

## 7-4 国際諮問委員による点検評価

### 7-4-1 David Wales 国際諮問委員

原文

#### External Assessment of Theory Groups in the Institute for Molecular Science, Okazaki

David J. Wales, November 2015

This report for the Director General is based on three visits to IMS in November 2013, March/April 2014, and November 2015. A detailed diary of meetings and notes appears in the two earlier reports.

Overall, the standard of research in the theory groups at IMS remains very strong, and is clearly internationally competitive, leading the field in several areas. The key principle upon which the academic structure of IMS is based, namely that internal promotion is not available, has been maintained. In my opinion, this principle probably contributes to the strength of the Institute, and moreover, leads to a healthy population of key academic positions in leading Japanese universities from IMS. This flux should help to constantly refresh the state of theoretical molecular science in Japan and prevent stagnation. I recommend that the Institute should continue this policy, so long as it is clearly understood whenever a new appointment is made.

It is very pleasing to note that significant progress has been made in addressing some of my previous recommendations. In particular, the issue of gender balance has received serious attention. The appointment of several female Assistant Professors represents an important achievement, which will pave the way for further progress in the future. I believe it is especially important for IMS to set an example here, since research faculty at IMS are leading candidates for Full Professorships at leading Japanese universities in the future. Providing the best female researchers with the support they need, and nurturing them, at IMS, will surely strengthen Japanese science. The Assistant Professors who have been recruited will largely be embedded within existing groups. In the future, it is important to extend this diversity to Associate and Full Professor positions.

The Full Professors whom I met during my visits were all clearly conducting research at an internationally competitive level. *Prof. Shinji Saito* is working on projects united by the theme of spatio-temporal heterogeneous dynamics. He has made cutting-edge contributions to understanding the dynamics of liquid water, nonlinear spectroscopy, especially 2D infrared measurements, energy transfer, and recently, dynamical heterogeneity in supercooled liquids.

*Prof. Katsuyuki Nobusada* is studying photoinduced quantum dynamics in nanostructures. He writes his own codes to solve coupled Maxwell and Schrödinger equations in an iterated fashion, using a grid representation to avoid basis set dependence. The objective is to analyse photoinduced electron dynamics in nanoparticles, quantum dots, and adsorbate-surface systems.

*Prof. Takeshi Yanai* is working on strongly correlated systems, with applications to conjugated  $\pi$  centres and analysis of  $\pi$  to  $\pi^*$  transitions, including molecules such as  $\beta$  carotene, as well as photosynthetic units. These results are compared with experiments from some of the leading groups in the field.

*Prof. Masahiro Ehara* is working on a wide variety of interesting projects. He exploits detailed treatments of electronic structure to calculate properties for comparison with experiment, and has achieved a number of impressive applications in spectroscopy, materials science, and catalysis.

*Prof. Hisashi Okumura* is concerned with thermodynamic sampling schemes for biomolecular applications. His group have developed a permutational replica exchange approach, which utilises Suwa-Todo sampling to provide feasible acceptance ratios. It would be interesting to see some benchmark calculations that compare the efficiency with alternative procedures.

Associate Professors *Yutaka Shikano* and *Akihito Ishizaki* both made enthusiastic presentations of their research, which involves interesting and ambitious projects that aim to address fundamental and practical issues in terms of molecular structure and measurement (Shikano) and light harvesting and coherence (Ishizaki).

*Prof. Shuji Akiyama* is a experimentalist interested in the slow dynamics of proteins such as KaiC, which forms part of the circadian clock in cyanobacteria. There are many important open questions in this field, and the approximate 24 hour periodicity involved has proved difficult for theory and simulation to treat. Nevertheless, significant progress has been made experimentally, using X-ray crystallography, solution scattering, and various other physicochemical methods.

#### **Recommendations:**

- (1) Ensure that a mentoring scheme exists to support junior appointments. Ideally, every Assistant Professor should have someone to turn to for informal advice. This should probably be a Full Professor in a different field, someone distinct from colleagues who work in related areas, who can provide a different perspective. To make such arrangements as informal as possible, it helps to advertise a pool of Mentors, so that junior faculty can choose who to approach themselves. Undertaking a mentoring role can be encouraged by recognising that some time commitment is involved, and counting this contribution on a comparable scale to committee work.
- (2) I think there is still a need to improve the social infrastructure somehow. The best solution would be a Faculty Club, perhaps with a coffee shop to attract people to mix informally.

I was assured that a strong plan for appointment of the next Director General in place. If the leadership and vision of the current Director can be maintained then the Institute should continue to progress, and maintain its position as the flagship for research in molecular science in Japan.

---

訳文

#### 理論グループの外部評価

David J. Wales (University of Cambridge) 2015 年 11 月

これは、2013 年 11 月、2014 年 3、4 月および 2015 年 11 月の 3 度の分子研訪問に基づく報告である。

全体として分子研の理論グループの研究レベルは非常に高く、いくつもの研究領域で分野をリードしており国際的にも高い競争力をもっている。内部昇進禁止という分子研のアカデミック構造の基本原則も守られている。この原理が分子研の強さの一因であり、さらに、主要な大学の重要なポジションの堅実な母集団となっていると思われる。この人の流れが日本における理論分子科学の状態を常にリフレッシュすることに役立ち、停滞を防いでいる。新しい雇用の際に内部昇進禁止が十分に理解されている限り、分子研がこのポリシーを継続することを勧める。

以前の私の提言のいくつかの取り組みが進んでいることをとてもうれしく思う。とくに、男女数の均等はとても重

要な問題である。何名かの女性助教を採用したことは、将来のさらなる進展の道を開くこととなる大きな成果である。分子研の教員は日本の主要な大学の教授の主たる候補者であるため、分子研が女性教員雇用に関するこのような規範を示すことは分子研にとって極めて重要であろう。分子研で非常に優秀な女性研究者に対し必要なサポートを行い育成することにより、日本の化学は必ず強化していくことであろう。これまでに採用された助教は既存のグループに配属されているだろうが、将来は、女性採用が准教授および教授へと広がっていくことも大切と思う。

滞在中に面談した教授は、全員明らかに国際競争力の高い研究を進めている。

斉藤教授は、時空間不均一動力学として纏められる研究を行っている。水のダイナミクス、非線形分光とくに二次元赤外分光法、エネルギー移動、そして最近では、過冷却液体の動的不均一性の理解に関する最先端の研究を行っている。

信定准教授は、ナノ構造体の光誘起量子ダイナミクスの研究を行っている。基底関数依存性を避けるため grid 表示を用いて、Maxwell 方程式と Schrödinger 方程式のカップルした方程式を解く独自のプログラムを開発している。ナノ粒子、量子ドット、吸着子 - 表面系の光誘起電子ダイナミクスの解析を目標としている。

柳井准教授は、光合成系とともに、 $\beta$  カロテンのような分子の  $\pi$  共役系や  $\pi$ - $\pi^*$  遷移の解析を通して、強相関系について調べている。それらの結果を、その分野の有力な実験グループの結果と比較している。

江原教授は、興味深い様々なプロジェクトに取り組んでいる。電子状態の詳細な取り扱いによる物性の計算を行い、実験と比較している。また、分光、物質科学、触媒におけるいくつかのすぐれた応用研究に成功している。

奥村准教授は、生体分子に応用するためのサンプリング法の研究に携わっている。彼のグループでは、諏訪 - 藤堂によるサンプリングを用いた置換レプリカ交換法を開発している。他の方法と効率を比較したベンチマーク計算を示すと面白いと思う。

鹿野准教授と石崎准教授は分子構造と計測（鹿野）と光捕集系とコヒーレンス（石崎）に関する基礎的かつ実際上重要な問題の解決を目指した興味深い野心的な研究について説明した。

秋山教授は、シアノバクテリアの概日時計を構成する KaiC のタンパク質の遅いダイナミクスに関する実験研究を行っている。この分野では、多くの重要な未解決問題があり、約 24 時間の周期を理論および計算的に取り扱うのは困難である。しかし、X 線結晶構造解析、溶液散乱やそのほかの物理化学的方法を用い実験的に非常に大きく進展させた。

## 提言

- (1) 若手研究者をサポートするためのメンターの配置。理想的に、各助教に日常的にアドバイスをする人を付ける。これには、助教とは異なる見方のできるように、助教とは異なる分野の教授が良いであろう。各助教が適当な人と話をできるようにするために、メンター集団を大きくするのが良い。メンターには責任あり、委員会の仕事に匹敵することであることでメンターを引き受けてくれるように促すことができると思う。
- (2) 何らかの形で所内の基盤整備が必要と思う。気軽に皆が交流できるコーヒーショップのあるファカルティクラブが最善の解決策であろう。

次期所長任命の計画が整っていることを確信している。現所長のもっていた指導力と展望が維持されれば、分子研は進歩し続け、日本における分子科学研究の最重要研究機関の地位を維持していくことであろう。

