

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。

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 2014 年 10 月下旬に 3 日間にわたり、新任 PI の 4 名及び理論研究者 3 名の研究について、また岡崎統合バイオサイエンスセンター、協奏分子システム研究センター（CIMoS）の現状、次期「メゾスコピック計測・解析センター」計画の内容などについてヒヤリングをおこない、また研究所間の新たなプロジェクトの立ち上げ方などに種々の提言を戴いた。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。2015 年 2 月に 3 日間にわたり、分子研の運営状況、理論・計算分子科学、光分子科学研究領域、協奏分子システム研究センター、生命・錯体分子科学研究領域などの主として新たな PI の研究内容、また極端紫外光研究施設、岡崎統合バイオサイエンスセンターの現状について重点的にヒヤリングしていただいた。さらに生理学研究所の研究室を訪問し、分子科学との共同研究の現状について視察していただいた。

さらに 11 月中旬にはシカゴ大学の Berry 教授によって幾つかの研究グループのヒヤリングを行っていただいた。

研究顧問の柳田敏雄特任教授には、2014 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

IMS report

I visited IMS on 25–27 February 2015, and met with academic staff members. I also visited several laboratories, research centers and facilities.

The research groups with whom I met were all involved in the science and application of molecules. In all cases the standard of work was excellent. Projects are often led by creative young researchers who are set to make a mark on their respective fields. Further, the range of expertise available across the institute makes it possible to address significant questions in both science and technology that demand multiple areas of knowledge, skills and technology. This is a feature I noted strongly in the groups with which I interacted on this visit, and the ability of IMS to support cross-disciplinary work of this kind is commendable.

One of the points I spent some time discussing with each group was their perception of their position of their projects with respect to international competition: who are their main competitors around the world and what are their unique advantages? How has this impacted the way in which the IMS researchers approach their projects? How will they frame their strategies in light of this competition?

I was interested to probe what these researchers felt about sustaining and growing the excellence of research activity at IMS in the face of strong and growing research capabilities across the world. Overall, most academics were able to identify some aspect of their expertise that was different from competitors, and which gave them an area in which they were among the leading groups in the world. Similarly, they were clear which areas were stronger elsewhere, and which areas or methods they did not try to compete against. There was a good awareness of the international agenda and activity in which IMS research took place.

Generally there was a sense that the groups could have a larger impact if they were larger – there were, as is common, many more problems of interest to address than the personnel to address them. An expansion of groups by adding fixed-term postdoctoral researchers and graduate students should be explored.

Nonetheless, the constraints on personnel does appear in many cases to have steered groups to seek collaborations that brought together expertise outside that available in any one group. This has broadened the range of research questions that can be addressed and has led to some very fruitful research. Perhaps this is a positive feature of the small number of academic staff per group.

Visits to other Institutes, Centers and Facilities

The IMS approach of providing capacity and capability beyond what is feasible for any one group is also commendable. During my visit I went to another NINS institute in Okazaki, a collaborative research center and an IMS research facility.

Okazaki Institute for Integrative Bioscience (OIIB) represents an outstanding facility for interdisciplinary research, bringing together scientists from across the NINS consortium in a single building with a broad mission and state-of-the art equipment to provide an environment that enables broad questions across all of biosciences, from neuroscience to medicinal chemistry. Appointments of researchers to the OIIB (with a substantive appointment in an Institute) is the right way to bring together different areas of research. The work undertaken there is exceptional in its scope and breadth. Nonetheless, it would be useful to consider how stronger ties could be made between the OIIB and the Institutes themselves, thereby raising awareness of new questions and new ideas and enabling wider cross-fertilization.

UVSOR Facility of IMS provides an exceptional internationally competitive facility with capabilities that attract researchers from around the world. Prof. Kosugi has cleverly positioned the facility so that it occupies a unique set of features – such as beam brightness in the low photon energy range below 100 eV – that set it apart from other facilities around the world.

The colocation of the National Institute for Physiological Sciences likewise provides an impressive array of research capabilities for neurosciences, bioinformatics and physiology. Some of these areas have opportunities for greater collaboration with IMS research, providing new applications for research expertise in the latter. The physical proximity of the two institutes should reduce the barriers for novel interdisciplinary research. It would be interesting to consider possibilities to explore ways in which these could be identified and prioritized—perhaps by a joint workshop or series of inter-institute talks.

Meetings with IMS Research Staff

Takeshi Yanai / Yuki Kurashige

The research undertaken by this group, one of a few theory groups in the quantum chemistry at IMS, is directed towards the numerical modelling of many body electron effects in large molecules. The study of strong correlations for determining the macroscopic properties of materials is a broad field, from high-energy physics, to condensed matter physics, to chemistry, biochemistry and materials science. This team has developed an approach that combines several state of the art techniques—DMRG and perturbation theory—that has enabled them to solve several important problems, in biocatalysis, charge transport in photosystem II and the oxidation states of cluster-bound Mn.

The work of this team shows how expertise in computing and in chemistry is able to advance significantly the state of the art with respect to computing the structure and hence the properties of molecules. The codes they develop are put into the public domain, along with the methodology and applications, which are published in high-quality journals, such as *JCP* and *JACS*.

The pair have a broad range of collaborators with leading groups worldwide, including at IMS, deriving from (a) the availability of the computer code and (b) their own demonstrations of its capability for solving important problems.

Hiroshi Yamamoto

Prof. Yamamoto's research in molecular electronics—in particular the study of organic FETs based on the Mott effect is unique and high profile. His technique of inducing superconductivity by means of applied fields to remove electrons from a Mott insulating state in order to provide conduction pathways, yielding a very rapid, low-switching-energy transistor based on a metal to insulator transition. There is great potential for application of such work in ultra-high-speed computers, which have a long history in Japan.

This work epitomises how physics, chemistry and engineering are brought together to deliver a potentially revolutionary technology, based on a deep understanding of the fundamental properties of quantum materials. Prof. Yamamoto has used this to frame a compelling vision for improving materials of organic semiconductors, which provides his international competitive edge, to enable metal–insulator transition at room temperature. This would be the basis of a revolutionary technology, which IMS should be in a position to capture.

Kiyohisa Tanaka

Prof. Tanaka's group has established a strong ARPES capability at IMS, marrying this with the in-house synchrotron to enable spin-resolved photoelectron spectra with greatly improved sensitivity (by means of iron-based detectors and new spectrometer slit design). Prof. Tanaka's responsibility for maintaining the beamline capability for users means that he is able to implement state of

the art technology for this important low energy probe of materials. Building on UVSOR capabilities, this provides IMS with a world-leading experimental method for photons with <100eV energy, using an exceptionally bright source.

Prof. Tanaka uses the ability of ARPES to directly measure electronic bandstructure at surfaces to study charge transfer in molecular materials. His plan is to make use of the spin-resolution to explore systems relevant to spintronics, such as topological insulators, by probing the distortions of the Fermi surface.

The international competition in this area is naturally sparse, since UVSOR occupies a unique position in the synchrotron community. Groups at Hiroshima and Stanford are the main rivals, but IMS has the source brightness at low photon energies that make the Institute's competitive edge strong.

Satoshi Kera

This group's research on functional properties of organic materials is a recent addition to the IMS portfolio. It brings additional capabilities for the study of materials on surfaces that utilise the strengths of UVSOR.

Prof. Kera's vision is bold: a new "textbook" for molecular semiconductors, which will enable their unique properties of flexibility and printability to be better exploited, especially if the carrier mobility can be increased. To this end, his recent work on the origin of conductivity in organic semiconductors has shed light on what limits this and thus to how it might be improved.

International competition is focussed in Germany, which has a leading position in this area. However, the unique features of high-resolution UV photoelectron spectroscopy together with a strong collaborative theory effort provide the group with a unique position that they can use to advantage.

Prof. Kera has kept a visiting professorial appointment at Chiba, which helps to attract graduate students. Nonetheless, this is an experimental group where increased numbers of personnel will be important to drive forward research in the face of strong competition.

Ryota Iino

Molecular motors are a hot topic in biophysics, and Prof. Iino's research has shed light on the mechanisms of operation that are having a wide impact on the field. He has pioneered a technique of attaching small particles to the molecules, and using light scattering to image the motion directly with very high precision (to better than 1 nm in fact). His innovation of using gold particle means that he can study much higher rotation speeds, since the inertia of the particules is much lower than plastic beads. By this means he has show how the coordinated motion of the "stator" units in the motor delivers unidirectional rotation even in a warm biologically relevant environment. He has recently applied similar technique to linear motors (kinesin) in order to understand why the molecular motion is in one direction only.

His vision is also ambitious: to understand fully the operating mechanism of molecular motors and machines: to develop new kinds of linear motors, based on a fundamentally different fuel; design and build new kinds of molecular machines, such as a hybrid carbon nanotube rotors matched to molecular stators.

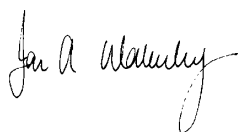
International competition is primarily in Japan and Europe, with some work on the linear motors in the USA. The unique ability to attach Au nanoparticle probes, which, when combined with a novel dark-field imaging methods, leads to high spectral and temporal resolution provides a competitive advantage for the time being. Collaborations are mainly in Japan, in structural analysis and modeling.

This group could also speed up its rate of research if it were larger. This would provide resources to work on more types of molecular machines, thereby maintaining the strong international position it currently holds.

This young theorist, recently appointed to IMS, brings world-leading profile in the modelling of the transport of excitations within biomolecules, especially between the special pair and the reaction center in photosynthetic complexes. This transfer is an essential precursor to charge separation and the efficiency and speed of transport have garnered significant attention in the past decade because it appears that quantum interference may play a role in delivering the favourable properties of these transfer dynamics.

Dr. Ishizaki's new areas of interest in excitation/charge transfer are to elucidate the regulatory mechanisms in photosynthesis (in particular PS II) and explore adiabatic quantum chemical dynamics such as charge transfer at conical intersections.

There is strong international competition in this area from the US and Europe (*e.g.* Whaley, Mukamel, Ronge, Castro and Plenio). Prof. Ishizaki has worked with many of these groups in the past, with particularly strong connections to Graham Fleming's group. Therefore his unique expertise for calculating accurately complex quantum dynamics using statistical mechanics is well known to leading global researchers and offers new opportunities for collaboration with experiment.



訳文

分子研レポート

2015年2月25日 - 27日に分子研を訪問し、研究教育職員と面談した。またいくつかの研究室、研究センター、施設の訪問をおこなった。

面談した研究グループは全て、分子科学および、その応用に関する研究に携わっており、その研究内容は素晴らしいものであった。プロジェクトの多くは、それぞれの研究分野において優れて創造的な若手研究者により主導されている。さらに研究所が幅広い専門分野をカバーしているので、多様な知識、技能、技術が要求される科学・技術の重要な課題に取り組む事が可能となっている。このことは、今回の訪問で面談したグループで特に強調すべき特色であり、この種の学際的テーマを支援する分子研の能力は特筆すべきである。

それぞれのグループリーダーとは、国際競争という点に関して自分たちのプロジェクトの位置をどう認識しているか（世界で主な競争相手は誰で、彼ら独自の優れている点は何か？ 分子研の研究者がプロジェクトを進めるうえで、どのようにして影響力を発揮するのか？ この競争を考慮して、どのような戦略を練るのか？）について、議論する時間を持つこととした。

世界中で研究力が強化・発展している中で、分子研の研究アクティビティの素晴らしさを維持・発展させることにに関して、今回面談した研究者達が、何を考えているかを明らかにしたいと考えた。ほとんどの研究者は競争相手とは異なった、何らかの専門性を見いだすことで、世界をリードする研究グループの中で自らの領域を確立してきている。他の研究者の方がより強力である研究分野、競争すべきでない研究分野、または研究手法についてもよく理解していた。分子研が関わるべき国際的研究課題や研究活動もよく認識されていた。

一般的には、グループがより大きければ、より大きな影響力をもつと考えられている。俗に言う、興味ある問題に

対応する人員よりも、対応すべき興味ある問題の方が多く存在するということである。任期制の博士研究員や大学院生を加えてグループを大きくする事を試みるべきである。

しかしながら、いずれの研究グループにおいても、人的制約が、外部の共同研究者を捜そうという方向性を生み出している。これにより取り組むことができる研究課題が広がり、非常に実りの多い研究が導かれてきた。おそらくこれは、グループの規模が小さいことの肯定的な側面である。

他の研究所、センター、施設訪問

分子研が一つのグループを超えた受入能力と体制を提供しようとしている点もまた特筆すべきである。訪問中、岡崎にある他の自然科学研究機構の研究所、共通研究施設、分子研の研究施設を訪れた。

岡崎統合バイオサイエンスセンター（OIB）は、自然科学研究機構の研究者が一つの建物で学際的な研究を行う、すばらしい研究施設であり、幅広いミッションと最先端の機器を備え、脳科学から薬化学までを包含する、すべてのバイオサイエンスに関する広範な課題に取り組む環境を提供している。（3研究所のうちの一つと併任した）研究者をOIB所属とする事は、異なった研究分野の融合をもたらすためには正しいやり方である。OIBで行われている研究は、非常に幅広いものである。それでもなお、OIBと3研究所の連携をより強めようとする事は有益であろう。それによって新たな課題やアイデアに気付き、より広範な相互交流が可能となるだろう。

分子研のUVSORは、世界中から研究者を惹き付けている、国際的競争力のあるすぐれた施設である。小杉教授は、例えば、100 eV以下の低光子エネルギー範囲における高輝度ビームといったような独自の特徴をもつよう、施設の位置づけを上手く行い、世界の他の施設とは一線を画している。

脳科学、パイオインフォマティクス、生理学を研究している生理学研究所が近くにあることもまた印象的だった。これらの分野には、分子研との共同研究の好機がまだあり、分子研における新たな研究専門領域の開拓に資するものである。二つの研究所が物理的に近いことで、今までにない学際的研究を進めるにあたっての障壁は軽減されるだろう。おそらくジョイントワークショップや研究所間の談話会などを開催することで、学際的研究を設定し、優先順位をつけながら、それらを進める可能性を考慮するのも面白いだろう。

分子研研究スタッフとの面談

柳井 毅 / 倉重佑輝

分子研における量子化学分野の研究グループの一つである本研究グループで実施されている研究は、大きな分子を対象とした多電子理論に関するものである。材料のマクロな性質を決定する強相関相互作用に関する研究は、高エネルギー物理、凝縮系物理、化学、生物化学、および材料科学にまたがる広範囲な研究分野を形成している。本研究グループは、精緻な実験手法（DMRGと摂動論）を組み合わせるという研究アプローチにより、酵素反応、光化学系II中での電荷移動およびマンガンクラスターの酸化状態等、重要な問題を解決することに成功している。

本研究グループは、計算科学ならびに化学に精通しており、分子の構造ならびに性質の計算に関して、最先端の展開が可能である。彼らが開発した計算アルゴリズムは、計算機に実装されており、その研究手法および応用例は、JCPやJACSといった一流学術誌に掲載されている。

本研究グループは、世界をリードする所内外の研究グループとの間で、幅広い共同研究を実施している。これらの共同研究が実施されているのは、彼らが開発しているコンピュータコードの有効性ならびに、彼ら自身が、重要な問題の解決能力を有していることを知られているからである。

山本浩史

山本教授の分子エレクトロニクス、特に Mott 効果に基づく有機 FET の研究は類のないものであり際立っている。伝導経路を与えるため Mott 絶縁体状態から電子を取り除くよう場を加える事により超伝導を導入する彼の手法により、金属 - 絶縁体転移に基づく、スイッチングが非常に速く、所要エネルギーの小さなトランジスタがもたらされた。超高速コンピュータへの応用にも、大きな可能性を有している。日本は、この分野で長い実績がある。

彼の研究は、量子物質の基礎的な性質を深く理解し、物理、化学、工学を融合すれば革新的な技術がもたらされる可能性があるという典型的な例である。山本教授は、このような考え方を、有機半導体という材料を改善するという事に適用した。室温での金属 - 絶縁体転移を可能とすることで、彼の国際的競争力は高まった。分子研が獲得すべき、革新的な技術の基礎となるであろう。

田中清尚

田中准教授のグループは、分子研で強力な ARPES 装置の開発を行い、所内の放射光施設に組み込むことにより、スピン分解光電子分光法の感度を非常に向上させた（鉄ベースの検出器及び新たな分光器スリットデザインを用いることによる）。田中准教授は、ユーザーのためビームラインを維持管理する立場にあるので、この重要な低エネルギープローブ材料に最先端の技術を提供できる。UVSOR に組み込むことにより、分子研は非常に高輝度な光源を利用した、100 eV 未満の低エネルギー光子の実験方法で世界を主導できるようになる。

田中准教授は、ARPES でまず表面の電子バンド構造を直接観測し、分子物質の電荷移動を研究している。彼は、スピン分析を利用しフェルミ面のディストーションを観測する事により、トポロジカル絶縁体などのスピントロニクス系を探究しようとしている。

UVSOR が放射光コミュニティにおいて独自の位置を占めているため、この分野の国際競争が少ないのは当然である。広島大学やスタンフォード大学のグループが主なライバルであるが、分子研の低光子エネルギー高輝度光源は非常に競争力がある。

解良 聡

有機物質の機能的性質に関する本グループの研究により、分子研には新たな分野が加わった。UVSOR の強みを生かした物質表面に関する研究に関して、新たな可能性をもたらしている。

解良教授のビジョンははっきりしている。分子半導体の新たな“標準”である。特にキャリア移動度を増やす事ができれば、柔軟性や印刷可能であるといったユニークな性質を更に活用出来るようになるだろう。この目的に向けた、彼の有機半導体の伝導性の起源に関する最近の研究は、伝導性を何が制限しており、どうすれば改善されるかを明らかにしている。

この分野の主導的位置を占めているドイツが、主な国際的競争相手である。しかしながら、高分解能 UV 光電子分光というユニークな特徴と理論との強力な共同研究により、グループは有利に立てる位置にある。

解良教授は千葉大学の客員教授でもあり続けており、大学院生を惹き付ける一助となっている。それでも、このグループは実験グループであり、厳しい競争にある研究を進めるには人的増員が重要となるであろう。

飯野亮太

分子モーターは生物物理におけるホットな話題である。飯野教授の研究は、その作用機構を明らかにしており、本

研究分野で大きなインパクトを示している。彼は分子に小さな粒子をとりつける技術を開発し、光散乱を利用して非常に高い精度で、その動きを直接観測した（実際 1 nm 以下の精度で）。金粒子を用いるという革新により、より高速の回転速度を研究できるようになった。それは金粒子の慣性が、プラスチックビーズより小さいためである。これにより彼は、暖かい生物的に適切な環境においてさえ、モーターの“ステータ”ユニットの調和した動きが、どのようにして一方向の回転を与えるかを示した。彼は最近、なぜ分子モーターの回転が一方向性に限られているのかを理解するため、同じ手法をリニアモーター（キネシン）に適用している。

彼のビジョンもまた意欲的である。分子モーター、分子機械の動作原理の完全な解明、基本的に異なったエネルギー源に基づく新たな種類のリニアモーターの開発、分子ステータに組み合わせたハイブリッドカーボンナノチューブロータといった新たな種類の分子マシンのデザインと作製などである。

国際競争相手は、まず日本とヨーロッパであり、リニアモーターに関してはアメリカもある。金ナノ粒子プローブを取り付けるのは独自の手法であり、新奇な暗視野イメージング法と結びつけば高いスペクトル分解能及び時間分解能が得られ、しばらくの間優位さを保てるであろう。共同研究は、構造解析やモデリングに関して、主に日本国内で実施されている。

このグループもまた、規模が大きければ研究はスピードアップするだろう。より多くの種類の分子マシンを研究でき、現在の強力な国際的な位置を保持できるだろう。

石崎章仁

最近分子研に採用されたこの若い理論家は、生体分子内（特に光合成複合体中におけるスペシャルペアーと反応中心間）での励起移動のモデル化において、世界有数の成果を挙げている。この励起移動は、電荷分離のきわめて重要な前駆反応である。量子干渉がこれらの移動ダイナミクスの望ましい性質をもたらす役割を担っているのではないかと考えられているため、励起移動の効率とスピードが過去 10 年間にわたり、大きな注目を集めてきた。

石崎博士の励起 / 電荷移動における新たな対象分野は、光合成（特に PS II）における制御機構の解明と円錐型交差での電荷移動のような断熱量子化学ダイナミクスの探究である。

この分野では、アメリカやヨーロッパに強力な国際競争相手がいる（例えば Whaley, Mukamel, Ronge, Castro, Plenio）。石崎准教授は、過去にこれらのグループの多くと一緒に仕事をしており、特に Graham Fleming のグループとは強い結びつきがある。従って、統計力学を用いて複雑な量子ダイナミクスを正確に計算する彼の専門性は、世界の主な研究者によく知られており、実験科学者との共同研究の新たな可能性にもつながるものである。

I. A. Walmsley

Report to the Director General, Institute for Molecular Science**March 2014 visit of****Prof. Thomas V. O'Halloran, Foreign Councilor**

This report for the Director General of the Institute for Molecular Science (IMS) summarizes my findings after a visit from March 24–26, 2014. On this first visit, I toured the research facilities and met with the faculty group leaders as described below. I spent time with each individual and received updates on the status of their individual research programs. In addition, I examined larger team-science projects like the Orion Project in the Okazaki Institute for Integrative Bioscience, the Research Center of Integrative Molecular Systems, the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science and the UVSOR. In this advisory document I summarize my own impressions and provide comments concerning strengths and challenges faced by the Institute in its ambitious plan to be a world leading site for molecular sciences from materials to life.

It is clear from the 39 year history of the IMS that it has steadily fostered some of the most talented entry level chemists and physical scientists in Japan as they begin independent careers. Many of these scientists have gone on to become scholars in the Imperial Universities and several have emerged as key international thought leaders in areas where there is a convergence of molecular theory and precise experimental methods. Dr. Ohmine has done a superb job of guiding the IMS through some important transitions as it approaches its 40th anniversary: seven of the Institute's eighteen professors retired in 2011 ~ 2014. The complexity is also a great opportunity and the Institute is now stepping up to meet new challenges at the interface between theory and high-precision experimental science. I am quite impressed by the direction and momentum in the following areas: understanding the molecular basis of energy conversion, exploiting the inorganic basis of life processes, articulating and developing new materials, and establishing the temporal basis information exchange in complex molecular systems.

I am deeply impressed by the strong scientific accomplishments (in terms both of numbers and impact of publications), the significant societal impact, the overall organization and administration of IMS. This Institute supports a diverse array of cutting-edge research missions such as understanding and improving the physical properties of materials involved in catalysis, solar energy conversion, biophysics, reaction mechanisms of metalloenzymes and the molecular nature of biological clocks. While the primary driving force for the Institute is to understand the molecular basis of very fundamental processes, most of the team leaders have a strong predilection to seek applications of their findings to pressing technological problems, and they are making important contributions in several of these areas. The significant breadth of topic areas and approaches is a strength of the Institute and the research activities are well coordinated across departments. There was clear evidence of a highly supportive core facility infrastructure as well as moderate interaction between groups that have allied methods approaches and goals.

I was also impressed by the progress and contributions to the literature from the larger teams (*i.e.* Orion Project) as well as the smaller groups alike. I do not find that group size correlates with the ability of an Investigator to achieve a highly creative endpoint. The examples of Professor Murahashi and Aono reveal the strong potential and impact of small groups. Thus the concept that there must be a specific mass necessary for progress does not seem to be an essential criterion for evaluating success: some individuals will be better running small teams and others running large teams. Having said this, a major limitation that most of the Investigators at the IMS face is the relatively small pool of talented graduate students.

In terms of targets as the IMS faces for growth and improvement, many of the faculty I met with would have a higher impact on their field if they had access to an additional foreign and Japanese graduate students, either from the Sokendai Graduate School, from Nagoya University or from other partnerships. This is an important issue for the IMS and may have an impact on the successful exiting trajectory of current faculty and the future recruitment of young faculty.

Finally, the IMS has played a central role in nurturing some of the most talented physical chemists in the world and it may have role in addressing a pressing need recently identified by Prime Minister Shinzo Abe and discussed shortly after my visit in the March 29, 2014 issue of *The Economist*: i.e. how to bring a significantly higher percentage of women into the national work force. The IMS's mission and its proven track record of fostering the careers of talented academics at early stage in their career might provide a starting point for a new program to facilitate the recruitment of outstanding female scientists at both the Assistant and Associate Professor levels.

This is not a challenge faced by Japan alone: physical science departments in leading academic institutions across Europe, and to a significant extent in the US as well, struggle with this same challenge: while many female PhD students compete well and excel in the best graduate programs, the percentage of women who go on to take academic appointments as assistant professors is not commensurate. Thus a good deal of scientific capital and creative talent goes untapped. Each country faces different cultural hurdles in optimizing the recruitment of the most talented members of society, but it seems to me that the unique history and widely recognized international strengths of the IMS provide a real opportunity for significant impact on this nationwide challenge. There is not a simple way to address this but I would be happy to discuss how some leading European and US Institutes are making innovative experiments in how to meet this challenge.

Individual Meeting Summaries

S. Masaoka—Division of Functional Coordination Chemistry

Shigeyuki Masaoka is an Associate Professor working on the development of functional metal complexes for artificial photosynthesis. His group is interested in artificial solar energy conversion and storage. In addition to Masaoka, the group consists of one assistant professor, a postdoctoral fellow, several graduate students and a number of research technicians. Masaoka's work on electrochemical water oxidation and oxygen activation chemistry using mononuclear Ruthenium/pyridine complexes is elegant and mechanistically sound. In other project areas there is clear progress in understanding and assembling coherent bi-functional and multi-component complexes that can carry out multiple electron transfer reactions with donors and specific redox partners. The challenge is that these coordination polymers must have the appropriate mixture of first, second and third row transition metals built into appropriately inert scaffold that provides access to the target redox partners. Masaoka is on the right path.

Y. Furutani—Division of Biomolecular Sensing Division

Yuji Furutani work on molecular mechanisms of transporters and receptors in membranes is really at the cutting edge of precise ion flux measurements in complex molecular systems. His use of stimulus-induced difference infrared spectroscopy provides a sensitive probe of the structural and environmental changes of organic and bio-molecules. The group is relatively small and consists of two assistant professors and a graduate student.

K. Kato—Orion Project—Okazaki Institute for Integrative Bioscience—Division of Biomolecular Functions

Professor Kato has assembled a large team to evaluate dynamical structures of biological macromolecules and their complexes at the atomic level, using NMR spectroscopy along with other biophysical, biochemical and molecular biology techniques. His team includes several IMS Fellows, two postdoctoral fellows, more than 8 graduate students and several technical fellows. His strong relationship with Nagoya City University serves the mission of this institute quite well.

T. Murahashi—Division of Functional Molecular Systems

The Murahashi leads a smaller group which includes an assistant professor, an IMS fellow, a visiting scientist and several graduate students. The focus of their research is on a new class of transition metal complexes and their work has led to inventive new approaches to synthetic inorganic and organometallic chemistry. His group's research in the chemistry of multinuclear sandwich complexes is highly regarded and his discoveries concerning reaction mechanism and redox chemistry of highly reactive Pd–Pd complexes has served as the basis for the discovery and development of whole new classes of materials that have intriguing and promising properties. The discovery and characterization of a large number of these new stable multinuclear sandwich complexes has important implications in a number of areas and may lead to entirely new classes of polymers. This is a good example of how small research groups can provide cutting edge breakthroughs even though they are not highly integrated into a larger group. Sometimes creative new avenues are best opened up by a few individuals. This being said, it seems that Murahashi has highly creative streak and that if he had access to additional graduate students, he would make progress in a number of additional areas.

H. Sakurai—Division of Functional Molecular Systems

The Sakurai group's focus on the understanding and manipulating the chemistry of bowl-shaped aromatic compounds (buckybowls) and metal nanoclusters has lead to new insights into novel electronic structures and catalytic compounds. Unlike a good deal of the published 'nano' chemistry, work from the Sakurai group has led to robust synthetic protocols and well characterized materials. This is one of the larger groups consists of numerous postdoctoral fellows, graduate students and visiting scientists.

S. Aono—Division of Biomolecular Functions

Aono's work on gas sensing metalloproteins which regulate the cellular biosynthetic/transcriptional apparatus has led to the discovery that the oxidation state of the metal heme center is the key to information transfer. This is a smaller research group that applies a wide array of very precise spectroscopic measurements and structural methods to understand the molecular mechanisms of metal-containing sensor site in these proteins. Aono's team has expertise in theory and precise molecular measurements and their work has important implications for understanding the molecular mechanisms in several tropical diseases as well as very fundamental mechanisms of heme metabolism. Given the importance of inorganic materials being developed across the IMS to improve energy conversion and understand dynamic features of information transfer, further work in the area of inorganic chemistry of life appears to be a growth area as the Institute considers future priorities.

S. Akiyama—Research Center of Integrative Molecular Systems—Division of Trans-hierarchical Molecular Systems

Professor Akiyama has rapidly built a most impressive trans-disciplinary research operation focusing on establishing the molecular machinery that regulates the 24 hour period of biochemical activity in photosynthetic bacteria. This is perhaps some of the most

impressive experimental work going on at the interface of physical science and biomolecular assemblies in the world. ‘Clock’ genes are being cloned and characterized in many systems and this progress has been critical to understanding a great deal of microbial and mammalian physiology; however, there is little consensus on ANY molecular mechanism for how a biological clock might actually work! Akiyama’s studies of the ‘cyanobacterial clock’ proteins is impressive and in my opinion, on the right track. His work is visible and well known around the world... and there is a good deal of anticipation of what kind of mechanism his precise molecular studies will support.

D. Jiang—Division of Molecular Functions

Prof. Jiang work on the design, synthesis and development of porous, ordered, polymer frameworks is elegant. The group is a healthy size with several IMS Fellows and a number of graduate students. This team is quite productive and publishes in the best journals in the field on several platforms: two-dimensional polymers, covalent organic frameworks and microporous polymers. These provide a base for a number of interesting applications.

T. Suzuki—Division of Functional Molecular Systems

Prof. Suzuki directs a small research group that focuses on development of organic semiconductors for molecular thin-film devices. This work is outside of my expertise and I found it difficult to follow Suzuki’s presentation. I was impressed by the combination of synthetic prowess and spectroscopic characterization.

Y. Uozumi—Division of Complex Catalysis

I was not able to meet with Prof. Uozumi to hear about his current work on heterogeneous catalytic systems for organic transformations in water.

UVSOR—Ultraviolet Synchrotron Radiation

Operational since 1983, it is the brightest in the world among low energy synchrotron light sources. The time is near for an upgrade, but unfortunately I am not familiar enough with the user community’s experimental needs in terms of low energy synchrotron applications.

訳文

2014 年 3 月 分子研訪問レポート

外国人運営顧問 Thomas V. O'Halloran 教授

分子研所長に提出した本レポートは，2014 年 3 月 24 日から 26 日に分子研を訪問した際の私の知見をまとめたものである。今回，外国人運営顧問としての最初の訪問に際し，下記に示すように，研究施設見学ならびに研究グループリーダーとの面談を実施した。各グループリーダーとの面談においては，各人が実施している研究の最新の成果についての説明を受けた。さらに，岡崎統合バイオサイエンスセンターにおいて実施しているオリオンプロジェクト，分子研の協奏分子システム研究センター，生命・錯体分子科学研究領域，UVSOR の活動についても説明を受けた。本レポートでは，私自身が受けた印象と，分子研が分子科学から生命科学の分野で世界をリードする研究所となるこ

とを考えた際に、強みとなる点、および研究所が努力すべき点についてのコメントを述べる。

日本の化学および物理学分野における多くの優秀な若手研究者が、独立した研究者としてのキャリアをスタートするにあたり、分子研が常に彼らの育成に取り組んできたことは、研究所創設 39 年間の歴史からも明らかである。彼らの多くは、旧帝大の教員となっている。また、そのうちの何人かは、理論と実験が融合した研究分野において世界的な指導者にもなっている。分子研が創設 40 年を迎えつつある重要な過渡期（2011 年度～2014 年度にかけて、18 名中 7 名の教授の退職があった）中での研究所運営において、大峯所長は、すばらしい手腕を発揮している。研究分野の多様性は、大いなる可能性を生み出すものである。分子研は、理論科学と実験科学の境界領域において、あらたな挑戦の階段を昇りつつある。私は、エネルギー変換反応の分子機構の解明、無機化学に立脚した生命プロセス研究の開拓、新規な材料開発、および複雑な分子システム中での時間軸からみた情報交換の確立などの研究分野の方向性や進展に大いに感銘を受けた。

分子研の科学的な業績（発表論文の数および影響力、双方の観点から見て）、社会的な影響力、およびその管理運営全般については、深い感銘を受けた。分子研は、触媒反応、太陽エネルギー変換、生物物理学、金属酵素の反応機構、生物時計の分子的性質などの理解や、それらに関連する材料の改良など、多様かつ最先端の研究活動をサポートしている。非常に基本的なプロセスにおける分子科学的基盤を理解するというのが、分子研にとっての基本的なドライビングフォースである一方で、大部分の研究リーダーは、彼らの得た知見を技術的な問題の解決に応用できないかという思いを強くもっており、いくつかの分野においては重要な寄与をなしている。研究分野や研究手法の広さは、研究所の強みであり、分子研における研究活動は、研究領域間でうまく連携が取れている。研究を大いにサポートする研究施設・装置があり、研究手法や研究のゴールを共有する研究グループ間での適度な連携もある。

各研究グループの場合と同様、オリオンプロジェクトのような複数の研究グループをまたぐプロジェクト研究の進展や学問分野への貢献についても感銘を受けた。研究グループのサイズと、非常に高い研究成果を達成するための PI の能力との間には、相関関係は見いだせない。例えば、村橋教授や青野教授のグループは、小さな研究グループの潜在能力や可能性を示している。すなわち、研究成果を挙げるためには特定のグループサイズが必ず必要であるという考え方は、成功を収めるためには必ずしも必須な基準ではないように思われる。小さな研究グループでうまくやって行く場合もあれば、大きな研究グループでうまくやる場合もある。そうは言っても、分子研の中の大部分の研究者が直面している最も大きな問題は、優秀な大学院生が少ないことである。

分子研のより一層の発展という観点から言えば、私が面談した研究者の多くは、もし彼らが、総研大、名古屋大学、あるいは他の連携大学から、さらなる外国人留学生あるいは日本人学生を受け入れることができれば、より大きな成果を挙げることができると思われる。この点は、分子研にとって重要な点であり、これまでうまくいっている若手研究者の外部転出や、これからの若手研究者採用においても大きな意味を持つものであろう。

最後に、分子研は、多くの世界的にみて優秀な物理化学者の育成に中心的な役割を果たしてきた。また、分子研は、安倍晋三首相により最近表明され、また、私の分子研訪問の直後、2014 年 3 月 29 日発行の The Economist 誌でも論評された、「日本の成長戦略において、どのように女性の活力を活かすか」という要請に対して、役割を果たすことができるであろう。分子研の使命および、これまで分子研が、研究者としてのキャリアの初期段階において、優秀な若手研究者の育成を行ってきた実績は、助教および准教授レベルの優秀な女性研究者の採用を促進するための新たなプログラムの出発点となるであろう。

これは日本のみが直面している問題ではない。ヨーロッパの一流研究機関における物理科学科、および多くのアメリカの機関においても、同様な問題に取り組んでいる。多くの女性の博士課程学生は、大学院教育の中で競い合い、

優れた成績を上げている一方で、assistant professor として研究職を得ることができる女性の割合は、それに見合ったものにはなっていない。すなわち、多くの科学的な資産、創造的能力が、有効に利用されていない。それぞれの国においては、最も優秀な人材を採用し、活用することに対して、それぞれ異なる文化的障壁がある。しかしながら、分子研のこれまでの歴史と国際的に広く認知されているという強みは、国をあげてのこの挑戦に対して、大きな影響を与える可能性をもたらすものである。この問題を解決することは簡単な事ではないが、ヨーロッパやアメリカの一流研究機関がこの問題に取り組むために、どのような革新的取り組みを行ってきたかについて、議論できれば幸いである。

個別面談の概要

生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門 正岡重行

正岡重行准教授は、人工的な太陽エネルギーの変換・貯蔵に関して興味をもっており、人工光合成反応のための機能性金属錯体開発に関する研究に取り組んでいる。彼の研究グループは、正岡准教授以外に、助教1名、博士研究員1名、大学院生数名、および何人かの技術支援員から構成されている。電気化学的な水分子の酸化反応、および単核 Ru/pyridine 錯体を用いた酸素の活性化反応に関する彼の研究は、素晴らしい研究であり、機能的なものに思われる。他の研究プロジェクトにおいても、電子供与体と、その特異的電子受容体間での多電子移動反応が進行する多機能・多成分錯体の合成および、それらの性質解明に関して、明らかな進展を見せている。ターゲットとしている酸化還元中心への出入り口となる、不活性な骨格構造中に組み込まれた、反応に適した複数の第一周期、第二周期および第三周期の金属を有する配位性高分子を合成することは、挑戦的な課題である。正岡准教授は、正しい方向性で研究を進めている。

生命・錯体分子科学研究領域 生体分子情報研究部門 古谷祐詞

生体膜中のトランスポーターおよびレセプターの分子機構に関する古谷准教授の研究は、複雑な分子システム中での精密なイオン流の測定において最先端を走るものである。彼が用いている外部刺激に応答した差赤外吸収分光では、有機分子および生体分子の構造および局所環境変化を高感度で測定可能である。本研究グループは、比較的小さなグループであり、2名の助教および1名の大学院生から構成されている。

生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 加藤晃一

(岡崎統合バイオサイエンスセンター オリオンプロジェクト)

加藤教授は、NMR 分光法と生物物理学的、生物化学的、および分子生物学的な実験手法と組み合わせて用いることで、生体高分子および、その複合体の動的構造を解析するため、大きな研究グループを作りあげている。彼の研究グループは、IMS フェロー、2名の博士研究員、8名以上の大学院生および数名の技術支援員から構成されている。彼が有している名古屋市立大学との強固な関係は、研究所のミッションにも大いになうものである。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 村橋哲郎

村橋グループは、助教、IMS フェロー、訪問研究員および数名の大学院生から構成される比較的小さな研究グループである。新規な金属錯体に関する研究に主眼を置いており、無機合成化学および有機金属化学における独創的な研究に取り組んでいる。本研究グループで実施されている多核サンドイッチ錯体に関する研究は、高く評価できる。高

い反応性を有する Pd-Pd 結合を有する錯体の反応機構，酸化還元特性に関して，彼が明らかにした新たな知見は，興味深い特性を持ち，発展性を秘めた一群の新規材料の発見・発展の基礎となるべきものである。新規で安定な，一群の多核サンドイッチ錯体の発見とその性質解明は，広い研究分野を包含するものであり，本当に新しい高分子化合物群にも通じるものとなるであろう。村橋グループは，たとえ大きな研究グループではなくても，小さな研究グループが，どのようにして最先端のブレークスルーを成し得るかを知らするための良い例である。創造的な新発見は，しばしば，少数の個人によってなされる。ただし，村橋教授は，創造性豊かな才能を有しており，もし彼の研究室に，より多くの大学院生がいれば，さらに広い研究分野において業績を挙げることであろう。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 櫻井英博

櫻井グループが注力している，お椀型芳香族化合物（バッキーボウル）および金属ナノクラスターの合成および，それらの性質の解明は，新規な電子材料および触媒開発においてあらたな知見をもたらすものである。これまでに報告されている多くの“ナノ”化学とは異なり，櫻井グループの研究は，しっかりとした合成手法，きちんと解析された材料に基づいて実施されている。多くの博士研究員，大学院生，および訪問研究員から構成されている本研究グループは，分子研の中でも大きな研究グループの一つである。

生命・錯体分子科学研究領域 生体分子機能研究部門 青野重利

細胞内代謝や転写反応を制御する金属含有型ガス分子センサータンパク質に関する青野グループの研究は，ヘム分子中に含まれる鉄イオンの酸化状態が，細胞内情報伝達の鍵であることを明らかにしている。小さな研究グループであるが，金属含有型センサータンパク質中の活性中心の分子機構を解明するため，精緻な各種分光学的測定および構造生物学的手法を適用して研究を行っている。青野グループは，理論および精緻な分子測定に精通しており，彼らの研究は，ある種の熱帯病の分子機構の解明および，ヘム代謝反応の基礎的機構解明などにも関連している。エネルギー変換効率の向上および情報伝達における動的挙動の解明のため，分子研で推進されている無機材料の重要性を考えると，分子研が将来的にどのような研究分野に注力するかを考えた場合，生命科学分野における無機化学という研究分野が，今後発展する研究分野であると思われる。

協奏分子システム研究センター 階層分子システム解析研究部門 秋山修志

秋山教授は，光合成細菌中での 24 時間周期で生物活性を制御している分子機械の立証に焦点をおいた，非常に優れた学際的な研究活動を実施している。これは，世界的に見ても，物理化学と生体分子集合との融合領域で行われている，最も印象深い実験的研究の一つであろう。「時計」遺伝子は，多くの系で単離され，その性質が調べられつつある。これら成果は，微生物および哺乳類の生理機能を理解するうえで必要不可欠なものである。しかしながら，生物時計が実際には，どのようにして機能しているかについての分子機構については，未だ，ほとんど共通理解は得られていない。シアノバクテリアの生物時計に関する秋山教授の研究は，非常にすばらしいものであり，私見では，正道を行くものである。彼の研究は，世界的にも非常によく認知されている。彼の精緻な分子レベルでの研究により，必ずやその分子機構が明らかにされるであろう。

物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 江 東林

江准教授の多孔性，規則性高分子骨格構造の設計，合成，およびそれらの展開に関する研究は，すばらしいもので

ある。IMS フェローおよび多数の大学院生から構成されている研究グループは、望ましいサイズの研究グループである。非常に生産的なグループであり、2次元高分子、共有結合性有機分子骨格、ミクロ孔高分子などの研究分野における一流雑誌に成果を報告している。これらの研究は、数多くの興味深い応用の基礎となるものである。

協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 鈴木敏泰

鈴木准教授は、小さな研究グループで分子薄膜デバイスに使用する有機半導体の開発に注力している。彼の研究は、私の専門分野外であり、研究説明を完全に理解するのは困難であった。有機合成の能力と分光学的な解析の組み合わせには感心した。

生命・錯体分子科学研究領域 錯体触媒研究部門 魚住泰広

今回の訪問では、水中での有機変換反応の不均一系触媒システムに関して研究を進めている魚住教授とは、面談できなかった。

極端紫外光研究施設 (UVSOR)

1983年に運用を開始して以来、低エネルギー放射光光源の中では、世界でもっとも高光度なものである。高度化の時期が近づいているが、残念ながら、私は低エネルギー放射光光源のユーザーコミュニティの要望については不案内である。

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 on October 27–29, 2014 Visit to the Institute for Molecular Science, Okazaki and the Okazaki Institute for Integrative Bioscience

The Institute for Molecular Science (IMS) is clearly undergoing a period of significant change as a number of retirements have led to the hiring of a group of energetic and creative younger faculty, whose research covers a wide range of topics. I was particularly pleased to see the new program on strongly correlated materials at UVSOR described by Professor Tanaka. Assistant Professor Kurashige described his work as combining renormalization group with quantum chemistry. This work appears well connected with actual problems such as water splitting, and not complexity for its own sake.

Professor Saito described a range of topics. His work has achieved full maturity and is extremely impressive. Professor Saito's ability to bring in and integrate effectively concepts and techniques from fields somewhat removed from the dynamics of liquids and biomolecules is very impressive. His approach to connecting fast and slow motions is very exciting and has great potential for new insights.

Professor Ishizaki described the important progress he has made in understanding the role of intramolecular vibrations in both electronic energy transfer and in two-dimensional spectroscopic studies of energy transfer systems. This is a very difficult and complex topic and Ishizaki is operating at a world-leading level.

Since the 2013 visit ideas on the creation of a new center whose focus is on measurement and analysis in mesoscopic systems has emerged. The plan for a new research center that focuses on precision multiscale measurement and analysis is coming together well. I believe that there is still work to do in defining the special contributions of this new center, but prospects look good that Professor Okamoto will be able to clearly define an exciting new program in the near future.

Continuing with new centers at IMS, Professor Akiyama gave an update on progress as CIMoS. The new space is carefully thought out to encourage interaction. I applaud Professor Akiyama's efforts to make CIMoS more than the sum of its parts and the new center seems to be off to a very good start. Professor Kaga described his interesting work in CIMoS on designed protein structures from scratch. His success in using coarse-grained models to design structural motifs opens up the possibility of designing for function. This is an exciting prospect.

At the Okazaki Institute for Integrated Bioscience (OIIB) Professor Kato described project ORION with three major components: Biosensing, Biodesign and Bioorganization. This is a multi institution initiative involving universities and the three national institutes at Okazaki. Later I will comment on some ways that interaction can be improved between the three Okazaki Institutes. Professor Kato leads a large group with energy and a clear vision, and project ORION seems well set to have a substantial international input.

I met with three new faculty: Professor Iino, who described impressive work on molecular machines based on single molecule spectroscopy. This is a forefront field worldwide and Professor Iino's goal to create new molecular machines is very exciting. Professor Kurihara described his approach to exploring the boundary between living and non-living matter. I found the program to be thoughtful and ambitious, but have some concern that the work will be limited by manpower and will have difficulty competing with larger groups in Japan and worldwide (for example, Sam Strupp at Northwestern).

Finally, Professor Momiyama described her synthetic chemistry program. She is a very articulate and enthusiastic scientist and

should add considerably to the interactive atmosphere at IMS.

Interactions between the Okazaki Institute

Here I describe a few techniques that I have experience with in developing interactions across separate institutions or very different fields.

1. Lightning Talks. 3 – 5 minute duration talks to a combined audience. These are so short speakers are forced to focus on the key points. They need to be practiced and a rigorous timekeeper is required.
2. Seed funding from multiple institutions available only if lead investigators come from all three Institutes or two of the three. Reporting of progress on seed funds to mixed groups from the different institutes.
3. Lunchtime talks with lunch provided. Two talks per lunch with speakers from the most disparate fields possible.
4. Postdocs who are “Directors’ Fellows” and who are not attached to any specific group. Their role is to help facilitate joint projects between groups from different areas. They act as the glue and the translators between the different areas. They have a modest research fund of their own and higher prestige than typical postdocs.

訳文

分子科学研究所ならびに岡崎統合バイオサイエンスセンター訪問リポート

2014 年 10 月 27 日 ~ 29 日

多数の教員の定年退職に伴い、幅広い研究分野をカバーする、精力的かつ創造的な若手研究者を後任として採用することとなり、分子研が重要な変革期を迎えていることは明らかである。田中教授から説明のあった UVSOR における強相関材料に関する新しい研究プログラムは、非常にすばらしいものであった。倉重助教は、空間くりこみ群と量子化学の融合として、彼自身の研究を説明した。彼の研究は、水の分解反応という実際の問題とも深く関係している。ただしこの水分解反応のもつ本質的な複雑性の解明にはまだ至っていない。

齋藤教授は、様々なトピックスについて説明した。彼の研究は、円熟期を迎えており、大変印象的なものである。液体のダイナミクスや生体分子を扱う研究分野から、効果的にそれらのコンセプトやテクニックを取り入れ、統合する齋藤教授の能力には、非常に感銘を受けた。(分光スペクトルなどの)観測結果と、スローダイナミクスを継なごうとする彼の研究アプローチは、非常に刺激的なものであり、新たな展開への大きな発展性を秘めている。

石崎准教授は、電子エネルギー移動反応、およびエネルギー移動系の二次元分光研究における分子内振動の役割解明において、彼が達成した重要な進展について説明した。この研究は、大変に難しく、複雑な研究である。石崎准教授は、世界最先端のレベルで研究を実施している。

2013 年の訪問以来、メゾスコピック系の計測と解析に重点を置いた、新しいセンターを立ち上げる計画案が練られている。精密なマルチスケール計測・解析に焦点をあてた新しい研究センター案についても、同時に考えられている。この新しい研究センターの具体的研究内容についてまだ議論すべきことは多々あるが、岡本教授により、近い将来、魅力的な新プログラムが明確に示されていくであろう。

分子研の新センターにも関与しつつ、秋山教授は CIMoS の最新の進展について説明した。新しい居室スペースは、お互いの連携を促進するよう、考慮された設計となっている。私は、CIMoS を、単に個々の集まり以上のものにしようとする秋山教授の努力を称えるものである。新センターは、非常によいスタートをきっているように思われる。古

賀准教授は、ゼロからタンパク質の構造をデザインするという、CIMoSにおいて実施している彼自身の興味深い研究について説明した。粗視化モデルを利用して、構造モチーフの設計に成功していることは、タンパク質の機能デザインの可能性を切り開くものである。本研究の展望は、非常にエキサイティングなものである。

岡崎統合バイオサイエンスセンターの加藤教授は、センターの3研究領域（バイオセンシング研究領域、生命動秩序形成研究領域、生命時空間設計研究領域）の説明とともに、オリオンプロジェクトについて説明した。本プロジェクトは、大学および岡崎3機関と連携して実施されているプロジェクトである。岡崎3機関内での連携強化の方策については、後述したい。加藤教授は、精力的かつ明確なビジョンを持って、大きな研究グループを率いる。また、オリオンプロジェクトは、実のある国際連携を挙げ得るよう、よくセットアップされているように思われる。

今回、3名の新任教員と面談した。飯野教授からは、一分子分光を用いた分子機械に関する研究についての印象深い説明を受けた。この分野は、世界的にも最先端の研究分野であり、飯野教授が掲げる、新しい分子機械を創成するという研究目標は、非常にエキサイティングなものである。栗原准教授からは、生物と非生物の境界の探索に関する、彼の研究アプローチに関して説明を受けた。彼の研究テーマはよく考えられたものであり、また挑戦的なものでもある。ただ、彼の研究が、マンパワーの面で制限をうけてしまい、国内外の大人数の研究グループ（例えば、ノースウェスタン大学のSam Strupp教授）との競争において、苦勞するのではないかと危惧がある。

最後に、榎山准教授からは、彼女が行っている合成化学に関する研究についての説明を受けた。彼女は、大変理路整然とした、熱意に満ちた科学者であり、分子研にインタラクティブな雰囲気をもたらすであろう。

岡崎の研究所間での相互連携

ここで、異なる研究所あるいは非常に異なる研究分野間での相互連携の進展を図る際に、私が経験したいいくつかのやり方について述べる。

1. 異なる研究所あるいは異なる研究分野から集まった聴衆を対象とした、3～5分間の短い発表（ライトニングトーク）。発表時間が大変短いので、演者は重要な点に集中せざるを得ない。演者には、訓練が必要であるとともに、厳格な時間係も必要である。
2. 岡崎3研究所すべて、あるいは3研究所のうちの2研究所からの研究者が研究主務者となっているものに対し、複数の研究所から研究立ち上げのための予算を措置することを可能とする。異なる研究所に所属する研究者から構成された研究グループに措置された、研究立ち上げ用予算による成果についての報告を実施する。
3. 昼食付きのランチタイムトーク。可能な選択肢の中で、最も異なった分野から2名の演者を選び、その2名が、話題提供する。
4. 特定の研究グループには所属しない、「所長直属」のポストクの創設。その役割は、異なる研究分野の研究グループ間での共同研究推進を促進することにある。彼らは、異なる分野間の接着剤および媒介として機能する。適度な研究資金を配分するとともに、通常のポストクより高い格付けとする。

7-3 国際諮問委員による点検評価

7-3-1 R. Stephen Berry 国際諮問委員

原文

Review: Institute for Molecular Science

November, 2014

Overall, this reviewer came away with a very positive impression of the current and ongoing research efforts of the Institute for Molecular Science, Okazaki. The individual research groups are strong and, so far as this reviewer could tell, have positive, constructive interactions. They also have very productive collaborations with scientists in other institutions in many countries. There is a healthy mixture of very experienced, senior scientists and young researchers, with ventures into new, challenging areas. Here, we present comments on each research group, as presented by its leader, and a few summary comments at the end.

Director General of the Institute for Molecular Science

Iwao Ohmine

Okazaki Institute for Integrative Bioscience

Presenter: Professor Ryota Iino:

Determining the mechanism of molecular motor motion is a long-standing problem; this group is making very important contributions to solving this problem. They may be very close to achieving such a solution for the mechanism of kinesin motion. Their new single-molecule methods are improving space- and time-resolution in protein studies. Of course there is always the question of whether the probe, in this case a gold nanorod, induces a mechanism different from that in the absence of the probe, but that is a second-level question. Creating new molecular machines is a high-potential direction of “synthetic biology.” Likewise the creation and application of proteins with “non-natural” amino acids is a real frontier area.

Research Center of Integrative Molecular Systems

Presenters: Professor and Director Shuji Akiyama:

A very elegant and impressive elucidation of the molecular basis of circadian rhythms in cyanobacteria, clearly a key step in understanding this universal phenomenon in animal organisms; a powerful combination of experimental tools and interpretations.

Associate Professor Nobuyasu Koga:

A very inventive and daring project, designing “artificial” proteins, predicting their properties and checking the extent of validity of the predictions. The approach gives new insights into the relations between structure and behavior of “real” proteins as well. Quite an unusual effort.

Professor and Director of the Instrument Center Hiroshi Yamamoto:

Ingenuous device development, based on optically-induced state changes in organic semiconductor; is it possible to produce this

behavior at conditions more accessible than 2 K? The achievement of his group is already at the frontier, with their organic FET. Might it be possible to fabricate these or their next generation in some very efficient way, to mass-produce them?

Photo-Molecular Science

Presenters: Professor and Director of the Laser Research Center Hiromi Okamoto:

The importance of high-resolution imaging was clearly emphasized by the 2014 Nobel Prize for Chemistry. Hence the work of this group is obviously very timely. This group's approach, enabling them to probe electronic structures of nanoparticles, seems unique to this observer. Could this group's studies of gold nanoparticles be coordinated with the research of the group of Professor Iino? I was intrigued by the study of chiral nanoparticles, and the possibility of strong circular dichroism at the nanoscale.

Professor Masahiro Hiramoto:

Very sophisticated and ingenious approach to developing organic photocells. This is an area of global interest. The various approaches used by this group represent significant progress. Whether the need, for example, of very high purity C₆₀ fullerene will be a severe constraint on wide application is a question for the future, but one that comes to mind. Since development of efficient photocells is such an obvious societal need, one can't help looking at research of this kind with the long-term question in mind of the potential large-scale applicability of the findings of the research. But the research must be done, and this group is making very significant, original advances. For example, the codeposition approach seems quite an innovation.

Associate Professor Takunori Taira:

In a sense, a counterpart for photonics of the work of Professor Hiramoto, the research of this group involves theory and experiment to create micron-sized optical source devices of remarkably high power and high efficiency. The group also demonstrates the utility of these devices by carrying out precision measurements with them. They also are developing methods for controlling structures of the devices they are studying. A dramatic application of their work is the laser-ignited internal combustion engine. The breadth of collaborations of this group is very impressive.

Professor and Department Chair Kenji Ohmori:

Perhaps the most fundamental science presented to me, a very impressive advance in our understanding of many-body interactions at the atomic level under quantum conditions, showing the need to go deeper than mean-field approaches to understand and explain interatomic interactions.

Deputy Director General, Professor and Director of UVSOR Nobuhiro Kosugi:

Huge list of collaborators, natural for working with a high-energy synchrotron; the study of the behavior of core electrons of atoms in different environments provides a new kind of tool to understand the kinds of fundamental interparticle interactions that occur in those environments. Combining theory and experiment is a very sound and healthy way to do science, and the work of this group is well-adapted for such an approach. The extensive study of water-methanol interaction is, I believe, unique in approaching it through the behavior of inner-shell electrons. The observation of catalysis in process is impressive. I hope the study of interactions in 2-dimensional systems can be helpful in creation of new devices.

Theoretical and Computational Molecular Science

Presenters: Associate Professor Takeshi Yanai, Professor:

Strikingly wide range of research, from basic quantum mechanics of many-electron systems including correlation effects, to biological processes, notably photosystems, and possible new mechanisms for artificial water-splitting. I like the recognition that the in-vivo structure of photosystem II could differ from that determined by x-ray methods for the crystal. It's a very ambitious program, with strong indications that it will succeed in several areas. The collaboration with people at other institutions is very healthy.

Department Chair & Director, Research Center for Computational Science Shinji Saito:

Very much a forefront problem, the behavior of supercooled liquids, especially the onset of heterogeneous distributions and their effect on dynamics; reinforces how strange water is. The study reveals the difference between traditional freezing to a regular ice structure and the anomalous behavior involved with glassy ice formation. Multiple time scale analysis of protein dynamics is a powerful way to determine the molecular level of behavior. The concept of Dynamic Component Analysis is a powerful analogue and extension of Principal Coordinate Analysis. The parametrization of Density Functional Theory will be quite useful; I wish this group could consider trying to do a basic derivation of DFT that would give a rigorous means to evaluate exchange and correlation effects, to turn DFT from an empirical tool into a truly basic computational tool.

Overall Summary and Comments

The scope and strength of the IMS are quite impressive. The range of topics under study and the means used to study them are as broad as at any of the very best institutions doing molecular science today. From very basic physical processes, through complex biological systems to potential applications as tools, the IMS is contributing to science globally. The internal strength and breadth currently will keep the momentum of the institution for at least the near term. The resilience of the IMS is apparent in the way it has maintained its strength with new appointments, when several of its senior faculty retired.

I wonder whether a way might be found to enable retired faculty members who wished to continue research to do that. I am quite aware that that would be contrary to the traditional Japanese system, but in reality, many scientists wish to remain active in research after their formal retirement and many of those continue to make major contributions.

I wish to thank the IMS and its faculty and staff for the opportunity to visit and make these comments.

R. Stephen Berry

訳文

分子科学研究所 レビュー

2014 年 11 月

全体的にみて分子科学研究所において実施されている研究活動について非常にポジティブな印象を受けた。各研究グループは強力であり、私が見るかぎり、グループ間に実際的かつ建設的な関係が築かれている。また、海外の研究機関に所属する多くの研究者とも、豊富な共同研究を実施している。経験を積んだシニア研究者と、若手研究者が丁

度良い割合で混ざり合っており、新奇な挑戦的な課題に思い切って取り組んでいる。本レビューでは、PI による説明に基づく各研究グループの活動状況に対してのコメントを述べると共に、末尾に、全体的なコメントを付記する。

岡崎統合バイオサイエンスセンター

発表者：飯野亮太 教授

分子モーターの運動メカニズムの解明は長年の課題であり、本グループは、この課題の解明に向け非常に重要な貢献をしている。本グループは、キネシンの運動メカニズムの解明にとっても近づいているようである。本グループの新規 1 分子計測法は、タンパク質を対象とした研究において、空間分解能および時間分解能を改善するものである。観察プローブ（この場合は、金ナノロッド）の付加によりメカニズムは変化しないのか、という疑問はもちろんあるが、これは副次的な疑問である。新しい分子機械の創成は、「合成生物学」における、大いなる発展性を有した研究の方向性に合致したものである。同様に「非天然」アミノ酸をもつタンパク質の創成と応用は、真に未開拓の領域である。

協奏分子システム研究センター

発表者：センター長 秋山修志 教授

シアノバクテリアにおける概日リズムの分子基盤を、最先端の研究手段を用いて見事に解明している。この知見は、その他の生物種にも存在する、この普遍的な生物現象の理解を深める重要な鍵となると期待される。

古賀信康 准教授

計算機上で「人工」タンパク質分子を設計し、それらの物性を予測し、その予測の妥当性がどの程度であるかを検証するという、非常に独創的で斬新な研究を行っている。また、このようなアプローチは、「現実存在する」タンパク質分子の立体構造と挙動との関係性についても、新たな知見をもたらすものである。非常に素晴らしい取り組みである。

装置開発室長 山本浩史 教授

有機半導体における光誘起相転移を用いた非常に独創的なデバイスの開発を行っている。このようなデバイス動作を、2 K より高い温度で実現することは可能であろうか？ 彼のグループが有機トランジスタで達成した成果は、既に最先端のものである。大量生産に向けて、これらのデバイス、あるいは次世代のデバイスを、より効率的な手法により製造することは可能であろうか？

光分子科学

発表者：分子制御レーザー開発研究センター長 岡本裕巳 教授

高分解能イメージングの重要性は、2014 年のノーベル化学賞からも明らかである。従って、本研究グループの仕事は言うまでもなく時宜を得たものである。本グループの、ナノ微粒子の電子構造探査を可能とする研究方法は、彼らの独自のものと思われる。本グループの金ナノ微粒子に関する研究は、飯野教授のグループの研究に連携できるのではないだろうか？ キラルなナノ微粒子の研究、及びナノスケールでの強い円偏光二色性の可能性については、興味をそそられた。

平本昌宏 教授

非常に洗練された独創的なアプローチによる有機太陽電池セル開発である。この分野は、世界的に関心が高い研究分野である。本グループにより実施されている様々なアプローチにより、顕著な研究の進展が見られる。例えば、広範な応用において、超高純度 C_{60} フラーレンが必要不可欠になってくるかどうかは、将来的な問題であろうが、すべての研究者が注目しておくべきことである。高効率太陽電池の開発が、社会的に求められていることは明らかである。したがって、この種の研究は、研究の成果が広範な応用可能性を有しているのかという問いかけと共に、見られざるを得ない。しかし、この種の研究は、必要不可欠である。本グループは、非常に重要で、独創的な成果を挙げている。例えば、共蒸着によるアプローチは、非常に革新的であると思われる。

平等拓範 准教授

ある意味、フォトニクス分野における、平本教授の研究に対応する研究といえる。本グループは、驚異的高出力、さらには高効率のミクロンサイズ光素子を創り出すため、理論と実験の両面から研究に取り組んでいる。また、これらの素子を用いた高精度な測定を行うことにより、開発した素子の有効性を実証している。彼らが研究している素子の、構造制御法の開発も行っている。内燃機関のレーザー点火は、彼らの研究の顕著な応用例の一つである。本グループにおける広範な共同研究は、大変に印象的であった。

研究主幹 大森賢治 教授

今回の発表の中で、おそらく最も根源的なサイエンスである。量子力学的な条件下にある原子レベルでの多体相互作用の理解において、非常に感銘を与える成果である。原子間相互作用を理解し説明するためには、平均場近似を超えたより深い考え方が必要であることを示した。

研究総主幹・UVSOR 施設長 小杉信博 教授

シンクロトロン放射を用い、非常に多くの共同研究者と共同研究が行われている。様々な環境に置かれた原子の内殻電子の挙動に関する研究は、このような環境によって引き起こされる粒子間の相互作用を理解するための新しい方法を提供するものである。科学研究の方法として、理論と実験を組み合わせることは非常に大切であり、本グループの研究はそのような研究アプローチにまさに適合している。内殻電子の挙動から調べた水とメタノールの相互作用の詳細な研究は、独創的なものであると確信している。触媒反応のその場観測に関する研究は、すばらしいものである。2次元分子系における相互作用に関する研究は、新しい分子デバイスを作る際に役立つことが期待できる。

理論・計算分子科学

発表者：柳井 毅 准教授

多電子系の電子相関に関する基礎的な量子力学研究から、光合成などの生物過程、および人工水分解反応の反応機構に関する研究まで、幅広い研究を行っている。光合成系 II において、X線結晶解析で決定された分子構造と in vivo での構造が異なる可能性があるという彼らの研究は、興味深い。非常に意欲的な研究であり、他の研究分野でも成果をあげることが強く示唆される。外部研究機関の研究者との共同研究も、非常にうまくいっている。

研究主幹・計算科学研究センター長 斉藤真司 教授

非常に最先端の問題である過冷却液体の挙動，とくに，不均一分布の発現および，それらの動力学への影響について研究するとともに，水がどのように異常であるかを明確にしている。これらの研究により，従来の，規則正しい氷構造への凍結と，ガラス性氷形成の関わる特異的振る舞いの差異を明らかにしている。タンパク質ダイナミクスの多時間解析は，タンパク質の微視的挙動の解明に強力な方法である。主成分分析に類似し，その拡張として導入された動的成分解析は，強力な解析手法である。密度汎関数理論のパラメータ化は非常に有用と思われる。DFT を，経験的手法から真に計算科学的な手法へと転換するために，交換および相関効果を見積もる確固たる方法を与え得る DFT の基本的な導出を試みることを，本グループで考えてみてはどうだろうか。

全体的なまとめとコメント

分子研の先見性とその研究力に大きな感銘を受けた。研究領域範囲や，研究手法は，分子科学研究を先導している他の世界のトップレベル研究所と同様，非常に幅広いものである。最も基礎的な物理プロセスから複雑な生物システム，また応用的な手法に至るまで，分子研は，世界的な貢献をしている。高い研究力と見識の広さにより，この研究所のもつ活力はここ当分確保されていくだろう。何名かのシニア研究者が退職したが，新たに採用した後任により分子研の持つ力が維持されたことは明らかである。

退職した教員が研究を継続したいと希望した場合に，それを可能とすることができないものかと思う。もちろん，それが日本の伝統的なシステムに反していることは承知している。しかしながら，現実的には，多くの研究者は，退職後においても研究を継続したいと希望しており，十分な成果を上げ続ける者も多い。

研究所を訪問し，コメントを述べる機会を与えていただいたことに対して，分子研および，その教職員の皆様に感謝申し上げたい。

R. Stephen Berry