

7. 点検評価と課題

昨年度に引き続き外国人運営顧問 Anthony J. Stace 教授 (Physical Chemistry, Univ. Nottingham, UK) と Jean-Pierre Sauvage 教授 (French Academy of Science, France) によって研究活動評価を実施していただき、また新たに Graham Fleming 教授 (Univ. California, Berkeley, USA) と柳田敏雄特任教授 (阪大) に研究顧問をお願いし、所全体の研究評価、研究体制についての提言をいただいた。

外国人運営顧問 Anthony J. Stace 教授と Jean-Pierre Sauvage 教授による、理論・計算分子科学研究領域の全グループ、また物質分子科学研究領域と生命・錯体分子科学研究領域の一部のグループの研究評価が、平成 23 年 1 月に数日間 にわたって行われ、その評価レポート、また分子科学研究所全体のあり方についての提言をいただいた (以下のページに掲載)。特に、理論・計算分子科学研究領域は世界的にみても最大規模であり、分子科学の重要な範囲をほとんどカバーしており、各グループの研究が非常に優れていること、またヒヤリングを受けた実験グループが世界レベルのユニークな研究を行っていることなど、研究面での高い評価をいただいた一方、院生やポスドクの数が少なく、研究室サイズが小さ過ぎること、また所外との共同研究は盛んではあるが所内の研究グループ間の共同研究が十分でないことなど、所全体としての問題点の指摘を受けた。

その対策の一環として、従来のポスドク制度 (IMS フェロー) をより柔軟に運用する一方、新たに特任助教制度を導入してきている。また、京都大学、名古屋大学、名古屋工業大学との学生の交流会や、新しい大学院制度の検討などを行っている。また、所内で交流の場を増やすために、研究所コロキウム、所長招聘研究会を活性化し、その後の検討・交流会の実施などを行ってきた。国際性の向上のため、従来、インド、韓国などとの研究交流が盛んであったものを再度活性化し、また、欧米のいくつかの拠点大学・研究所との研究協力を深めていく予定である。

また、研究顧問 Graham Fleming 教授による研究・組織評価が、平成 22 年 12 月に 4 日間にわたって行われ、所全体の研究のヒヤリングによる各研究領域の研究レベル評価、また改善の方向性についてのアドバイスを受けた。分子科学研究所が目指すべき新しい研究の方向性や、その実施のための組織化等についての提言を受けた。

分子科学研究所では、これからの研究の 2 つの柱「エクストリーム状態の分子科学」と「ポストナノサイエンス (分子システム研究)」を設定し、その具体的なアクションプランの作成を行い、またそれらを実行するための研究グループのあり方について検討を行っている。

上記の評価以外に、毎年 1 月末に、全グループリーダー (教授および准教授) による研究検討会を実施し、分子科学研究所における研究内容のヒヤリングを行っている。

(大峯 巖)

7-1 外国人運営顧問による点検評価

7-1-1 Anthony John Stace 外国人運営顧問

原文

To: Prof. Iwao Ohmine, Director-General of IMS

From: Anthony J. Stace, Professor of Physical Chemistry, University of Nottingham, U. K.

Subject: Report of my visit, January 4th–8th

As part of the review process during my visit in 2009 I had the opportunity to examine research undertaken within groups that fell under the headings of Photo-Molecular Science and Materials Molecular Science. During this visit in 2011, discussions with staff have concentrated on research under the heading of Theoretical and Computational Molecular Science; however, there was also an opportunity to discuss recent new developments that have taken place within the research program of Prof. N. Nishi from the division: Materials Molecular Science and to review the work of Prof. Furutani from the division: Life and Coordination-Complex Molecular Science. I should state that many of the views expressed in my report last year regarding the overall excellence of the experimental research undertaken at IMS remain true, and the Institute continues to justify its position as one of the World's leading centres for research. This document will focus primarily on those aspects of the Theory and Computational research at IMS that I have been able to examine during this current review period.

First, a few general observations on the division as a whole. Over a period of three days, I met with the leaders of eight theoretical and computational research groups. With this number of full and associate professors, the theoretical division is significantly larger than one would expect to find in most universities either in Japan or World-wide. Taking my own university (Nottingham) as a reference point, then the IMS group is twice as large and this is probably true in most other universities. Therefore, the division should have a “critical mass” that brings significant intellectual and (possibly!) financial benefits to IMS. Intellectual benefits should come from a pooling of theoretical techniques and resources, whereby each new research problem does not always require the investigator to ‘reinvent the wheel,’ but instead he/she can call on the reservoir of methodologies that already exists with the division. Financial benefits could come from the group as a whole being able to justify significant investment in state-of-the-art computational power.

The breadth of theoretical research being undertaken within the division is very impressive, and ranges from the analysis of core excitations in gas phase molecules, through to solid state simulations and the study of conformational changes in biomolecules. All members of the division are actively engaged in a mixture of theory development and application and there is no evidence of groups, for example, just running computer code developed by others.

Each group leader spent approximately 45 minutes summarising their current research and describing plans for future projects. Each presentation was very comprehensive and provided details of both the theoretical/computational background and applications to real systems with evidence of supporting experimental data where applicable. Since it is not possible to give a detailed breakdown of all the material covered in each presentation, I will provide what **in my opinion** are the research highlights from each project.

Prof. Nagase—Important developments in the implementation of fast and accurate theoretical methods for the treatment of large molecules. The identification of a novel class of endohedral metallofullerenes with unique magnetic and electronic properties.

Prof. Hirata—Application of statistical mechanics methods to the treatment of processes in biomolecular systems where hydration

is considered important. Important problems being treated include ion transport and the thermodynamics of the hydrolysis reaction in ATP.

Prof. Yanai—Implementation of multireference methods for the treatment of systems where electronic motion is strongly correlated. These methods are seen as essential for the development of accurate quantum chemistry calculations on transition metal and other open-shell or high spin systems.

Prof. Okumura—Development of new methods for the simulation of small biomolecules in water. New techniques make it possible to sample regions of configuration space that would not otherwise be accessible using conventional MD methods.

Prof. Ehara—Development of methods for the study of excited states and chemical reactivity. Impressive results on the interpretation of double core hole spectra in small molecules, and where the match with experimental results is excellent.

Prof. Saito—Development of new correlation methods for understanding the vibrational and librational motion of molecules in the condensed phase. The work has led to important advances in our understanding of anomalous behaviour in the heat capacities of bulk water.

Prof. Nobusada—Research focuses on the dynamical behaviour of electrons in materials that has been induced by electromagnetic radiation. Has made important advances in the theory of light matter-interactions making it possible to propose new quantum devices based on nanoscale particle arrays.

Prof. Yonemitsu—Important advances in the study of photo-induced phase transitions. Calculations have revealed the time sequence of events that lead to the generation of a metallic phase following the photoexcitation of a two-dimensional organic insulator.

All of the members of the Theoretical and Computational Molecular Science division have an excellent track record for publishing in leading international journals, and my overall view of the division is that the research undertaken is of the highest quality and competes very effectively at an international level.

From the Materials Molecular Science division I also had an opportunity to examine the work of Prof. Nishi on the development and characterisation of new structural forms of carbon and carbon/metal nanowires. It is very pleasing to see how rapidly this work has moved from the laboratory out into areas of potential application, such as the development of new types of fuel cell.

From the Life and Coordination-Complex Molecular Science division I had an opportunity to examine the work of Prof. Furutani. He has developed novel light-induced difference methods in FTIR spectroscopy that are able to reveal the presence of water molecules trapped within proteins. The experiments provide evidence of water clusters in proteins, and can reveal details of the mechanism of proton transport and how ions, such as chloride, interact with proteins.

As noted in my report last year, where there is a deficiency within IMS, and this is reflected also in the Theory division, is in the ability of the Institute to attract good graduate students. I am pleased to see that there is an important new initiative in the form of SOKENDAI, which should provide graduate students with the academic background necessary to pursue a successful research career. Hopefully, this initiative will begin to take effect soon. As with Research Institutes and Universities in many countries, there are continuing concerns over finances. Although the recent cuts do not appear to have been as severe as were expected this time last year, the long-term future of IMS as one of the World's premier institutes for the pursuit of fundamental research does rely on there being stable sources of income. If, for example, number of good graduate students continues to remain low, then IMS will require the financial support necessary to attract the best post-doctoral fellows from across the World.

As observed last year by myself and also by several previous Foreign Councillors, many of the research groups at IMS are

small—some far smaller than would be seen in a typical research-active university. On the positive side, this pattern allows the Institute to employ more scientists and so develop a more diverse research portfolio; however, it can also limit progress within individual groups. The Institute might want to consider the possibility of reducing the number of senior scientists working in each division. Such a step would release money to support a larger number of postdoctoral workers, which would enable some of the groups to expand. Since several scientists are due to retire within the next year, a reduction in staff could be achieved simply by not appointing replacements.

From the two occasions that I have been able to review the work undertaken at IMS, my overall impression is of an Institute consisting of a very many highly talented individuals. However, talent alone may not be sufficient to survive the next 5 or so years of financial difficulties. It may be necessary for the Institute to adopt a more collective approach to research and develop new projects and research directions that actively emphasise collaborations between research groups.

訳文

分子科学研究所 大峯 巖 所長へ

英国ノッティンガム大学物理化学教授 アントニー・J・ステースより

件名：1月4日から8日の訪問リポート

2009年の評価の為の訪問では、光分子科学・物質分子科学の両研究領域の研究グループで行われています研究内容について評価を行いました。2011年の訪問では、理論・計算分子科学研究領域のスタッフの研究に関する議論を集中的に行いました。しかし、同時に、物質分子科学研究領域の西教授の最近の研究の進展状況や生命・錯体分子科学研究領域の古谷准教授の仕事をレビューする機会も持てました。昨年の報告に書きましたように分子研で行われています実験系の研究が全体的な優越性を示しているという多くの私の評価は、(理論系のそれについても)同じく正しいものですし、この研究所は世界の最先端の研究センターの一つであるという立場が正しいことを確信しました。この報告書は、今回のレビューの期間に審査を行った分子研の理論及び計算科学の研究に対するこのような観点について中心的に述べるものです。

理論・計算分子科学研究領域に関する全体的な立場からの幾つかの一般的な印象：3日間にこの領域の8名のグループリーダーに会いました。この(8名という)数の教授及び准教授は、日本はおろか世界的にも多くの大学に見られる数に比べると極めて多いと言えます。私自身の大学(Nottingham)と比較しても分子研の(理論)グループの規模は2倍ですし、他の殆どの大学と比べても同じ状況でしょう。従って、この領域は、分子研に極めて知的な、そして(恐らく)財政的な有利性をもたらすに“必要な量”を持つべきです。知的な有利性とは、理論的(研究開発)技術とその資源のプール化が可能ですが、それによって、個々の新しい研究課題にあたる研究者が、“車を最初から作り直す”必要を常には伴わず、その代わりに領域内に既に存在する方法論の蓄積を利用することが出来るのです。財政的な有利性は、グループ全体に於いて、最高レベルの計算機パワーへの大きな投資を正当化させることを可能にする点でしょう。

この領域内では実に幅の広い理論的研究が行われていることが大変印象的なことであり、気相分子のコア励起状態の解析や、凝縮状態のシミュレーションから生体分子の構造変化の研究に至るまでの大きな広がりを示しています。この領域の全てのメンバーが理論と応用の両面の発展において活発な活躍をしています。そして、例えば、グループの中には、他人によって開発されたコードを計算機に走らせているだけの人が居ないのは明らかです。

それぞれのグループリーダーが、彼らの最近の研究とこれからのプロジェクトをおよそ45分にわたって紹介してくれました。それぞれの発表は、大変広範囲にわたるもので、理論的あるいは計算科学的な背景を詳細に説明し、その理論が適用可能な実験データによって裏付けられる実在系への応用についてのものでした。個々の紹介で示された題材の全てを詳細に評価することは難しいので、私なりの意見でそれぞれのプロジェクトのハイライトと思われるものを以下に紹介します。

永瀬教授：大きな分子の速くて正確な理論計算手法を提供する重要な開発。ユニークな磁気特性と電子的な振る舞いを持った新しい種類のエンドヘドラル金属フラレン（金属原子を内部に閉じ込めたフラレン）の同定。

平田教授：水和現象が重要な働きをしていると考えられる生体分子系の(動的)過程の統計力学的手法による取扱い。(特に,)イオンの輸送やATPの加水分解反応の熱力学的(データ)を含んだ重要な問題に取り組んでいます。

柳井准教授：電子の運動が強く相関している系を多参照法によって取り扱うことを可能にする(理論)開発。これらの手法は、遷移金属系や他の開殻系、高スピン系の正確な量子化学計算には必須のものと思われます。

奥村准教授：水中に存在する小さな生体分子の(振る舞い)のシミュレーションを行う新しい手法の開発。この新しい技術は、通常の分子動力学法ではできない配置空間における(必要な)領域を取り上げることが可能にしています。

江原教授：励起状態と化学反応性を調べる手法の開発。小さな分子のコア/ホール二重(励起)スペクトルの説明は実験結果との絶妙な一致が見られ、印象的なものでした。

斉藤教授：凝縮系での振動や秤動運動の理解のための新しい相関手法の開発。この仕事は、バルクの水の熱容量の異常な振る舞いを理解する上で重要な役割を果たします。

信定准教授：電磁波によって誘起される物質内の電子の動力学的な振る舞いに研究の焦点があります。光と物質との相互作用理論を進展させ、ナノスケールの粒子列による新しい量子デバイスを提案するという重要な発展を遂げました。

米満准教授：光誘起相転移の研究に於ける重要な発展。2次元の誘起絶縁体の光励起に伴う金属相発生の時間変化を理論計算で明らかにしました。

理論・計算分子科学研究領域の全てのメンバーが先端の国際誌に(成果を)出版するという優秀な業績を挙げてきました。私のこの領域に対する全体的な評価は、最高の質を持つ研究業績を挙げており、国際的な水準でも大変有効に競争しているということです。

物質分子科学研究領域からも、西教授の新しい構造を持った炭素や炭素/金属ナノワイヤーの開発とその物性に関する仕事を知る機会を持ちました。この仕事が如何に急速に実験室レベルの仕事から例えば新しい燃料電池への応用開発レベルに進展しているかを知る事が出来たのは、大変喜ばしい事でした。

生命・錯体分子科学研究領域からは、古谷准教授の仕事を知る機会を持ちました。彼は、蛋白質の中にトラップされた水分子の存在を明らかにする新しい光誘起 FTIR 分光法を開発しました。この実験は、蛋白質の中に水クラスターが存在することを明らかにし、プロトン移動機構や塩素のようなイオンが蛋白質と相互作用する機構の詳細をも説明します。

昨年の私の報告でも指摘しましたように分子科学研究所に欠けていますものは、これは理論領域にも言えることで

すが、優秀な大学院生を集める能力でしょう。嬉しいことに、総研大という形で重要な新しい改善策が見られます。それは、大学院学生に研究者としての素晴らしい経歴を具えさせるに必要なバックグラウンドを与えるでしょう。この改善の道は、早急に効果を現し始めると期待されます。多くの国の研究所や大学でもそうであるように、このところ財政的な懸念が続いています。昨年この時期に心配された程には今回の予算削減は起こらなかったようですが、分子研が基礎科学の分野で世界の最高の研究をずっと将来に亘って続けて行けるかどうかは、如何に安定な財源を確保できるかにかかっています。もし、例えば、多くの優秀な大学院生を確保できないならば、分子研は世界中から優秀な博士研究員を集めることが出来る財政的な支援を必要とするでしょう。

昨年私が指摘しましたように、そしてこれまでも何人かの外国人顧問が指摘しましたように、分子研の多くの研究グループは小さい、幾つかのグループが活発な研究を行っている典型的な大学に比べて遙かに小さいのです。ポジティブな見方をすれば、この形体は研究所がより多くの科学者を雇用し、さらに広く研究分野の拡大を図ることができるでしょう。しかしながら、それは(それぞれの領域における)各グループの中での発展にしかならないでしょう。研究所は、各研究領域に属するシニアな研究者の数を減らす可能性を検討しなければなりません。そのような方策を行うことは、より多くの博士研究員の雇用を図って幾つかの研究グループの規模を拡大するに必要な資金を生み出すでしょう。来年度までに(6名の)研究者が退職しますから、その後任をすべて埋めることをせずに、(常勤の)スタッフ数を減らすことが可能となるでしょう。

分子研で行われている仕事をレビューするこの2回の機会において、研究所は極めて多くの恵まれた才能のある研究者を抱えているという全体的な印象を持ちました。しかしながら、能力だけでは、次の財政的に困難な5年やそれ以上の期間を乗り越えるには不十分です。研究を集中的に展開する体制の採用と研究グループ間の共同研究を活性化させる新しいプロジェクトや研究方向を打ち出すことがこの研究所にとって必要となるでしょう。

7-1-2 Jean-Pierre Sauvage 外国人運営顧問

原文

Jean-Pierre Sauvage

Professeur Emérite de l'Université de Strasbourg

Directeur de Recherche Emérite du CNRS

Distinguished Visiting Scholar Northwestern University

IMS, Okazaki

Evaluation Report (Jean-Pierre Sauvage)—January 2011

First, I would like to thank Prof. Koji Tanaka for organising everything for my visit and for being such a wonderful host. Thank you! I also thank IMS for inviting me and allowing me to visit them once more and interact with a few group leaders.

My general impression, after discussing with three PIs (Principal Investigators) working at IMS (Professors Tada, Nagata and Hiramoto), is very good to excellent. However, for most of the points I raised on the occasion of my last visit to IMS (evaluation of the 8 teams of the Life and Coordination-Complex Molecular Science Department, September 29 to October 2nd, 2009), limited

progress has been done in terms of **attracting top level students** and **internal collaborations** as well as for the implementation of a common platform aimed at inducing interaction between groups which seem to have difficulties to tackle joint projects with their neighbours. I do not know if it was realistic to hope for improvement but one can –once more– note that the same weak points still exist. This being said, the essential mission of the researchers is to do high level science, and on this side **I have strictly no doubt that IMS is very successful!**

In my previous report, I also suggested the various PIs to prepare a small document with a list of publications for the last 4 years or so, as well as a citation record (overall number of citations, h index and number of citation per paper). I am very conscious that bibliometric data have to be handled with great care but, on the other hand, it is almost impossible to ignore them nowadays.

1. Prof. Misuki TADA

This very young group is working in an important basic area of research (catalysis) which can potentially lead rapidly to applications (industrial transformations and organic synthesis processes for pharmaceutical companies). The group leader, Dr. Tada, showed an impressive energy and enthusiasm during the discussion. In addition, some of the results presented are with no doubt very novel and promising in terms of efficiency (yields, turnover numbers and selectivity). The general principle is to perform catalytic reactions using oxide-supported transition metal complexes. The molecular catalysts themselves are not always completely new but the combination of such molecular species with surfaces is certainly very novel. It leads to exceptionally active catalytic systems compared to the analogous catalysts used in solution. It has also been possible to generate chirality close to the surface which is potentially of interest for asymmetric catalysis, which seems to be of prime importance in industry. Prof. has also presented some nice work on the generation of phenol from benzene and O₂, using a surface-confined rhenium cluster as catalyst. The role of two interstitial nitrogen atoms is intriguing and seem to be related to a particularly efficient stabilisation of the cluster edifice. Another interesting project is dealing with molecular imprinting on the surface and the use of the cavities obtained (with their association selectivity for certain substrates) with the hope that these systems will behave in way reminiscent of enzyme active sites. Of course, the analogy between the active site of an enzyme, which is highly adaptable to the substrate, and the present systems has limitations.

No doubt that Prof. Tada's group is very productive and creative. It is very beneficial to the IMS that Prof. Tada accepted the position offered by the Institute.

2. Prof. Toshi NAGATA

The general project of the group (artificial photosynthesis) is certainly very important and interesting. It is also extremely ambitious and will involve long term research, successes and failures. It is very likely that the researchers will obtain results which are not necessarily the ones they would have hoped to get. Artificial photosynthetic systems, based on molecular chemistry, have been long-awaited molecular devices. It is indeed essential to try to mimic what Nature could achieve (although on a much longer period of time than humans!) in terms of conversion of solar energy to chemical energy. The group led by Prof. Nagata has a recognised expertise in the field of organic synthesis, which is indispensable for building multi-component molecular species able to behave in way reminiscent of the Photosynthetic Reaction Centres as well as a deep knowledge of natural photosynthesis (mostly green plants). Generally speaking, research projects involving multi-step synthesis are extremely time-consuming and require a lot of work, the “trial and errors” strategy which has to be used in synthesis, being certainly risky. This is probably the reason why the productivity

of researchers involved in such an approach is not as high, in terms of publications, as that of scientists working in others research fields. A possible improvement would be to simplify the structure of the target molecules if possible, so as to reach interesting functions without paying such a high synthetic price.

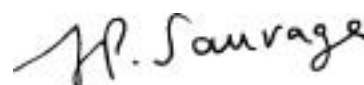
I note that Prof. Nagata has published a few joint papers with Prof. Tanaka. This is certainly a positive aspect of the work and similar collaborative work should be encouraged among other teams.

3. Prof. Masahiro Hiramoto

The group of Prof. Hiramoto is mostly working on solar cells. They have selected p-I (for “interlayer”)-n devices, based on organic electro- and photoactive chromophores. As stated by the PI, a very important discovery related to the use of **two** organic components, made in 1986 by Tang, had a huge impact on the field and on the research of Prof. Hiramoto. Combining two organic molecular species seems to be the best solution to favour charge separation in the material and thus generation of Charge Transfer excitons leading to large photocurrents. Interestingly, similar concepts are used in purely molecular systems in solution, in the field of “artificial photosynthesis,” also in relation to models of the biological photosynthetic apparatus. Prof. Hiramoto’s team has focused on C₆₀ and a simple metal-free phthalocyanine. These compounds are commercially available or easy to obtain in the lab and they are chemically stable (especially phthalocyanine). The research team led by Hiramoto explores both the most fundamental aspects of organic solar cells and the potential of these devices in relation to applications for solar energy conversion. It is indeed important to identify the weak points of the present systems so as to be able to improve the performance of the available solar cells in terms of efficiency and long-term stability of the materials when exposed to light. Obviously, the field may find important applications which explained why it is highly competitive. The contributions of Prof. Hiramoto and his co-workers is very significant. I have no doubt that the team should be supported if IMS wants to be competitive in this field within the international context.

Okazaki, January 8, 2011,

Jean-Pierre SAUVAGE



訳文

Jean-Pierre Sauvage

ストラスブール大学名誉教授

CNRS 名誉研究所長

ノースウェスタン大学名誉招聘教授

評価レポート

最初に、私の訪問についてあらゆる尽力をいただいた素晴らしいホストの田中晃二教授に感謝します。どうもありがとうございます！ また、私を招待し数人のグループリーダーと接するよう配慮して下さった分子研にも感謝します。

分子研で働く3人のグループリーダー（唯、永田、平本）と議論して、「大変良い～素晴らしい」という一般的な

印象を持った。しかしながら、前回の訪問（2009年9月29日～10月2日、生命・錯体分子科学研究領域の8グループの評価）の際に指摘した点の中で、以下の点についてはあまり進歩していないと感じた。すなわち、最高レベルの学生を勧誘すること、内部の共同研究を促進することである。後者については、グループ間で共同のプロジェクトに取り組むことが困難なようであり、グループ間の相互作用を引き起こすための共通基盤を作り上げる必要がある。改善を望むことが現実的かどうかは私には判断できないが、同じ弱点が未だに存在していることはもう一度指摘しておきたい。その上で申し上げれば、研究者の最も重要な使命は高いレベルのサイエンスを行うことであり、この点については分子研が非常に成功していることには何の疑いもない。

前回の報告で、私はそれぞれのグループリーダーに過去4年程度の業績リストと、引用記録（全体の引用回数、H指数、論文ごとの引用回数）を提出するよう求めた。このような計量書誌学データは注意深く扱うべきものであることは十分に理解しているが、一方今日ではこれを無視することはほとんど不可能である。

1. 唯美津木准教授

このグループは非常に若く、重要な基礎科学（触媒）の研究を行っている。この分野は、工業的な化学変換や製薬企業の有機合成化学などの応用に直結する可能性を持っている。グループリーダーの唯准教授は、議論の間中すばらしいエネルギーと熱意を見せてくれた。それに加えて、得られた成果のうちいくつかは非常に新しく、効率（収量、ターンオーバー数、選択性）の点できわめて有望である。全体的な方針は、酸化物に担持された遷移金属錯体を用いて触媒反応を行うことである。触媒分子自体はすべて新しいものを使っているわけではないが、そのような分子と表面との組み合わせは間違いなく非常に新しい。その結果、溶液中で類似の触媒を使うよりもはるかに高活性な触媒系を作ることに成功している。さらに、表面付近でキラリティを誘起することに成功しており、これは工業的に重要な不斉触媒に展開できる可能性がある。唯准教授はまた、表面担持レニウムクラスターを用いて、ベンゼンと酸素からフェノールを合成する見事な成果を発表している。隙間にある2つの窒素原子の役割はたいへん興味深く、クラスター構造が特別に安定化されていることと関係しているように思われる。もう一つの興味深いプロジェクトは、表面上の分子インプリンティングを用いて、特定の基質に選択性を持つ空孔によって酵素の活性中心と似た反応系を組み立てようとするものである。もちろん、酵素の活性中心は基質に対して非常に柔軟に適合するものなので、このような系とのアナロジーには一定の限界は存在する。

唯准教授のグループが非常に生産的かつ創造的であることは疑いない。唯准教授が分子研に着任したことは、研究所にとって大きな利益があったと言える。

2. 永田 央准教授

このグループのプロジェクト（人工光合成）は非常に重要かつ興味深い。それと同時に、非常に野心的であり、長期間の研究と成功・失敗を含むものである。この種の研究では、必ずしも最初に意図していたわけではない結果が得られることが非常にしばしばある。分子化学に基づく人工光合成は、古くから目標とされてきた分子素子である。太陽エネルギーを化学エネルギーに変換するという点で、自然がこれまでに達成してきたことを模倣することは、確かに重要である（もちろん、自然は人類よりもはるかに長い時間をかけてきたわけではあるが）。永田准教授のグループは、優れた有機合成技術を持つものとして認知されており、これは光合成反応中心と類似の機能を持つ複合分子系を組み立てるには必須のものである。また、天然の光合成系（特に緑色植物）についての深い知識も持っている。一般的に言えば、このような多段階の合成を含むプロジェクトは多くの実験と試行錯誤を必要とし、非常に時間がかか

るため、大きなリスクを伴う。このようなアプローチをとる研究者は他分野の研究者に比べて、論文数という点での生産性が低くなることは避けられない。一つの改善策は、もし可能であれば標的化合物の構造を単純化して、それほど大きな合成上の代償を支払うことなく興味深い機能を達成することであろう。

永田准教授は田中教授と共著の論文を出している。これは良い点であり、他の研究グループ間でもこのような共同研究を進めることが推奨されるべきである。

3. 平本昌宏教授

平本教授のグループは太陽電池について研究している。選んだのは p-I (interlayer)-n 型のデバイスで、電気的活性・光活性を持つ有機物を用いている。平本教授が指摘する通り、1986年の Tang らによる 2 つの有機成分による太陽電池に関する重要な報告が、この研究に多大な影響を与えている。2 つの有機分子を組み合わせることは、物質中の電荷分離とエキシトン生成によって大きな光電流を得るための最善の策である。興味深いことに、生体系の光合成を模倣した「人工光合成」分野における溶液中の分子系においても、同様のコンセプトが使われている。平本教授のグループは、 C_{60} と単純なフリーベースフタロシアニンに注目している。これらの化合物は市販されているか、研究室で容易に調製することができ、化学的にも安定である（特にフタロシアニン）。平本教授のグループは、有機太陽電池の最も基本的な性質について探求するとともに、太陽エネルギー変換への応用の可能性も視野に入れている。現状のシステムの弱点を解明することは重要であり、太陽電池の効率や光照射下での長期間の安定性を改善するのに有用である。この分野が重要な実用化につながることは明らかであり、そのために激しい競争がある。平本教授のグループは著しい貢献をしてきている。分子研がこの分野で国際的な競争力を維持するためには、このグループへのサポートが必要であることは疑いない。

2011年1月8日

Jean-Pierre Sauvage

(署名)