

## 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.

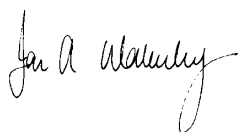
International competition is primarily in Japan and Europe, with some work on the linear motors in the USA. The unique ability to attach Au nanoparticle probes, which, when combined with a novel dark-field imaging methods, leads to high spectral and temporal resolution provides a competitive advantage 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な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、学際的な研究を設定し、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 40<sup>th</sup> 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。