士号取得者数においても分子研が担当する 2 専攻が目立っており，大学院生の流動化にも貢献してきた。このように大学との活発な交流によって，人がどんどん入れ替わることで，研究内容を見直し，絶えず新しい取り組みができるように工夫されてきた。また，人の入れ替わりがあっても共同利用に支障がないように技術職員がしっかり支える体制を構築してきた。同じ意識で事務支援体制も形成されてきた。

その後，大学における研究環境の改善によって，汎用機器は必ずしも分子研の機器を共同利用しなくても済む時代が到来した。そのような背景の中，分子研でも機器センター，化学試料室，極低温センターを発展的に分子制御レーザー

開発研究センターと分子物質開発研究センターに改組した。さらに岡崎共通研究施設として統合バイオサイエンスセンターを新設したり、分子物質開発研究センターをコアとして所内からナノサイエンスに関わる関連研究部門を分子スケールナノサイエンスセンターに一旦集約することにしたりして、従来の研究施設の位置づけを大きく越えた組織が生み出された。ただし、分子スケールナノサイエンスセンターは、平成19年度に行った研究所組織の再編の際、従来の研究施設の位置づけに戻し、ナノサイエンス関連研究部門は4大研究領域に配置し直すことにした。それと同時に研究施設として機器センターを再び立ち上げることにした。この機器センターの復活は、法人化後、国立大学側で研究設備の維持更新が困難になっている状況を意識したのもであり、現在、全国的に連携して研究設備の整備と共同利用を図る流れが構築されつつある。

(2) 分子研の今後の在り方

大学共同利用機関は大学と関係がなくなればその存在意義を失う。また、教育再生会議の第二次報告（平成19年6月1日）の提言4「国公立大学の連携により地方の大学教育を充実する」の中の4項目中の1項目に「国際競争力に勝ちうる大学共同利用機関への徹底的な支援を行う」とあるところからも、国際的にも各分野を先導するような研究教育を推進し、コミュニティに発信していく役目がこれまで以上に大学共同利用機関に期待されている。分子研が大学共同利用機関として分子科学コミュニティに貢献していくには、所内の研究者と所外の共同利用研究者の両面から以下の(A)(B)のバランスを考えることが特に重要である。

(A) 組織として国際的に分子科学研究を先導していくのはもちろんのこと、個人レベルでも真に独創的な研究を生み出すための特徴ある方策（大学等の若手研究者を抜擢して優れた基礎学術研究環境に置くなど）を打ち出していくこと。

(B) 分子研の研究成果を大学等に還元していくとともに、特徴ある研究設備を精査して組織的に整備し共同研究に供していくこと。

以下では(A)(B)の面から今後の在り方について議論したことを記す。ただし、分子研の場合には、活発な人事流動を通して所内と所外が入れ替わる、つまり(A)と(B)は密接に関係していることが前提条件になっていることを忘れてはならない。

所内研究について

1) 基礎学術研究を中心に新しい研究分野を創出していく。萌芽的研究を開花するまでじっくり育てることのできる環境整備を進める。失敗を恐れず新しい着想に基づいて未踏分野にチャレンジできる雰囲気にするには、短期的な成果を求めることがあってはいけない。分子研がその新分野のメッカであると国際的にも認知されるように研究者の意識を高めると共に組織としての取組みをも強化する。

2) 人事流動があっても揺るがないように、各研究領域を支える研究インフラを強固なものにする。

3) 4大研究領域はそれぞれ長期ビジョンを持って相互作用しながら新分野創成・人材育成に取り組む。個々の研究グループのことに加えて、これらのことに責任を果たせる教授の研究環境を整備・強化する。

4) 研究に集中できる環境にある准教授、助教の充実によって、優秀な若手の人材を登用し育成するチャンスを増やす。

共同利用について

- 1) 現在所有の大型研究設備であるスーパーコンピュータ，UVSOR-II 光源加速器，高磁場 NMR 装置は，世界的競争力が保てるうちに，更新・性能アップサイクルを十分検討し，長期プランに従って戦略的に強化し続ける。一度，優位的地位を失うと，再浮上することは難しくなるので，所内の関係者はタイミングを失することのないような長期責任体制の構築に努める。
- 2) 現在所有の中型機器等は，更新サイクルを十分検討し，長期プランに従って計画的に更新していく。研究所の予算配分方針として縦割りの研究環境整備から共通基盤的研究環境整備にシフトする。
- 3) 次世代を支える若手研究者や大学院生に対する研究支援を強力に推し進める。所内外の若手研究者が各組織の枠を越えて自然な形で将来の夢を語る場やブレインストーミングの場を作り出せるように環境作りに配慮する。分子研究会や所長招へい研究会の弾力的な運用により，各専門分野で年に一回程度の縦割りの研究会ばかりでなく，分野に限らず自由参加可能な国際的な分子科学研究者コミュニティの創成，活性化，交流などを頻繁に企画する。国際共同を含んだ共同利用研究の支援を拡大する。
- 4) 各研究施設の高度な利用技術や新規開発技術などの講習会を各施設で随時，企画できるようにする。大学の研究者の協力の下，基盤的な教育活動も推し進める。
- 5) 技術職員に対しては技術力向上を図り，絶えず，新しい技術にチャレンジできる環境に置く。

以上の各項目は全所的に実行に移すことが理想であるが，順次対応可能な研究領域（施設を含む）から組織的に手を付けていくことが望ましい。