

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る。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ンジ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を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、分子性ポー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い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すが、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、もし特別の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。