

## 7. 点検評価と課題

昨年度に引き続き 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戴いた。また外国人運営顧問であるオックスフォード大学副学長の Ian Walmsley 教授には光分子科学研究領域研究グループと極端紫外光研究施設 UVSOR に於ける研究を重点的にヒヤリングしていただいた。さらに, 運営顧問の廣田襄教授, 齋藤軍治教授, 増原宏教授には, 分子研の研究所全体運営状況, 研究領域のあり方, 研究サポート体制などについての提言を戴いた。

Graham Fleming 教授は光化学研究の世界的リーダーであり, UC, Berkeley 校の研究担当副学長を兼務されている。Fleming 教授は 2013 年 10 月に 4 日間分子研に滞在し, 特に, 4 月から発足した協奏分子システム研究センターの状況について詳細なヒヤリングをしていただき, その運営や研究の展開の仕方などについて多くの重要な指摘を戴いた。

Ian Walmsley 教授は著名な量子光学の研究者であり, 英国オックスフォード大学研究担当副学長を兼務されている。2013 年 8 月に 4 日間にわたり, 光分子科学研究領域研究グループと極端紫外光研究施設に於ける研究を重点的にヒヤリングしていただいた。また分子研の全体の運営, 人事のあり方などについても有益な提言を戴いた。

さらに運営顧問の廣田襄教授, 齋藤軍治教授, 増原宏教授には, 12 月と 1 月にわたり, 分子研の全般の組織運営状況について所長, 総主幹から, また各研究領域や研究施設の研究や運営状況について各研究領域主幹・施設長からヒヤリングをしていただき, 研究所の組織, 各研究領域の研究全般に対する評価, 提言を戴いた。

研究顧問の柳田敏雄特任教授には, 2012 年 4 月のグループリーダー (PI 教授および准教授) による研究発表会 (所長ヒヤリング) において, 各研究の評価と研究所全体将来の方向に対する提言を戴いている。

(大峯 巖)

## 7-1 外国人運営顧問による点検評価

### 7-1-1 Ian A. Walmsley 外国人運営顧問

原文

#### Report to the Director General of the visit to IMS August 2013

This report for the Director General of the Institute of Molecular Science (IMS) provides a summary of my impressions of the research activities at the IMS, based on my visit to the Institute on Aug 19–22. During that visit I met with each of the Directors of the Research Divisions as well as with the group leaders in the Photonics Division. I also visited UVSOR, and read the annual report of the Institute, together with Prof. Adam Hitchcock's report on UVSOR from October 2012, as well as the general response of Prof. Graham Fleming from his visit around the same time.

My comments should be understood as a particular personal view of the state of activity at IMS rather than as an evaluation, which would be neither appropriate nor feasible for an individual to conduct.

Overall, it is clear that the IMS comprises a group of outstanding scientists conducting excellent research at leading edge of a wider range of fields, some with a closer connection to molecular science than others. In all cases scientists are addressing important research topics. The research staff is clearly among the top in their areas, as indicated by the number and quality of publications in leading journals, invited talks at major international conferences and external grant income. I was particularly impressed by the excellent group of young researchers who have independent positions, and the exciting research questions they are addressing.

The diversity of research activity and the creative autonomy encouraged in the IMS have together led to a broad and capability across many fields of molecular science. A consequence of this approach is that each group is relatively small, comprised of a Professor and one or two Assistant Professors with perhaps a couple of postdoctoral research assistants and a graduate student. It may be worth reflecting on whether this structure is limiting the potential achievements that are possible within the Institute. In many areas, there is a need for a "critical mass" of coordinated activity in order to take ideas beyond the proof-of-principle stage, and to really be one of the agenda-setting groups in the world.

For instance, a major emerging research area is that of ultracold molecular gases. There is only a small emerging research activity at IMS in this area, surprisingly: Prof. Ohmori's work in the photoassociation of ultracold  $^{87}\text{Rb}$  atoms into diatomic molecules by means of picosecond laser pulses. While this is addressing an important theme in coherent control in collaboration with the top theory groups in Europe, it will be important to increase the level of activity to embrace the many possibilities for molecular science derived from large densities of ground state molecules contained in optical traps. Plans for this are in hand, but progress to a world-leading activity will require investment in equipment and personnel.

This field is also an area where maintaining a competitive research environment would likely require a greater group size than currently appears to be possible at IMS. Other areas too, such as Chemical Biology or Quantum Information Science, are actively growing elsewhere in the world, and it would be good to engage in some scoping activity for future new activities in these areas to which IMS could make significant contributions. Of course, appointing outstanding individuals with a mandate to take forward their own research is absolutely important, but this can be tensioned against areas of expertise that the IMS wishes to develop in order to continue to be a world-leading research institute in 20 years time.

Any such discussion may also involve a consideration of whether the appointment structure is appropriate to the aspirations of the Institute. The present structure has many similarities to a university, with the exception that there are not internal promotions

from Assistant Professor. This structure underpins the individual creative autonomy that provides the ideas-generation mechanism that lies at the heart of scientific discovery. Yet there are limitations to such a structure. For example, the difficulties in recruiting sufficient number of high quality graduate students into the Graduate School without an undergraduate programme. On the other hand, neither are there the advantages of group size that are usual attributes of a research institute, such as the MPG institutes, where there are fewer autonomous leaders and more research capacity in each group by means of larger numbers of permanent and postdoctoral research staff.

The issue of whether internal promotion from Assistant to Associate Professor might also be considered. There is value in the current policy of bringing in young researchers for an extended period in which they develop their own research programmes, as this “leavens” the research culture and brings forward new ideas. Nonetheless, it is currently not possible to keep on some of these individuals. This is a loss of great intellectual capability that is not obviously the optimal strategy for developing the best ideas to the greatest degree. I concur with Prof. Fleming that enabling these researchers to have a stake in the long-term success of the IMS will ensure the long-term success of the Institute. The risk in appointing young people to permanent positions very early in their careers could be mitigated by rigorous “tenure”-type reviews at an appropriate stage. Indeed, such evaluations might be applied more broadly periodically across the staff.

The “export” of talented researchers to permanent positions in universities has provided IMS with excellent connections to the Japanese academic research community. It could be worth exploring how to use these connections to develop closer ties with Universities—more joint projects, for instance—that will bring in graduate students on shared activity, as well as increased opportunities for competitive research income.

The third element of research capacity is the graduate students. Here the role of SOKENDAI Graduate School is clearly critical in sustaining the vitality of the research environment. There appears to be insufficient numbers of students for the current needs. However, it is not clear to me where the problem really lies, and it would be good to develop a plan of action to address the challenge. If positions at universities are more attractive to students, what is the reason for this? Are they unaware of what IMS has to offer? Are universities offering better stipends and working conditions (*e.g.* funding for conferences)? Is the research and social community environment at universities more conducive to developing a cohort of students in each year? Understanding these issues might enable the problem to be tackled.

Finally the management of intellectual property (IP) deserves a proper review. It appears that there is significant potential for even greater exploitation of IP arising from the IMS activities, and capturing this would probably be in the best interest of the institute. There are established models whereby this is facilitated without perturbing the “blue skies” approach to research that is an IMS hallmark, and it could lead to a new aspect to the research culture that would make the IMS an even more attractive opportunity for the best research staff and graduate students (many of whom will not go on to work in academic research).

#### Department of Photo-Molecular Science

This Division supports a broad portfolio of research primarily in optical techniques for materials and molecular science, including especially ultrafast science, as appropriate for the study of molecular dynamics. I found the research to be of very high quality, with major innovations and discoveries across all groups.

*Laser Science: Assoc. Profs. Taira and Fuji*

The technology developed by the groups working in this area including both the development of laser systems as well as applications, is having a major impact in several areas. Prof. Taira's "laser sparkplug" project is garnering high visibility for the IMS in non-traditional industries. It is clearly innovative and excellent quality research.

The development of new sources and measurement techniques of ultra-short optical pulses for ultrafast science is a relatively new activity that has potential applications for research in several other IMS groups. It would be good to see this potential realised, since the broad expertise in molecular science at IMS is an advantage not enjoyed by attoscience groups elsewhere.

*Nano-Optics and Nano-Materials: Prof. Okamoto*

The visualization of optical fields on the nanometer spatial scale is a key advance for nano-science. The techniques of near-field microscopy developed in this group have great potential for the study of molecular complexes, aggregates and other nano-structures by virtue of the great control over *e.g.* chirality that is possible using designed nano-antennae.

*Coherent Control: Prof. Ohmori and Dr. Takei*

IMS has a good international reputation in this area, due to several noteworthy accomplishments by this group in the manipulation of quantum states of small molecules for applications such as information processing at the quantum level. The possibilities for scalable new technologies based provide a great opportunity. IMS is well positioned to explore the potential given the conjunction of experimental and theoretical expertise in the Institute.

The emerging projects combining ultrafast optical methods with ultracold matter promises to open new territory for discovery, including in the study of correlations between atoms in a dense cold gas induced by dipole-dipole correlations. In this area particularly, perhaps stronger connections to the IMS Theory Groups could be made, as well as the international experts that are already engaged.

*Coherent Control: Prof. Oshima*

The control of the rotational and vibrational degrees of freedom in molecules provides new approaches for spectroscopy, and the work at IMS is exploiting this opportunity (for example, in the correlation between molecular orientation and ionization). This group has developed a suite of novel methods using ultrafast lasers to orient collections of molecules and observe their coherent motion. Tools for more comprehensive control, such as complete population transfer using "ladder climbing" approaches promise to yield new insights into the structure of molecular states. Application of these to larger molecules is highly challenging, and the group is making progress in this direction: It will be important to ensure the fruits of this approach are commensurate with the efforts involved. The optical technology developed by this group may have applications in other areas, and this might be considered for the future.

*Quantum Information Science: Research Assoc. Prof. Shikano*

The appointment of Dr. Shikano as a new principal investigator in the area of many-body quantum correlations in larger systems from a bottom-up perspective opens important new territory for IMS, and could link very well to experimental activity both within the Photonics Division and elsewhere, especially CIMoS. The international connections that Dr. Shikano has will also be helpful in bootstrapping the Institute's profile in this area. His excellent work already has a high profile in that respect.

The opportunity for stronger connections and applications in both experimental quantum information science (QIS) and in nano-science could be further bolstered, perhaps by an additional appointment across these areas.

*Photochemistry*: Prof. Kosugi

The conjunction of experimental and theoretical expertise in the application of X-ray spectroscopy to the study of local environments of atoms and molecules in solids, liquids and interacting systems is a world-leading capability of this group, and has clearly leveraged the resources of both the IMS facilities and international collaborations to excellent effect. Innovative experimental and computational approaches to a broad range of problems has led to a significant number of high quality research outputs. A particularly exciting development from both a scientific and instrumental point of view is the high-spatial resolution soft X-ray microscope enabling 2-D spectroscopy.

*Synchrotron Accelerator Research*: Prof. Katoh

Clearly the outstanding work of this group has ensured that UVSOR remains a competitive machine of its kind internationally. I was impressed by the upgrade activity that has been undertaken by the group, especially the world-leading THz beams, and the vision for the future in the generation of coherent synchrotron radiation. This provides an important resource for IMS.

*Photochemistry with Soft X-Rays*: Assoc. Prof. Shigemasa

The utilization of fluorescence spectroscopy as a means for understanding atomic and molecular processes in strong fields has yielded some very interesting observations from samples irradiated by ultrashort EUV and X-ray free-electron-laser pulses at the SPring-8. In particular the pioneering work of the group in coherent nonlinear optics at such wavelengths is an opportunity to be exploited.

CIMoS (Research Center of Integrative Molecular Systems)

The recent establishment of this research center opens new vistas for synergies across research divisions to address the critical question of how autonomous function emerges in systems based on molecular components. The imaginative combination of life sciences, organic chemistry, materials science and nanotechnology should make for world-leading science in this important area. This activity seems to me to reflect a unique character of research institutes (as opposed to Universities)—they have the capacity to establish research centers that are able to address long-term foundational questions which require concentrated attention from a wide range of disciplines over a long period. This is a necessity if serious progress is to be made. It is a model that might be used in other areas to stimulate cross-divisional fertilization of ideas for “big questions” in molecular science.

UVSOR

I begin my comments on this facility with the disclaimer that I am not an expert on synchrotrons. Further, the expert review of this facility last year by Prof. Hitchcock has already provided relevant important comments.

It is clear that UVSOR occupies an important niche in Japanese and indeed in international synchrotron capability by virtue of its 0.75 GeV beam energy. The current research undertaken on the machine takes significant advantage of this niche and attracts a number of both internal and external users delivering high quality research.

The IMS user community is clearly producing excellent research on this machine, and has a vigorous programme of research for the next several years. This activity, however, will not saturate the machine capacity.

The possibility for X-ray imaging using scanning methods will provide a new capability for nano-science that could open up new areas. Investment will be required in order for this potential to be realized.

Primarily, it will be important to articulate a clear vision for the machine for the future, if it is to remain a world-leading facility for research in the next decade. Is the wavelength region likely to continue to be a critical one for molecular science? How should other unique features, such as the beam brightness, be exploited? What new beam lines should be developed and which current lines closed?

Such scoping activity could identify the emerging key areas of molecular science to which UVSOR could contribute a unique capability, which might be used to direct investment in establishing IMS or joint IMS/University groups to exploit such capabilities.

#### Other Divisions

The briefing by the Directors of the Departments of Life and Coordination-Complex Molecular Science, Theoretical and Computational Molecular Science, Materials Molecular Science and the Research Center of Integrative Molecular Systems was very helpful in providing context for the IMS research activity. I will claim no expertise in many of the areas covered by these Departments and their respective Divisions, so I cannot comment in detail on the science in which they are engaged. Nonetheless, I was impressed again by the range and quality of activity in all Divisions. The Directors have a clear vision of what they wish to accomplish and a rationale for taking it forward. There appeared to be very good connectivity between these Departments and the Research Centers and UVSOR.

Overall, my impression of research at IMS is that it is of very high quality, with a great potential for continuing to maintain this quality, based on the excellence of its researchers and its outstanding facilities and experimental infrastructure.

I. A. Walmsley

University of Oxford

10 September 2013

---

訳文

2013年8月 分子研訪問レポート

分子研所長に提出した本レポートは、8月19日から22日にかけて分子研を訪問した際、分子研における研究活動に対する私の印象をまとめたものである。分子研訪問の際には、各研究領域の主幹、および光分子科学研究領域のグループリーダーと面会した。また、UVSORを見学するとともに、分子研 Annual Review、2012年10月に実施された Adam Hitchcock 教授による UVSOR に関するレポート、および同時期に研究所を訪問した Graham Fleming 教授のレポートにも目を通した。

私のコメントは、評価ではなく、分子研の活動状況に関する個人的な見方であると考えてもらいたい。本レポートを管理者が評価のために利用することは適当ではないし、利用可能なものでも無い。

全体的にみて、分子研は、幅広い研究分野（それらのうちいくつかの領域は、他のものに比べてより分子科学に関連した領域である）の最前線において、すばらしい研究を実施している傑出した研究者のグループから構成されていることは明らかである。すべての研究者が、重要な研究対象を扱っている。一流学術誌に発表された研究論文の量と質、主要国際会議への招待講演、外部資金の獲得状況が示すように、研究スタッフは、それぞれの研究分野において、明

らかにトップクラスである。独立した優秀な若手研究者および彼らが取組んでいる優れた研究には大きな感銘を受けた。

分子研において奨励されている、研究活動の多様性ならびに創造的な自主性はともに、分子科学に関する多くの研究分野の広がりや将来性につながるものである。このような方向性の帰結として、各研究グループのサイズは比較的小さい(教授1名、1~2名の助教と数名のポスドクおよび学生からなっている)。このような組織構造が、研究所において本来達成可能な業績を制限するものになっているか否かについて再考してみる価値はある。多くの研究分野において、原理証明の段階を越えたアイデアをつかみ、世界的に真に最先端を行く研究グループの一つとなるためには、研究活動において「ある一定のサイズ(critical mass)」が必要である。

例えば、現在拡大しつつある研究分野として、極低温分子気体に関する研究がある。分子研においてこの研究分野における研究活動がごく限定されていることは驚くべき事である。本分野の研究には、ピコ秒レーザーパルスを用いて、極低温<sup>87</sup>Rb原子を光会合し2原子分子を生成するという、大森教授の研究がある。この研究は、コヒーレント制御における重要な研究テーマとして、ヨーロッパで最高の理論グループとの共同研究として取組まれているが、光トラップされた高密度の基底状態分子から引き出される多くの可能性を分子科学に取込むためにも、より研究を活性化することが重要であろう。これらの取組みは進行中であるが、世界をリードする研究活動に発展させるためには、物的ならびに人的な投資が必要であろう。

この研究分野では、研究競争に勝てる環境を維持するためには、現在分子研において可能なグループサイズよりも大きなグループサイズが必要であろう。ケミカルバイオロジー、量子情報科学などもまた、世界的にみて活発に発展しつつある分野である。分子研が重要な寄与ができ得るであろうこれらの研究分野を、将来的な新規研究の対象として取りあげてを視野に入れるのも良いのではないだろうか。もちろん、独自の研究を進める権限をもった優秀な個人を任用することは重要であるが、そのことは、分子研が今後20年間世界をリードする研究所であり続けるために展開したい専門分野とは相反する可能性がある。

上記のような議論は、教員任用のやり方が、研究所が希望するものに合致しているかどうかの議論にも関係している。現状の教員任用のやり方は、准教授の内部昇進が無いことを除けば、大学のそれとよく似ている。このようなやり方は、個人それぞれの創造的な自主性(これは、研究アイデアを生む源であり、かつ、科学的発見の根幹をなすものでもある)を支えるものである。しかしながら、このようなやり方にも限界がある。例えば、十分な人数の優秀な大学院生を、学部を有しない総研大で募集する際の困難さもある。一方、例えばマックスプランク研究所に見られるような、研究所ならではのグループサイズの優位性も分子研には無い。マックスプランク研究所では、ごく少数の独立した研究リーダーのもとに多数の常勤研究者、博士研究員がいることで研究能力を高めている。

准教授の内部昇進に関するルールについても考慮すべきであろう。若手研究者に彼ら自身の研究を展開するために、任期無しの研究期間を提供するという現在の方針は、研究文化の「発酵」を促し、新しいアイデアを生み出すものでもあるので、評価できるものである。それにもかかわらず、現状ではこれら若手研究者をずっと確保しておくことはできない。これは、知的生産性の大きな損失であり、すばらしいアイデアをさらに発展させるための最適な戦略ではないことは明らかである。准教授に対して、長期的にみて研究所全体に利益をもたらす業務と利害関係をもたせることが、長期的な研究所の利益を保証するものであるという点で、私とFleming教授との意見は一致した。研究経歴の非常に早い時期に、若手を常勤ポストに任用するリスクは、適当な時期に「終身在職権(tenure)審査」型の評価を厳密に実施することにより、軽減することができる。それにまた、そのような審査は、研究スタッフに対しても、定期的に幅ひろく実施しても良いかもしれない。

大学の常勤ポストに有能な研究者を供給することで、分子研は日本国内の研究コミュニティと良好な関係を築いている。この関係を、大学との連携強化（例えば、共同研究を通じた大学院生の取込み、外部競争資金獲得の可能性向上をもたらすであろう共同プロジェクトなど）を図るためにどう利用するか、調査してみる価値があるであろう。

研究の生産性を規定する第三の要素は、大学院生である。研究環境の活力維持において、総研大の果たす役割は非常に重要である。現状では、必要とされる数より不足した学生数しかいないように見受けられる。しかしながら、私には、どこに問題があるのかよく分からない。問題に対応するためのアクションプランを進めるのが良いのであろう。学生にとって、他の大学の方がより魅力的であるとするなら、その理由は何なのだろうか？ 学生達は、分子研が彼らに提供するものについて、よく分かってないのだろうか？ 他大学の方が、より良い奨学金や、学会参加費補助のような好条件を提供しているのだろうか？ 大学における研究環境や地域環境が、毎年学生達を引きつける助けになっているのだろうか？ これらの点を考慮することで、解決すべき問題を明らかにできるであろう。

最後に、知財管理について検証する。分子研の活動から生み出される知財の開拓については、大いに見込みがあるように思われる。また、知財を獲得することは、研究所の利益に適合するものであろう。分子研の特徴である、「実用性を求めない」という研究の方向性を阻害することなく、知財開拓を促進するための確立されたモデルがある。これは、優秀な研究スタッフや学生（彼らの多くは、学術研究分野でずっと働き続けるわけではない）にとって、分子研をより魅力的なものとするにちがいない、研究文化に対する新しい見地をもたらし得るものである。

#### 光分子科学研究領域

本研究領域においては、分子ダイナミクス研究にふさわしい、主に高速現象を対象とした科学を含む、材料科学・分子科学に関連した光学技術分野において広範な研究分野をカバーしている。実施されている研究の質は非常に高いものであり、すべての研究グループにおいて、優れた研究上の革新・発見がなされている。

#### レーザー科学：平等准教授，藤准教授

レーザーシステムの開発および応用を含むレーザー科学分野において研究を実施している彼らの研究成果は、いくつかの研究領域に対して大きな影響力を有している。平等グループで実施される「レーザー点火プラグ」に関する研究プロジェクトは、伝統的には分子研と関わらない業界での分子研の知名度獲得に寄与している。本研究は、本当に革新的かつ非常に質の高い研究である。

高速現象を対象とした科学のための、極短光パルスの新規光源ならびに測定技術の開発は、分子研内の他の研究グループの研究にも利用可能な新たな研究対象である。分子研における分子科学分野での幅広い専門的技術は、アト科学を研究している他所の研究グループには無い優位性であるので、この潜在力について認識すべきであろう。

#### ナノオプティクス・ナノ材料：岡本教授

ナノメートルスケールでの光学イメージングは、ナノサイエンスにおける鍵となる先端技術である。岡本グループにより開発された近接場光学顕微鏡に関する技術は、優れたキラリティー制御（例えば、ナノアンテナ構造の設計に利用可能）により、分子複合体、凝集体、および他のナノ構造体に関する研究に対して大きな可能性を有している。

#### コヒーレント制御：大森教授，武井博士

分子研は、本研究分野において世界的に高い名声を有しているが、それは、量子レベルでの情報処理などを目指した小分子の量子状態操作において大森グループが成し遂げてきた顕著な研究成果に因るものである。拡張性のある新



しいテクノロジーの可能性は、大いなる好機をもたらすものである。分子研は、所内の実験と理論の専門家間の連携によって、そのような可能性を探求するのに絶好の環境にある。

超高速光学手法と極低温物質とを組み合わせた大森グループの新しい研究プロジェクトは、新たな発見の領域を切り拓くことを約束するものである。例えば、双極子 - 双極子相互作用によって誘起される高密度低温気体中の原子間の相関に関する研究などが挙げられる。この分野においては特に、既に連携している海外の専門家と同様に、分子研内の理論グループともより強く連携しても良いかもしれない。

#### コヒーレント制御：大島教授

分子の振動および回転自由度の制御は分光学に対する新しいアプローチであり、分子研における研究はこの方向性（例えば、分子回転とイオン化との相関解明）を開拓するものである。当研究グループは、極短パルスレーザーを利用して配向が揃った分子集団を生成し、そのコヒーレントな運動を観測する新規な手法を開発している。当グループが現在進めている、「ラダークライミング」を利用した状態分布の完全移動のようなより包括的な制御法は、分子運動の量子構造に対する新たな知見をもたらすものと期待される。これらの方法論をより大きな分子に応用することは極めて挑戦的であるが、当グループはこの面でも成果を挙げつつある。その成果が費やす努力に見合うかどうか重要なポイントとなる。当グループが開発している光技術は他の分野へも応用可能と思われ、今後の方向性として考慮すべきであろう。

#### 量子情報科学：鹿野特任准教授

ボトムアップの視点から非常に大きい系における量子多体相関に関する研究を進める新任のPIとして鹿野博士を任用することにより、分子研にとって重要な新しい領域が開拓されている。また、光分子科学研究領域、および他の部門（特に、協奏分子システム研究センター）内の実験グループとの間でよい連携が取れるであろう。さらに、鹿野博士のもつ国際的なコネクションは、この分野における研究所の評価を引き上げるのに役立つであろう。その点において、彼のすばらしい仕事は、既に高い評価を得ている。

実験量子情報科学およびナノサイエンスにまたがった研究分野における研究者をさらに任用することにより、これらの研究分野間でのより強い連携や応用の可能性が増強されるであろう。

#### 光科学：小杉教授

固体、液体、および相関系における原子・分子の局所環境の研究に対するX線分光の適用を、実験と理論両面において融合して進めることにより、本研究グループは、世界をリードする能力を備えている。また、分子研の研究設備および国際的共同研究の供給源として、すぐれた効果をもたらしていることは明らかである。様々な問題に対する、革新的な実験ならびに理論的な手法により、質の高い多くの研究成果が得られている。2次元分光が可能な、高い空間分解能をもつ軟X線顕微鏡は、科学的な観点・装置的な観点の双方からみて、特筆すべき研究成果である。

#### 放射光加速器研究：加藤教授

UVSORが、この種の実験装置の中で世界的に競争力を維持しているのは、本グループのすばらしい研究によるものであることは明らかである。本研究グループが着手している高度化に関する取組み（特に、世界をリードしているテラヘルツビーム、およびコヒーレントシンクロトロン光の発生）については感銘を受けた。

軟X線を利用した光科学：繁政准教授

強い場 (strong field) における原子・分子プロセスを理解するために、蛍光分光を利用し、SPring-8 において極端紫外光 (EUV) およびX線自由電子レーザーを照射したサンプルについて、多くの興味深い研究結果を得ている。

CIMoS (協奏分子システム研究センター)

本研究センターの創設は、分子を構成要素とするシステムにおいて、如何にして自律的な機能が発現するかという根源的な問題に取り組むための、領域を越えた相乗的な取組みにおいて新たな展望を開くものである。生命科学、有機化学、および物質科学・ナノテクノロジーを、構想力に富んだ形で融合させることにより、この重要な研究領域において世界をリードする科学を展開すべきである。本センターの研究活動は、私には、研究所 (大学と対照的なものとして) の特徴的な性格を反映しているものに思われる。研究所においては、根源的な問題に対し長期的に取り組む (これには、長期間にわたって、幅広い研究分野からの集中した取組みが要求される) 研究センターを設立することが可能である。非常に重要な進展を得ようとするならば、このようなやり方が必要となる。本センターは、他の研究分野においても、分子科学分野における「重要な問題」に対して、領域を越えた研究アイデアの融合を促すためのモデルと成り得るであろう。

UVSOR

本研究施設に対してコメントするに際し、私は放射光の専門家ではないことを、まず始めにお断りしておく。さらに、本研究施設に対しては、既に昨年度、Hitchcock 教授が専門家の立場から適切で重要なコメントを寄せている。

0.75 GeV のビームエネルギーという特徴により、UVSOR が日本国内および国際的な放射光施設の中でも、重要で特徴的な立ち位置を占めていることは明らかである。本研究施設で実施されている現在の研究は、このような特徴の優位性を活かしており、質の高い研究を実施している多数の国内および国際的なユーザーを獲得している。

分子研の利用者コミュニティは、本施設を利用して非常にすばらしい研究を実施しており、向こう数年間にわたる活発な研究プログラムが存在している。このような活発な研究状況にもかかわらず、装置の能力的には、まだ余裕がある。

スキニング法を利用したX線イメージングは、新規な研究分野を開拓するであろうナノサイエンスにおいて、新たな可能性をもたらすものであろう。この可能性を実現するためには、設備投資が必要となるであろう。

今後 10 年間にわたり、世界をリードする研究施設であり続けようとするなら、何よりもまず、将来的な装置の在り方に関して、明瞭なビジョンを示すことが重要であろう。UVSOR の波長領域は、分子科学にとって重要なものであり続けるのであろうか？ 他のユニークな特徴 (ビーム輝度のような) を、どのようにして開拓するか？ どのような新規ビームラインを設置するか、現状のビームラインのいずれかを閉鎖するのか？

上記のような精査作業により、UVSOR の特徴を活かし得る、新たな分子科学の重点分野を見極めることができるであろう。また、このような作業は、上記のような可能性を開拓するために、分子研内での研究グループ、あるいは分子研と大学が連携した研究グループを確立するのに役立つであろう。

他の研究領域

生命・錯体分子科学研究領域、理論・計算分子科学研究領域、物質分子科学研究領域の研究主幹および協奏分子システム研究センター長による概要説明は、分子研における研究活動の状況を把握する大きな助けとなった。私は、こ

これらの研究領域がカバーする大部分の研究分野の専門家ではないので、これら研究領域で展開されている科学について詳細なコメントをすることはできない。ただ、これらすべての研究領域がカバーしている研究分野および研究の質の高さには感銘を受けた。各研究領域において何をなしたいのか、および、それをなすための理論的根拠について、各研究主幹は、明確なビジョンを有している。各研究領域、研究センター、および UVSOR 間には、良好な関係性が見て取れた。

以上を総合すると、優れた研究者と最高の施設・実験設備を基盤とした分子研における研究は、非常に質が高いものであり、この質の高さを維持継続していくための力を十分に有しているというのが、私の印象である。

オックスフォード大学

I. A. Walmsley

2013年9月10日

### 7-1-2 Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問

2014年3月24日～26日の3日間にわたって、Thomas V. O'Halloran 外国人運営顧問による外部評価を実施した。今年度は主に、生命・錯体分子科学研究領域、ならびに協奏分子システム研究センターに所属する研究グループを対象として評価を実施した。Thomas V. O'Halloran 教授による評価レポートについては、分子研レポート2014に掲載予定である。

## 7-2 研究顧問による点検評価

### 7-2-1 Graham R. Fleming 研究顧問

原文

#### Report to the Director General of IMS on visit of October 23–25, 2013

The most substantive portion of the visit concerned a thorough discussion of the new center for Integrated Molecular Systems. This important new center has got off to an excellent start and I was impressed with the breadth and energy that Professor Akiyama has brought to the leadership of this effort. The three components of CIMoS are well thought out and logically connected, with ambitious goals to understand and design systems exhibiting complex emergent properties. High quality scientists including several rising stars at IMS are involved in all three of the Divisions: Trans-Hierarchical Molecular Systems, Functional Molecular Systems and Biomolecular Systems.

To achieve its ambitious goals CIMoS will need to develop, not as the sum of its excellent parts, but as a coherent entity that is more than the sum of its parts. This is a difficult challenge for most institutions and it is my impression that IMS has rather little experience in building such a coordinated effort from the ground up. The tendency is always to divide the money among the individual groups who then prefer to operate independently. Of course there are numerous strategies for counteracting fragmentation: I strongly suggest the Director keep a reasonable amount of money to support cross-divisional projects, organize a 1-day retreat and have very regular (lunch?) meetings with progress reports from the PIs. On next year's visit I would like to hear about the specific efforts to create interaction and coordination within CIMoS as well as, of course, scientific progress. This is an exciting project.

A closely related and impressive new project centered in the joint Okazaki Institute for Integrative Bioscience was described by Professor Kato. The ORION project involves three new departments—Biodesign, Bioorganization, and Biosensing Research—and, with its focus on biological rather than chemical function, is highly synergistic and complementary to CIMoS. The contributions of Professor Kato to both efforts will certainly help ensure appropriate communication and cross-fertilization of these important and timely efforts. I very much look forward to hearing of progress in both ORION and CIMoS.

A second proposed effort that would involve a significant number of IMS PIs—"Precision Measurement and Control of Molecular Systems" has not been developed far enough for a detailed recommendation. It is not clear what scientific problem this project is aimed at solving, hence the need for a new Center/Division is not clearly articulated.

On this visit the number of individual presentations was smaller than usual to allow for full discussion of the new and proposed developments, however the talks I did hear were excellent. In particular Professor Saito gave a superb summary of a wide body of very thoughtful and incisive theoretical investigations into the dynamics of heterogeneous systems, and Professor Kobayashi gave a nice overview of his work on oxyhydrides.

To sum up, the visit this time revealed an Institute beginning a necessary rebuilding in order to make contributions to 21<sup>st</sup> century molecular science as significant as those in the earlier eras of IMS's development when simpler systems were being understood for the first time. The magnitude of change is significant and there will no doubt be stresses and strains as a result, but the Director General is to be congratulated on setting these important changes in motion. IMS is now set on a path to be a significant contributor

to the next level of molecular science—that of complex systems with properties and functionalities very different from the sum of their parts. The next few years should be very exciting at IMS.

Graham R. Fleming

January 5, 2014

訳文

2013年10月23日～25日の分子研訪問に関するレポート

新設された協奏分子システム研究センター（CIMoS）に関して包括的に議論することが、今回の訪問において最も重要な点であった。この重要な新センターは、すばらしいスタートを切っており、秋山教授のリーダーシップによってもたらされている息吹と活力に大いに感銘を受けた。複雑な創発特性を示す各種システムを理解しデザインするという意欲的な目標をもったCIMoSに設けられた3研究部門は、よく考慮されており、必然的に互いに関連し合っている。何人かの新進気鋭の研究者を含む分子研の優れた研究者が、3研究部門（階層分子システム解析研究部門、機能分子システム創成研究部門、生体分子システム研究部門）すべてに配置されている。

CIMoSが掲げた意欲的な目標を達成するためには、優秀な個々の足し合わせとしてではなく、個々の足し合わせ以上の一体化した存在として発展して行く必要がある。このような事は、多くの研究機関にとって困難な挑戦である。私の印象では、分子研が、そのような状況を根底から作り上げる経験はほとんど無いのではないと思われる。独立して研究を実施することの方を好む個々の研究グループに研究費を配分する傾向は常にある。もちろん、研究グループの細分化に対抗する多くの戦略が存在する。領域間で実施する研究プロジェクトに対するリーズナブルな研究費のサポート、リトリート（1日）の実施、各PIによる経過報告を含む定期的なミーティング（ランチョンセミナー？）等を継続して実施することをセンター長に強く推奨するものである。来年度に分子研を訪問した際、CIMoS内での相互作用や連携を作り出す努力についてはもちろん、研究の進展についても話を聞けることを期待している。非常に楽しみな計画である。

岡崎統合バイオサイエンスセンターを中心として実施される、CIMoSと密接に関連した、印象的な新規プロジェクトについて加藤教授より説明があった。化学的機能より生物学的機能に重点を置いた本プロジェクト（オリオンプロジェクト）は、3つの研究領域（生命時空間設計研究領域、生命動秩序形成研究領域、バイオセンシング研究領域）から構成されており、CIMoSと相乗的および補完的なものである。CIMoSならびにオリオンプロジェクトの双方に加藤教授が関与していることは、重要で時宜を得たこれら二つの活動間での適切な情報交換ならびに相互交流によって、多いに助けとなると思われる。オリオンプロジェクトならびにCIMoSの進展を大変楽しみにしている。

多くの分子研PIが関与する第二の概算要求、「極限分子科学開拓プロジェクト——物質科学の革新を先導する分子計測ならびに分子制御の極限化」については、詳細な勧告・助言に値する程に練れたものとはなっていない。本プロジェクトにおいてどのような科学的問題に取り組もうとしているのかが明らかではなく、新しいセンター／研究領域の必要性についても明瞭に関連づけられていない。

今回の分子研訪問においては、新規に申請された概算要求事項の進展状況について包括的に議論を行うため、個々の研究者による研究成果報告についてはこれまでよりも少数にとどめたが、その中で今回聞かせてもらった話はいずれもすばらしいものであった。中でも、斉藤教授は、不均一系ダイナミクスを対象とした、思慮に富んだ鋭い理論研

究の全体像について見事に要約して示してくれた。また、小林准教授は、オキシヒドリド化合物に関する彼自身の研究についての概要を見事に示してくれた。

総括すると、今回の訪問では、まず最初により単純な系の理解を目指した分子研創設期に、研究所が分子科学に対して重要な役割を果たしたのと同様、分子研が21世紀の分子科学に重要な貢献するためには、研究所の再構築が必要な時期に来ていることが明らかとなった。変革の度合いは大きく、その結果として緊張やひずみが現れることは疑いない。しかし、所長は、このような重要な変革を実施することを喜ぶべきである。分子研は今まさに、次世代の分子科学（個々の要素の単純和とは異なる性質や機能を有する複雑系の分子科学）への重要な貢献者となるべき途上にある。分子研の今後数年間は、非常に刺激的なものであるはずである。

Graham R. Fleming

2014年1月5日

## 7-3 運営顧問による点検評価

### 運営顧問による組織・研究評価及び提言

運営顧問 廣田 襄（京都大学名誉教授）  
齋藤軍治（名城大学農学部教授）  
増原 宏（台湾国立交通大学講座教授）

第1回運営顧問会議 2013年12月25日 13時半～17時半

#### 内容

- (1) 全体像を所長が説明（現状の紹介、将来計画など）
- (2) 研究領域（理論・計算、光、物質、生命・錯体）と研究施設の現状、将来計画等を主幹・施設長が説明

第2回運営顧問会議 2014年1月9日 11時～17時半

#### 内容

- (1) 研究室・施設の見学
- (2) 所長、研究総主幹との意見交換
- (3) 主幹・施設長との意見交換

### 7-3-1 報告書

2013年12月25日に3名の運営顧問（廣田 襄、齋藤軍治、増原 宏）は、研究所の現況と将来計画についてヒアリングを行い、所長および各部門（理論・計算分子科学、光分子科学、極端紫外光研究施設、物質分子科学、生命・錯体分子科学、協奏分子システム研究センター、岡崎統合バイオサイエンスセンター）の研究主幹より説明を受け、質疑・応答を行った。2014年1月9日に JVSOR 施設 光分子科学研究室 岡崎統合バイオサイエンスセンター（NMR装置）などの見学を行い、その後所長および研究主幹とヒアリングおよび見学の内容を基に、研究所の課題、とくに研究所の目指す新しい方向性、組織、人事、各研究グループの研究の現状と課題、共同研究について自由討論形式で意見の交換を行った。

分子研は化学と物理の学際的分野である分子科学における大学共同利用研究所としてスタートし、創立当時から豊かな研究費と整備された装置に支えられ、多くの優れた研究を行って国際的にも高く評価される優れた分子科学研究のセンターであった。また人材育成の面では、物理化学分野を中心に我が国の大学における研究・教育のリーダーとして活躍する人材を数多く輩出して分子科学の発展に大きく貢献した。しかし、創立から40年が経ち分子科学は現在ではより広範な領域と関わりを持つ分野に広がっている。論文引用度指数などに示されるように、分子研は現在でも高い研究水準を維持しているが、大学の研究環境が整備され、とくにナノテクノロジーとバイオ関係の予算が大幅に増えたこともあって、分子研の Visibility が下がってきたことは否めない。また、大学院生が少なく各研究グループの規模が小さいために研究活動を大きく展開することが難しいという問題を抱えている。研究のグローバル化が一層進み、国内でもWPI拠点整備されてくる状況と、分子科学研究ならではの特別な装置を持つ予算が保証されないことを考えると、国内的にも国際的にもより存在感のある研究所になるためにはどのような方向を目指すべきであろうか。それには人事の完全な国際化、大きな研究グループを作ることを良しとする柔軟な運営が必要であろう。また、分子科学における国際センターとして、国内・国外の世界的に優秀な分子科学研究者グループとの頭脳・人材相互交流をはかることが不可欠である。ヒアリングおよび見学後の討論では、新分野の開拓、人材の育成、国際交流および

共同研究に関する問題を中心に議論が行われた。本報告書は会議で出された意見に、その後各顧問から出された意見も加えて廣田がまとめたものである。

## 1. 研究の現状、新しい方向と新分野の開拓

分子研はこれまで、理論・計算化学、光分子科学、分子分光学、分子物性科学などの分野において国際的にも高く評価される顕著な業績をあげてきた。理論・計算化学および光分子科学分野では現在も高度で活発な研究活動が続けられている。一方、物質・分子物性の研究では教授の交代の時期でもあり、まだ研究の新しい方向性がはっきり見えていないように思われる。生命・錯体分野では新しい教授の着任が続いており、今後の大きな発展を期待したい。

分子研における研究の方向としてどのようなものが望ましいであろうか。分子研の研究者には学術研究における世界の指導的役割が要請される。研究課題、観察手法、研究対象、理論などにおいて、世界的な観点から独創的で挑戦的なものであるかを念頭において切磋琢磨することが期待される。分子研では比較的若い教授群を中心に、分子研の持つ恵まれた研究環境（研究および技術支援の人材、共通設備の充実など）を活かして、大型の研究よりもさらに先を見据えた萌芽的研究や人材育成を重視した研究も望まれるであろう。この点から平成25年度より発足した「協奏分子システムの創成」を目指す新たな研究組織の今後の活動が期待される。この組織は分子集団の自律的反応の流れを創る優れた機能をもつ分子系を創成することを目的とし、既存の「エネルギー変換」、「物質変換」、「分子機能発現」、「生命体的分子システム」の4領域を束ねるものである。そして、その実現のために分子系の極限観測とコントロール法の開発を目指す「極限分子科学」の構想が次の概算要求の目標として示された。これに関して、次のような意見が出された。

- ・「協奏分子システムの創成」研究に似た研究は他でもやっている。他との違いは何か。分子研らしさはどこにあるか。世界的な流れに乗りすぎているのではないか。もっと構造と結合と機能の原点に立ち返って基礎に取り組むべきではないか。
- ・「協奏分子システム」の研究に「極限分子科学」を組み合わせるとはじめて分子研らしさが生まれる。そのためには新しい研究手法と装置開発が必須である。
- ・明確な問題意識を持って研究を進めるべきである。相互作用系の「極限分子科学」の研究は若い人が中心になって提案し、展開すべきであろう。
- ・大きな競争的資金（国内、国外）の獲得による資金・人材（または場所）の確保により、個人の研究体制の強化および研究者としての世界的認知度の向上を図るべきである。

「協奏分子システムの創成」の研究に限らず、一般に新分野の開拓と新しい研究への挑戦に関して次のような意見が出された。

- ・分子研がどのような新分野を開拓するか海外は注目しているが、最近 visibility が落ちているように思われる。
- ・分子研に着任する若手（准教授）には、今までやってきた仕事の延長でない新しい分野に挑戦するチャレンジ精神が欲しい。准教授にはチャレンジ度に応じた処遇を考えるべきではないか。
- ・PI同士の切磋琢磨による相乗効果によって新しい研究が生まれるような環境作りが望まれる。他分野の研究者とコミュニケーションのできる人材の養成が重要である。
- ・コロキウムや各領域での合同セミナーをもっと活発にして、若手が新しい研究に挑戦する雰囲気醸成すべきである。



- ・ 国際的にもう少し化学分野での存在感を増すような努力が必要である。とくに物質・物性の研究では物理の一流のジャーナルのみでなく、分子科学や物質科学の視点で研究成果を練ることにより化学や生物学の一流のジャーナルへも論文を発表すべきである。
- ・ 各当該研究分野の研究者コミュニティで、話題になっている原理的な研究課題は何であり、将来の発展性や波及効果はどうか、研究戦略を案出する。
- ・ 分子研内の異分野の研究者の融合による挑戦的新分野開拓を期待する。学術的重要性 科学的(社会的)位置づけ、解決法、研究条件、戦略(資金、装置、人など)を議論し、挑戦的な融合プロジェクトを立案することが望まれる。
- ・ 岡崎研究機構内に基生研、生理研、岡崎統合バイオサイエンスセンターがあるにもかかわらず、これまで生命分子科学関係の共同研究がなかった。もっと岡崎統合バイオサイエンスセンターを活用するなどして、研究グループの異なる個人研究者同士の融合プロジェクトが生まれることを期待したい。

## 2. 組織, 人事, 人材育成に関して

所長のリーダーシップのもとに優秀な若手を教授に抜擢し、若手独立フェローの制度を導入するなど、人事に関して若手研究者を発掘して育てる意欲的な改革が行われていることを高く評価する。今後は国際化に対応して外国人研究者をふやすために、人事公募に関する書類、手続きを基本的に英文で行うことを考えるべきであろう。

分子研が内部昇格を禁止してきたことは、人事の流動性を高め、大学との人事交流を推進してきた点において大きな意義があった。一方で、優秀な若手研究者を分子研にキープできないという問題点もある。この問題は大学における人事とも関係し、今後慎重に検討すべき課題であろう。

分子研の教授、准教授が研究に関して独立であることは、准教授が独自の研究を展開できる望ましいポリシーであるが、各研究グループが助教+PD(2助教)の体制で小さく、大学院生も少ないために挑戦的な研究をするには人手が足りないという問題がある。しかし、現状でも相当大きなサイズでの研究室運営に成功しているグループもあり、この問題の改善のために所員の一層の努力が望まれる。研究グループのサイズを大きくするための具体的な提案としては以下のような意見があった。

- ・ 外部資金をさらに積極的に導入してより多くのPD(外国人を含めて)を採用し、優れた研究の魅力によって優秀な大学院生を確保する一層の努力が必要である。
- ・ 研究能力があっても分子研のような研究環境に向いている人とそうでない人がある。所員の採用の際に、分子研でも大きなグループを作れる適性のある研究者を見極めることが必要である。
- ・ JSPSの外国人研究員枠を利用するなどして外国人PDを増やす努力をすべきである。また、外国人所員を生かした人材の国際的なネットワークを構築することが、優秀な外国人PDを増やすために有効であろう。

若手研究者の育成に関して次の意見があった。

- ・ 若手独立フェローは素晴らしい制度であって、定着が望まれる。しかし、彼らの研究を発展させるには、今後PDなどで彼らをサポートすることも必要であろう。
- ・ 若い人の国際化は必須であり、年に1-2ヶ月程度のサバティカル制度の導入が必要ではないか。

### 3. 共同利用機関としてのあり方と国際交流に関して

分子研は大型の施設、装置として UVSOR 施設、レーザー開発、スパコン、高周波 NMR などを有して、分子科学の研究者に共同利用の場を提供している。これらの装置をトップレベルで維持・整備してゆくには継続的な努力と工夫が必要である。また今後の共同利用では国際化のさらなる推進が期待される。それに対応するには、研究者と事務職員あるいは技術職員の間連携を円滑に行う URA の活用が必要であろう。共同利用に関しては次のような意見が出された。

- ・ UVSOR は高度化の完成で、この種の施設としては先端的で特徴があり国際的にも競争力のあるものに生まれ変わった。そろそろ次期の計画を考え始めるべきであろう。
- ・ 分子研のスパコンの能力は相対的に低下している。国は「京」コンピュータのような超大型機に力を入れているが、先端分子科学として特徴的な利用はあるのだろうか。
- ・ レーザー開発では先端的な開発が行われてきたことは認めるが、分子科学の研究に生かせるような開発も目指して欲しい。
- ・ 900MHz NMR では固体試料測定のための整備などが着々と進んでいる。また、共同利用の試料測定に対応できる技術職員を置いていることは高く評価される。
- ・ 通常の一般的な研究設備は所内の研究者が共通装置として利用できることが重要で、所内の人が使わない装置に対して技術職員を配置して共同利用に対応する必要はない。
- ・ ヘリウム枯渇問題が深刻になっている。SQUID などヘリウムを使う共同利用を強化してはどうか。

分子研が分子科学研究における世界のセンターになるためには国際的な頭脳・人材の相互交流の強化が必須である。これに関して次のような具体的な提案が出された。

- ・ 一流研究者（国内・国外）の分子研短期・長期滞在と海外一流研究所への訪問（短期）・講演・講義を強化する；これらは、世界的研究ハブ構築に不可欠である。
- ・ インフラ整備：海外からの研究者家族（含子供）の長期滞在に関する整備（衣食住、医療、教育、娯楽等々の世話人、それらの要点を記したパンフレット作成；これらに関して上記 WPI 拠点が良い経験をつんでいる）
- ・ JSPS は海外からの研究者招聘事業を行っており、著名外国人の招聘において、関連する研究所や大学での講演を推奨している。この事業を用いることにより、分子研研究者の国内・国外での認知度を高める。
- ・ 国内・外の大学・研究機関における講演・講義で研究内容を紹介し、優秀な若手研究者・院生をひきつける。優秀な外国人研究者の発掘および育成に関しては、優れた体制と業績を持つ幾つかの拠点（WPI プログラム拠点など）があり、それらを参考にしたらどうか。
- ・ 国際会議は各年開催されているが、上記融合課題や新規プロジェクトに関するテーマでの国際会議の開催を勧める。また、その会議テーマに即した論文を分子研研究者・国際会議参加者、それ以外の関連研究者から集め編集し、世界的ジャーナル特集号として出版する。その巻頭言に、分子研の活動内容を含め上記融合課題や新規プロジェクトに関するテーマの学術的重要性・新規性を訴える。また、特集号の発刊は若手研究者の論文編集能力向上に資する。