

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 C₆₀ 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