

## 7. 点検評価と課題

2016年度は、法人化3期目の初年度に当たり、新たに4名の運営顧問に就任いただき今期中の研究所運営に対するアドバイスをいただく体制を整えた。運営顧問をお勤めいただく、菊池昇豊田中央研究所長、晝馬明浜松ホトニクス社長、瀧川仁東京大学物性研究所長、松本吉泰京都大学大学院理学研究科教授の4名には、12月7日に開催した運営顧問会議の際に来所いただき、研究所の全体像を紹介した。

また、個々の研究領域の研究成果及び領域の研究方針に関して、運営会議の所外委員を務める関連研究者からのアドバイスを受ける目的で、2月9日に開催した運営会議の後に4領域の現状を紹介した。評価内容については、次期の分子研リポートに掲載する予定である。

2016年3月には、Ron Naaman教授により物質分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され、グループの研究内容の評価をいただいた。2016年及び2017年3月には、ライス大学のPeter J. Rossky教授により、理論・計算分子科学研究領域を中心にヒアリングが実施され、2年にわたる当該グループの研究内容の評価をいただいた。

また、ドイツ・ユーリッヒ研究センターの管滋正客員教授によって、UVSOR施設における光電子分光分野を中心とした施設整備状況及び研究内容について評価をいただいた。

これら、所外研究者からの評価は、個々の研究者の今後の研究方針を決める上で貴重なアドバイスであると同時に、研究所全体の運営に対する貴重な提言も含まれており、今後の研究所運営に反映させていただき所存である。

(川合真紀)

## 7-1 外国人運営顧問による点検評価

### 7-1-1 Ron Naaman 外国人運営顧問

原文

#### Report

#### March 2016

During my visit at IMS I met with the six department members and with the president. Beyond discussing the scientific work, I also attempted to understand if they foresee any important obstacles in their scientific work that can be solved by the Institute's management. Hence the following report will have three parts. In the first I will summarize my conclusions/suggestions regarding the Institute's policy. I focus on issues that in my opinion can be solved relatively easily. In the second part I relate to the department as a whole and in the last part I review the individual research groups.

#### General IMS:

1. Lack of students and postdoc—This problem was raised by all scientists with whom I met and the numbers as presented are indeed grim. There is some rationale to keep the research group small, so as to encourage collaboration with other research groups in Japan. However, too-small groups result in wasted resources (expensive equipment not used to its full capacity) and lack of research requiring investment of much human-time, like synthetic work. It seems reasonable to expect to have 2–3 graduate students per research group.

I suggest approaching the international community by offering special fellowships to exceptional students/postdoc. It should be possible to attract students not only from China and India but also from Europe and the US by advertising the excellent equipment available and the outstanding research performed at IMS.

2. Access for the international community—It should be possible to hire a few excellent young scientists from abroad as associate- and full professors. This type of hiring will significantly increase the exposure of IMS to the international community and will help to expose it also to foreign students and postdocs.

3. Promoting the scientists—The scientists in IMS are under-appreciated by the international community. They publish papers in excellent journals but do not get enough recognition in the sharing of prizes, awards *etc.* I suggest establishing an internal committee at the IMS that will collect information about possible prizes/awards and submit candidates from IMS for those awards.

#### The Department of Materials Molecular Science

Two facts are immediately apparent when attempting to evaluate the department.

i. The department can be divided into two groups. The first includes Profs. Toshihiko Yokoyama, Hiroshi Yamamoto, Masahiro Hiramoto, and Assoc. Prof. Genki Kobayashi. This group performs research of the highest level and indeed publishes in the best Journals. Before discussing each individual in this group, it is important to emphasize that the research performed by all members of this group is highly original and can be counted as the type of research performed by the best people in the field. I was impressed that these people are not affected by coming and going approaches, but rather find their own original way of research. The second group includes Assoc. Profs. Toshikazu Nakamura and Katsuyuki Nishimura. Both perform research that is concentrated around the use of top-of-the-line equipment ESR and NMR respectively. In a sense they serve the mission of the IMS in providing access to top equipment to groups from outside the IMS. Indeed they tend to collaborate with many groups; more details will be provided below when I discuss each researcher individually.

- ii. The department is too small and several important fields in Material research are missing. Among them, one can mention biomimic materials, oxides research (a subject of importance both in basic and applied research), material synthesis. Of course the department does not have to include all the topics, but it is important to have variation. Most of the work in the department emphasizes physical methods and besides the work of Assoc. Prof. Genki Kobayashi, no work on material synthesis is performed. It is true that some of the missing subjects can be adapted by collaboration with other laboratories, but it is important to have 2–3 people that know the material synthesis community and can help in matching research groups from outside the IMS with the groups at the department.

In view of the central role Material science is playing in modern science, the department must be strengthened significantly and its size should be doubled. It is indeed important to keep the high standard of hiring, but it is also important to widen the research topics. If possible, it will be good to hire people that spend time in leading labs outside Japan, or even foreigners, so that the ties between the department and the International community will be tightened. In addition, one should consider hiring a theoretician working on electronic and magnetic properties of materials. Such a theoretician could collaborate with the experimental groups.

### **Review of the individual research groups**

#### *Prof. Toshihiko Yokoyama*

The group of Prof. Yokoyama develops novel spectroscopic methods and especially methods aimed for studying magnetic materials and magnetic films. The research performed by the group is novel and of the highest level. They developed the novel concept of magnetic nanoscope using ultraviolet magnetic circular dichroism photoelectron emission microscopy, which allows to perform real-time and ultrafast magnetic imaging. In the spirit of IMS, they constructed x-ray magnetic circular dichroism (XMCD) system which is used by many researchers, both from Japan and from abroad. The research performed on monolayers of phthalocyanine, adsorbed on both magnetic and nonmagnetic substrate, is of high quality and ground breaking. The group is also involved in fuel cell research and applies the experimental methods they developed for this purpose.

In summary, the research performed by this group fulfills the two tasks each research group in IMS should strive for i) developing new techniques and make them available to the scientific community ii) conducting high-level original research.

#### *Prof. Hiroshi Yamamoto*

The group of Prof. Hiroshi Yamamoto works in a new and fast-growing field of organic electronics. They explore new ways to control electronic and superconducting devices by molecules and the role of molecules themselves as components in electronic devices. The work performed combines in a very clever way, knowledge of Physics and of Chemistry. The group already succeeded to demonstrate breakthrough research and has established itself as one of the leading groups in this field, worldwide. The group will gain greatly from collaboration with a theoretical solid state physics group.

#### *Prof. Masahiro Hiramoto*

The group is studying the electronic properties of organic molecules that may be used in photovoltaic devices. Specifically, the group aims at controlling the band gap in organic semiconductors. This is achieved by first purifying the organic semiconductors and then doping them with high precision. The research goal is clearly defined and the group established itself in the active community

of organic electronics. They already demonstrated that their approach is important and may result in new electronic properties. The group is productive and the work is published in very good journals.

*Assoc. Prof. Genki Kobayashi*

The research of Genki Kobayashi is centered on synthesizing and measuring the properties of ion conductive material. The research is going all the way into demonstration of the application of these materials in energy storage and conversion devices. The research is novel and provides, in my opinion, a breakthrough in material research in general and conductive materials in particular. Despite the fact that Genki Kobayashi is only at the beginning of his scientific career, he shows maturity and deep insight, typically seen only at much more experienced scientists. Clearly the work performed is ground-breaking. The work is concentrated on conduction of hydride ions ( $H^-$ ) in oxyhydride. This is a new and a very promising approach. I am sure that any research institute in the world will be proud to have a person like Assoc. Prof. Genki Kobayashi as its member.

*Assoc. Prof. Toshikazu Nakamura*

Toshikazu Nakamura studies solid-state materials, such as organic semiconductors and conductors applying magnetic resonance methods. He is using both pulsed FT-NMR and X and W-band ESR. The equipment is of high standard and enables to perform interesting studies on organic crystals. In the spirit of the IMS, much of the work is performed in collaboration with other groups in Japan. Indeed these collaborations result in publications in excellent journals. With the aim of keeping the equipment at IMS the best possible, one should consider purchasing mm-wave EPR. However, it is important to insure that the equipment will be used efficiently and this may require hiring more people interested in this type of research.

*Assoc. Prof. Katsuyuki Nishimura*

Katsuyuki Nishimura research is focused on applying solid state NMR for the characterization of bio-molecules and inorganic materials. Typically, the projects performed are in collaboration with other research groups, which is in the spirit of IMS. Since the subject of research is very popular worldwide, the research would gain also from international collaboration.

---

訳文

評価レポート (2016年3月)

分子研滞在中に私は所長および6名の物質分子科学研究領域メンバーと面会した。科学的な成果を論じることとは別に、研究所のマネジメントによって本来解決可能な困難が領域メンバーの科学的探求を妨げてないか、ということも理解しようと試みた。従って、以下のレポートは三部構成とする。最初に私は研究所の運営方針に関する結論と提言を述べる。そこでは、比較的簡単に解決が可能と思われる問題に焦点を絞りたい。第二部では、物質分子科学研究領域全体について述べ、最後にそれぞれの研究グループについて検証しよう。

分子研全体について

1. 学生とポストクの不足——この問題は私が面会した全ての研究者から提起され、実際に提示された数字は深刻なものである。グループの人数をある程度制限して、外部の研究グループとの共同研究を推奨するという考え方は確かにあるが、あまりにグループサイズが小さいと、研究資源の無駄（あまり使われてない高価な機器等）と、

合成化学のように人的資源を大量に必要とする研究の欠如、が生じることになる。私としては、例外的に優秀な学生やポストクに対して特別の待遇を提供することによって、国際的な科学コミュニティから人材を確保することを提言したい。分子研に備わっている立派な機器類やすばらしい研究成果を宣伝することによって、中国やインドだけでなく、ヨーロッパやアメリカ合衆国からも学生を呼び込むことが出来るであろう。

2. 国際的コミュニティとの人材交流——准教授や教授として、数名の優秀な若い科学者を海外から雇用することが可能であろう。このような雇用をすることによって、分子研が海外からよく見えるようになるであろうし、そのことが海外の学生やポストクに対するアピールにもなる。
3. 科学者のプロモーション——分子研の科学者は海外から過小評価されている。彼らはその論文を一流の雑誌で発表しているが、表彰や賞として十分に認識されているとは言えない。私は分子研の内部に委員会を設立して、表彰制度や賞に関する情報を集め、そうした賞に分子研から候補者を推薦することを提言したい。

### 物質分子科学研究領域

この領域を評価するにあたっては、まず以下の二点がはっきりと指摘できる。

1. 領域内グループは二つのカテゴリーに分けられる。第一のカテゴリーは横山利彦教授、山本浩史教授、平本昌宏教授、そして小林玄器准教授である。このカテゴリーに属する研究グループは、最高レベルでの研究を行っており、実際にその成果を一流誌に発表している。個々のグループについて論じる前に、このカテゴリーに属する研究グループメンバーが行っている研究は、とても独創的で、各分野においてトップレベルと認識される内容であることを強調しておきたい。私が非常に感銘を受けたのは、これらの研究者があちこちつまみ食いをするようなアプローチではなく、彼ら自身の独創的なやり方で研究を展開していることである。  
第二のカテゴリーは中村敏和准教授と西村勝之准教授である。二人はそれぞれ最先端の装置である ESR と NMR の利用に関わった研究を行っている。ある意味では、分子研外の研究グループに対して最先端の装置を提供するという分子研のミッションに貢献していると言える。実際に、彼らは多くの外部グループと共同研究しているようである。個々の研究者に関するさらなる詳細は、後述する。
2. この領域はあまりに小さくて、物質科学の中のいくつかの重要部分が欠けている。その中には、生体模倣材料、(基礎的にも応用的にも重要な) 酸化物の研究、物質合成などがあるだろう。もちろんこの領域が全ての話題をカバーする必要はないが、それなりの幅を持つことは重要である。領域のほとんどの仕事は、小林准教授のものを除けば、物理的手法に特化しており、物質合成が行われていない。確かに、欠けているテーマの中には外部研究室との共同研究で補完できるものもあるだろうが、物質合成コミュニティを知っている 2~3 人の研究者が在籍し、外部の研究者と領域の研究者を結びつけることは重要である。

現代の科学において物質科学が占めている中心的な立場を考えると、物質分子科学研究領域は大いに重点化されるべきであるし、そのサイズは現在の 2 倍になってしかるべきである。雇用する人材のレベルを高く保つことは重要だが、同時に研究テーマの幅を広げることも重要である。可能であれば、海外のトップクラス研究室に滞在したことのある人材、あるいは外国人を雇用し、領域と国際コミュニティとのつながりを強化するのが良いであろう。それに加えて、物質の伝導性や磁性に関して研究を行っている理論家を雇用することも検討するべきであろう。そのような理論家が居れば、実験グループとの共同研究を展開できる。

## 個々の研究グループに関する評価

### 横山利彦教授

横山グループは磁性材料や磁性薄膜を研究するための新しい分光手法を開発している。グループが展開している研究は新しく、最高レベルのものである。彼らは紫外領域での円二色性光電子分光を用いて、実時間かつ超高速の新規磁性イメージングをコンセプトから開発している。分子研の共同利用として、彼らはX線の磁気円二色性システムを立ち上げ、国内外の多くの研究者に提供している。磁性、あるいは非磁性の基板に吸着させた単分子層フタロシアニンの研究は、品質も高く画期的である。このグループは燃料電池の研究も行っており、その目的のために開発した実験手法も展開している。

要約すると、このグループが行っている研究は、分子研の研究グループが満たすべき①新たな手法を開発して共同利用に供する②独創的なハイレベルの研究を行う、という2点を共に満たしている。

### 山本浩史教授

山本グループは新しく急速に成長しつつある有機エレクトロニクス分野で活躍している。彼らは分子そのものを構成要素とした電子デバイスにおいて、伝導性や超伝導を制御する新しい手法を開発している。その成果は非常に巧みな方法で化学と物理の知識を組み合わせ生み出されたものである。このグループは既に飛躍的な研究の進展を明示することに成功し、世界的にこの分野を牽引していくグループであると認められている。固体物理の理論グループと共同研究を行えば、さらに得るものが大きいであろう。

### 平本昌宏教授

平本グループは太陽電池として利用可能と思われる有機分子の電気的性質を研究している。特にこのグループは、有機半導体のバンドギャップ制御を指向している。これは、まず有機半導体を精製し、つぎに高精度のドーピングをすることによって達成される。その目標は明確に見定められており、有機エレクトロニクス分野における活動的なグループであると認められている。彼らのアプローチは重要であり、新たな電子機能に結びつくかもしれない、ということ既にグループは明らかにしてきた。この研究グループは生産的で、成果は一流雑誌に掲載されている。

### 小林玄器特任准教授

小林グループの研究はイオン伝導性化合物の合成と物性計測に主眼を置いている。これらの物質を用いたエネルギー貯蔵やエネルギー変換デバイスの実証へ向けて研究は進んでいる。この研究は新しく、私が思うに、物質科学全般としても伝導性物質としても画期的な成果であると言える。小林特任准教授はまだその科学者としての経歴のほんの始まりにいるに過ぎないが、それにも関わらず彼は、はるかに熟練した研究者にしか見られないような深い洞察を有しており、その円熟を感じさせる。明らかにその研究成果はこれまで無かったようなパイオニア的成果である。研究内容は、酸水素化物のヒドリド伝導に関するものである。これは新しく、非常に有望なアプローチである。世界のどのような研究所であっても、小林玄器准教授のような人物を擁することを誇りに思うであろう。

### 中村敏和准教授

中村准教授は、磁気共鳴を用いて有機半導体や有機伝導体などの固体を研究している。彼はパルス FT-NMR と X バンド・W バンド ESR を用いている。装置は高いレベルのもので、有機結晶に関する興味深い研究を行える。分子

研の共同利用精神に基づき、多くの仕事は国内の他グループとの共同研究で行われている。実際これらの共同研究は、優良な雑誌での論文掲載に至っている。分子研の装置を最良の状態に保つためにミリ波 EPR を導入することも考慮に値する。しかしながら、装置を効率的に利用する方策を確立することは重要で、そのためにはこの種の研究に興味を持った研究者を今以上に多く雇用する必要があるかもしれない。

西村勝之准教授

西村准教授は固体 NMR を生体分子と無機材料の評価に利用することに主眼を置いている。多くの場合、研究は分子研共同利用として、外部のグループとの共同で行われている。この種の研究は世界中で広く行われているため、国際共同研究としての発展も期待される。

ロン・ナーマン

## 7-1-2 Peter J. Rossky 外国人運営顧問

原文

### **Report of External Review**

**Department of Theoretical and Computational Molecular Science**

**Institute for Molecular Science**

**National Institutes of Natural Sciences, Okazaki, Japan**

**March 26, 2017**

Peter J. Rossky

Professor of Chemistry and of Chemical and Biomolecular Engineering

Harry C. and Olga K. Wiess Chair in Natural Sciences

Dean, Wiess School of Natural Sciences

Rice University, Houston, Texas USA

### ***Overview of review and of Department***

At the invitation of Professor Shinji Saito, I visited the Theoretical and Computational Molecular Science group from March 12–14, 2017 to review the research ongoing in the laboratory. I have visited the IMS on multiple occasions over an extended time, beginning in the 1980's when Keiji Morokuma was the founding Director of IMS and Iwao Ohmine was an Associate Professor. I therefore have a long perspective on the evolution of the researchers and their products in the Department, and I am proud to serve as a Foreign Councilor at IMS.

From this most recent visit, I have a few general observations to report that were very clear. First, the research now going on at the IMS is uniformly excellent and represents in every project, research that is of world class. The problems being attacked are at the frontiers of science and the approaches are cutting edge, as will be discussed further below. I would say that it is only after my most recent two visits to IMS during the past year that I can make a statement that is this sweeping. The awareness of the research

that is in competition from other labs and the self-awareness of each individual as a scientist in the broad perspective are outstanding in every case. The focus is chosen considering a global perspective. Most importantly, the individuals I met with are clearly *global* scientists, who are part of the global network of science. This represents an enormous evolution from the early years of IMS and even a measurable change from other relatively recent visits to the lab. I attribute the attainment of such a high point of success to outstanding leadership, most recently by Professor Ohmine and Professor Saito, who are themselves truly global scientists. Having met for the first time with the new Director General, Prof. Kawai, on this visit, I have no doubt that this global perspective will be reinforced under her exceptional new leadership.

Another particular example of change is the exceptional success in the hiring of Professor Ishizaki under non-traditional terms, where he could be promoted and also stay at IMS, rather than being required to move to another lab. From my personal view, this is a very positive opportunity to employ in exceptional cases, in terms of enabling the development of the strongest possible group of scientists at IMS. I have no doubt that conversations and debates will need to take place to determine the role that such appointments might make in the future, since it is a departure from a long standing policy aimed at providing a pipeline of molecular science experts for the nation.

In overview, the topics pursued by the theory group represent an excellent balance across the current frontier topics in the area. Specifically, there is a strong representation of condensed phase molecular science, including nanoscale materials and biomolecular systems, of dynamics in general, and of electronic structure theory with advanced applications aimed at developing and testing the new methods that are opening up access to complex molecular systems at an accurate *ab initio* correlated electron level. Noticeably missing are individuals who are making only incremental contributions to problem areas that are largely addressed by earlier work. This absence shows the strength of the group on an international scale. I would add, with some emphasis, that it would be very valuable to the group's national role in setting the standard for theoretical chemistry in Japan, if the group were able to identify and hire one or more female scientists in this field at the Assistant and Associate level. This would be fully in accord with the historical national leadership role of IMS.

### ***Individual research faculty members***

*Professor Shinji Saito:*

Having known of Professor Saito's work in molecular spectroscopy since he joined IMS, I was particularly excited to hear of his new work that supplements in a healthy way his continuing focus, and recognized leadership contributions, in the area of nonlinear spectra and underlying dynamics. Specifically, his new work on the dynamics of proteins and new formal approaches to the analysis of those dynamics represent a quite interesting and creative new branch of his portfolio and represents a growth in impact.

*Assoc. Professor Katsuyuki Nobusada:*

The work of Professor Nobusada was, perhaps, that which excited me most in recent visits to IMS, although we were not able to meet on this visit. This is largely because of my own research interests. It is also because I believe that his efforts to develop a complete description of nanophotonics for realistically modeled systems are very distinctive within chemical theory and computational researchers. Because I am particularly exposed to experimental research in this area at Rice University, I am also quite certain that the target area that he has chosen is a highly active one among experimentalists currently. Hence, I especially commend his work for its relevance and likely impact in areas such as catalysis, in addition to the quality of the theory.

*Assoc. Professor Takeshi Yanai:*

After a period of relatively low excitement in the broad community about research in computational electronic structure, recent years have seen a number of hires of faculty who are focused on developing new methods which may be able to address the correlated electron problem robustly and with high accuracy while also accessing larger systems that have been inaccessible via traditional methods such as coupled cluster. My judgment is that Dr. Yanai's work is very well placed in the development of electronic methods and that his work is competitive on a global scale.

*Professor Masahiro Ehara:*

Professor Ehara has been remarkably productive in applying electronic structure methods to true chemistry problems of widely accepted importance. His range of applications is quite amazing, ranging from dyes to nanocarbon materials to light-driven catalysts. His recent work on the structure of multimetallic clusters is very relevant to experimental studies on new catalysts and also electron transfer proteins. The fact that he has been able to address quite large systems, including excited states, with methods of acceptable accuracy is an impressive demonstration of the capacity of the methods when implemented by an expert. This work is clearly at the leading edge of what can be done in applications to real chemistry.

*Associate Professor Hisashi Okumura:*

I found the discussion of Professor Okumura's research quite exciting. While the problem of A $\beta$  peptide aggregation seems to be on the agenda of a large number of computational chemists, I found the work of Dr. Okumura to be refreshing in at least two ways: First, he is developing novel simulation methodologies for attack on the problem and these seem to be quite effective. Second, his work is yielding answers on mechanisms, rather than simply ideas of what *might* be important. Hence, he impressed me as one of the leading computational individuals in the area of biomolecular self-assembly. He had made substantial progress on both new methods and applications in the brief year since we had spoken previously. His program is well-focused, well aimed, and diverse enough to continue growing effectively.

*Professor Akihito Ishizaki:*

This was my second meeting with Professor Ishizaki, although I knew of his work that preceded his joining IMS and of his strong reputation. I enjoyed the encounter: He is a very energetic and knowledgeable scientist, and he is working on problems in quantum dynamics that are at the frontiers, including issues of quantum coherence and of exciton transport and decay. His methodologies are quite current, so that he is clearly competitive with the best scientists anywhere who are addressing similar problems. His latest work attempting to fully account for the coupling of the molecular environment with excitonic dynamics is directed well in terms of the likely evolution of his research area. His most recent work on exciton dissociation in green plants is an exciting area that promises to make important contact between biological and synthetic materials systems, a relatively undeveloped aspect.

*Research Assoc. Professor Yutaka Shikano:*

Having worked myself in the area of coherent quantum dynamics, I am relatively familiar with the style of physics research of central interest to Professor Shikano. To analyze in detail the quantum dynamics of model Hamiltonians can produce deep insight into the basic physics. However, in my view, it is largely separate from the current focus of molecular science. Hence, his work is

very valuable in a broad scientific context, but his contributions have been less connected to those of his colleagues in the Department. This view seems to be accepted by all concerned, including Professor Shikano. I learned during the review that he will be leaving the theory group of IMS soon to join Physics at the University of Tokyo. This is an excellent and constructive move for him, and the move continues the role of IMS in successfully developing talent that impacts the nation.

I would like to specifically highlight that the following comments are on the theoretical researchers whom I met for the first time on this visit:

*Research Associate Professor Takatoshi Fujita:*

Prof. Fujita is clearly a very accomplished young scientist, with an outstanding command of the most modern tools for computational modeling of optoelectronic properties of molecular aggregates, including organic semiconductors. The work he is doing is of first class quality. While this work is excellent and certainly internationally competitive, the molecular problems that he is focusing on in the implementation phase of his work, largely light harvesting systems, are also those that are directly in the areas of many senior researchers. I expect that after fully establishing himself at IMS, he will turn to problems that might distinguish him more from the “crowd,” such as design of synthetic molecular mimic systems. That would be a boost to his impact and reputation.

*Research Associate Professor Kei-ichi Okazaki:*

Prof. Okazaki is using state-of-the-art methods to tackle the mechanisms of very complex biomolecular systems. He has trained with the very best in the world, and he is focused on several cutting edge problems in biophysics. Each of these is a very worthy pursuit and each of these has ample room for entry of a new researcher. His work in the area of molecular machines is in a “hot” area, and his use of coarse-grained models is well structured. His work on understanding single molecule data is an essential element for working with the leading experimentalists in this area. I found his work on membrane remodeling by proteins to be especially well chosen and original. I believe that this area has, perhaps, the greatest opportunity for both individual growth and impact on science internationally.

Finally, I also met with two experimental groups of special personal interest for my research:

*Professor Masahiro Hiramoto [Materials Molecular Science]:*

I was fascinated to learn of Prof. Hiramoto’s work on doping of organic semi-conducting organic materials for “plastic” solar cells. This is a phenomenon often viewed as inaccessible in organics, although it is the most essential aspect of conventional (*e.g.*, Si-based) semiconductors. His research demonstrates clearly that doping *can* be effectively carried out. The experimental work is extensive, carefully executed, and highly original. I found it both very interesting and potentially quite relevant for future practical implementations.

*Professor Satoshi Kera [Photo-Molecular Science]:*

Prof. Kera’s work using photoelectron spectroscopy to understand organic films is at the cutting edge. The approach is now able to reveal very detailed electronic maps of molecular interfaces. I found his efforts to map out molecule-surface interactions, the

consequent impact on electronic structure, and the signatures of specific molecular structure on surfaces to be exceedingly well focused on specific questions of interest that can be answered quantitatively and definitively by PES. His work compares well with his global community and contributes important insights in the very active materials area of molecular films.

訳文

自然科学研究機構 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 外部評価レポート

Peter J. Rossky

Professor of Chemistry and of Chemical and Biomolecular Engineering

Harry C. and Olga K. Wiess Chair in Natural Sciences

Dean, Wiess School of Natural Sciences

Rice University, Houston, Texas USA

### レビューと領域の概略

齊藤真司教授の招待により、2017年3月12日から14日にかけて分子科学研究所の理論・計算分子科学研究領域で行われている研究をレビューするために滞在した。諸熊奎治教授が創設時からの主幹であり大峯巖教授が助教授であった1980年代初頭からの長きにわたり複数の機会に分子科学研究所を訪れてきた。したがって、理論・計算分子科学研究領域の研究者と成果の変遷について長期にわたる意見を持っており、また、分子科学研究所において外国人運営顧問を務められることを嬉しく思う。

最近の訪問から、幾つか報告すべき非常に明確な見解を得た。まず、分子科学研究所において現在進行中の研究はいずれも卓越しており、全てのプロジェクトが世界レベルである。以下で更に述べるが、取り組まれている問題は科学のフロンティアにあり、そのアプローチは最先端なものである。私がこのようなことを述べることができるのは、この一年間に分子科学研究所に二回訪問した後であるからであるということを示したい。他の研究チームとの競争に対する意識、また広い視野に立った各個人の認識はいずれも傑出している。研究対象はグローバルな視点を考慮して選択されている。最も重要なことであるが、私が会った個々人は明らかにグローバルな科学者であり、科学研究の世界的ネットワークを持っている。このことは、分子科学研究所の創設時に比べて非常に大きな進展であるし、比較的最近の分子研訪問時に比べてさえも大きな変化である。この大きな成功は、実にグローバルな科学者である大峯教授と齊藤教授による傑出したリーダーシップによるものであると考えている。今回の訪問で新所長・川合教授に初めてお会いし、彼女の卓越したリーダーシップのもとで、このグローバルな観点が更に強固なものになると確信している。

もう一つ変化の際立った例は、これまでとは異なる条件で石崎教授を雇用することに成功し、他の研究機関への異動を課すことなく分子科学研究所内部で昇進させたことである。私個人としては、分子科学研究所において可能な限り強力な研究グループを構築することを可能にするという点で、通常とは異なるケースで雇用するのは非常に素晴らしい機会であると思う。国内において分子科学の専門家を輩出することを目的としたこれまでの方針から外れるため、このような雇用が今後どのような役割を担うかについて議論がなされる必要があると考える。

概観するに、理論グループで進められている研究課題は、この分野における現在のフロンティアを非常にバランス良く含んでいる。とくに、ナノスケール材料や生体分子系を含む凝縮相分子科学、ダイナミクス一般、そして、正確な電子相関のレベルで複雑な分子系を取り扱うことが可能な電子構造理論に強みがある。過去の研究で盛んに取り上

げられた問題に対して付加的なだけの貢献をするタイプの研究者は存在しない。このことは、理論グループの国際規模での強さを示している。加えて、もし一人もしくは複数の女性研究者を理論グループの助教または准教授レベルで雇用することができれば、日本における理論化学のスタンダードを提示するという役目の点で、非常に価値があることも強調したい。このことは、分子科学研究所のこれまでの国内におけるリーダーシップとも完全に合致するものである。

#### 個々の研究職員

齊藤真司教授：

齊藤教授が分子研に着任した当初から彼の分子分光法に関する仕事について知っているのですが、彼の研究上の興味を健全な方法で満たす新しい成果と非線形分光スペクトルとそのダイナミクス研究の分野におけるリーダーシップについて聞いて非常に嬉しく思う。とくに、タンパク質ダイナミクスに関する新しい研究とタンパク質ダイナミクスを解析する新規アプローチは、齊藤教授の研究リストに新たに加わった興味深く創造性に富んだ研究テーマであり、彼の影響力を大きくするものである。

信定克幸准教授：

今回の訪問で信定准教授に直接会うことはできなかったが、彼の仕事は最近の分子研訪問で最も興奮させられたものであった。これは主に私自身の研究興味のためでもあるが、現実的にモデル化された系のナノフォトニクスを完全に記述する手法を開発する彼の努力は化学理論・計算の研究者の中で非常に独特であるからである。私自身ライス大学において当該分野の実験研究に関与しているため、信定准教授の研究領域は現在の実験研究者の中でも非常に活発なものであることをよく知っている。したがって、理論の質に加えて触媒作用などの分野での関連性と期待されるインパクトに関して彼の研究を賞賛したい。

柳井毅准教授：

電子構造計算の研究に関するコミュニティにおいて活気が比較的低い期間を経た後、近年では電子相関の問題を確実にそして高精度で取り扱うことができ、また *coupled cluster* のような伝統的な方法論では不可能な大きな系を扱える新しい方法論の開発に焦点を当てた教員の雇用が多く見られるようになった。私の見解では、柳井博士の研究は電子状態の方法論開発に非常に適しており、また、彼の研究にはグローバルレベルでの競争力がある。

江原正博教授：

江原教授は、重要性が広く認知された化学の問題に対して電子構造計算を適用し非常に生産的である。彼の応用範囲は、色素分子からナノカーボン材料および光触媒まで驚くべき広さである。多核金属クラスターの構造に関する最近の仕事は、新しい触媒や電子伝達タンパク質の実験研究に非常に重要である。許容可能な精度の計算手法を用いて励起状態を含む非常に大きな系を扱うことができるという事実は、エキスパートによって遂行される電子構造計算の可能性を印象的に示すものである。この仕事は、実在の化学への応用として実現可能な範囲で最先端にあることは明らかである。

奥村久士准教授：

奥村准教授の研究に関する議論は非常に刺激的であった。A $\beta$  ペプチド凝集の問題は多くの計算化学者の課題であるようであるが、奥村准教授の仕事は少なくとも2つの点で斬新である。第一に、彼は問題に取り組むために新しいシミュレーション手法を開発しており、これらは非常に効率的に思われる。第二に、彼の研究は重要な可能性のあるものは何かという単なる推測的なアイデアではなく、(アミロイド形成)メカニズムに関する明快な解答を与えている。これらの事から、彼が生体分子の自己組織化の分野において優れた計算科学者の一人であると感銘を受けた。我々が以前に話して以来の短い期間に新しい方法論とその応用の両方で相当な進捗を遂げている。奥村准教授の研究計画は効率的に発展し続ける上で焦点、目的が明確であり、十分に多岐にわたっている。

石崎章仁教授：

石崎教授が分子科学研究所に着任する以前から彼の仕事や確固たる評判を聞いていたが、彼と会うのは今回が二回目である。私はこの出会いを楽しんだ。彼は非常に精力的で知識豊富な科学者であり、量子コヒーレンスや励起子移動とその減衰の問題を含む研究の最前線にある量子ダイナミクスの問題に取り組んでいる。彼の方法論は非常に受け入れられており、類似の問題に取り組む何処の最高の研究者に対しても競争力がある。分子環境と励起子ダイナミクスの結合を完全に説明しようとする最近の仕事は、彼の研究分野において考えられる進展の点で良い方向性である。緑色植物における励起子分離に関する彼の最新の仕事は、生物系と合成材料系間の重要な接点を期待させるエキサイティングな領域であり、比較的未開発な側面である。

鹿野豊特任准教授：

私自身もコヒーレントな量子ダイナミクスの分野で研究していたので、鹿野特任准教授が主に興味を持っている物理学の研究スタイルに比較的精通している。モデル・ハミルトニアン量子ダイナミクスを詳細に解析することにより、基礎物理学の深い洞察が得られる。しかし、私の見解では、それは分子科学の現在の中心的興味から大きく離れている。したがって、彼の仕事は広範な科学の分野において非常に価値の高いものではあるが、彼の貢献は理論・計算分子科学研究領域における他の研究者とそれほど関連していない。この意見は、鹿野特任准教授を含む関係者全員が受け入れているようである。今回のレビューにおいて、彼がまもなく分子研の理論グループを離れ、東京大学の物理に赴任することを聞かされた。このことは彼にとって大変良い発展的な異動であり、この転出は国内で影響力のある才能ある人材を輩出していくという分子研の役目でもある。

以下のコメントは今回の訪問で初めて会った理論研究者に関するものであることを強調したい。

藤田貴敏特任准教授：

藤田特任准教授は、有機半導体を含む分子集合体の光電子特性予測のための計算手法を使いこなす非常に熟練した若手研究者である。彼の行なっている研究は第一級の質の高いものである。彼の仕事は優れており国際競争力も確かに高いのではあるが、彼が取り組んでいる問題は主に光捕集系であり、多くのシニア研究者の研究分野そのものである。分子科学研究所において彼自身の研究を確立した後、合成分子系設計などの彼自身を際立たせる問題に目を向けることを期待している。それは彼の影響力や評判の向上に繋がるであろう。

岡崎圭一特任准教授：

岡崎特任准教授は、非常に複雑な生体分子系のメカニズムに取り組むための最先端の方法論を用いている。彼は世界最高のトレーニングを受けており、生物物理学の最先端の問題に幾つか取り組んでいる。それぞれが研究する価値の高いものであり、研究者が新規に参入する余地が十分にある。分子機械の分野における仕事はホットな領域であり、彼の粗視化モデルは巧く体系化されている。一分子実験データの理解に関する仕事は、この分野を先導する実験研究者と共に研究をする上で不可欠なものである。タンパク質による膜変形に関する仕事はとくに選りすぐりのものであり独創的なものである。この分野に個人的な成長と科学への国際的なインパクトの両方にとって最高の機会があると確信している。

最後に、私の研究に関する個人的な興味で、二人の実験研究者に会った。

平本昌宏教授（物質分子科学研究領域）：

平本教授が取り組んでいるプラスチック太陽電池のための有機半導体材料のドーピングに関する仕事に興味を掻き立てられた。これは従来の（例えばシリコンベースの）半導体の最も本質的な側面であるが、有機物では得難いと考えられていた現象である。彼の研究は、ドーピングが効率よく実行できることを明確に示している。この実験研究は広範かつ慎重に遂行されており、非常に独創的である。非常に興味深く、将来の実用化に実質的な価値をもつ可能性がある。

解良聡教授（光分子科学研究領域）：

解良教授の光電子分光法を用いて有機膜を理解する研究は最先端を行くものである。このアプローチは、分子界面の非常に詳細な電子分布を明らかにすることができる。分子-表面相互作用、その結果として起こる電子構造への影響、表面上の特定の分子構造の特徴を描き出そうとする彼の取り組みは、光電子分光法によって定量的かつ決定的に解を与え得る特定の問題に非常に上手くフォーカスされている。彼の仕事はグローバルなコミュニティと比較しても遜色がなく、非常に活発な分子膜の材料分野で重要な洞察を提供している。

## 7-2 UVSOR 施設の点検評価

現在、UVSOR 施設では、アンジュレータビームラインを中心に光吸収分光と光電子分光を 2 本柱にして重点化が行われており、一線級の海外研究者の利用が増加している。海外の最先端光源ではそれぞれの分光法に対して顕微分光化が進んでいる。顕微分光では一般的には試料損傷の問題が深刻化するが、光吸収分光と光電子分光の顕微分光化にはいろんな方法があり、UVSOR 施設に適したものを選択しなければならない。すでに UVSOR 施設では、透過吸収法の光吸収分光において  $\mu$  スケール（集光素子なし）とナノスケール（Fresnel Zone Plate を使って集光）の顕微分光が、光電子分光において  $\mu$  スケール（集光ミラーを使う）の顕微分光がそれぞれ実現しており、残る課題はナノスケールの光電子顕微鏡である。現在、UVSOR に設置している種々の光電子分光装置の位置付けを見直しつつ、ナノスケールの光電子顕微鏡を含めた全体的な方向性について、外部専門家による評価を行った。以下はそのレポートである。

### UVSOR 施設における光電子分光分野を中心とした評価報告書

ドイツ・ユーリッヒ研究センター  
客員教授 菅 滋正

2016 年 11 月 8 日に UVSOR 全ビームライン見学後、田中清尚、解良、山根 3 氏より 2 時間半にわたり研究活動の現状についての説明を受けた。またその後、施設長の小杉氏より補足説明を受けた。

光源リングは 2004 年、さらには 2012 年の性能向上により着実に進歩して来ている。10 年前の評価で勧告した 1) 挿入光源の充実、2) トップアップ運転 については期待通り実施されてきており利用研究者にとっては大きなメリットになったと思われる。また、ビームラインによっては他施設の整備等による利用研究者の減少等により老朽化対策をせずシャットダウンをしているが、このことは妥当な判断と思われる。他の放射光施設で容易に出来る実験を UVSOR でもやらなければならないと言う必然性はない。ただ、中部地区の利用者にとっては時間をかけて他の地域の放射光施設に出かけて実験しなければならないという時間ロスを生じない程度の標準実験を可能にするビームラインは維持費の問題がなければ 1, 2 本程度残しておくことは許容範囲であろう。

一方でビームラインや実験装置の性能向上に伴い外国人研究者や優れた国内共同利用研究が増大しているビームラインや実験装置も複数あり、研究の activity は着実に向上して来ていると思われる。当面は、①最終段の実験装置をさらに如何に性能向上させるか、②如何に active な研究者を内部で育てるか、③外部から呼び込むか、が最重要な課題である。

偏向部放射光については、ビームラインは限られるが、更に広い層の利用者に使ってもらおうという方向は妥当である。また radiation damage の大きな試料を偏向部放射光で測定すると言うのも妥当である。

本評価では以上の理解に立って、主にアンジュレーターを用いたビームラインの現在の研究ならびに今後の研究方向について言及したい。

小杉グループの山根氏の説明によって BL6U が気相関連と固体関連とで半々程度の利用の現状であると言う点はバランスが取れていると思われる。また共同研究を含んで所内グループが直接関与するビームタイムが約 1/2、その他の外部利用が 1/2 と言うのは妥当と考える。SPring-8 の一般ビームライン等を見ると所内グループの利用できる時間があまりに短かすぎて所内研究者の士気が低下しているが、UVSOR のこのビームラインはこの点では理想に近いと思われる。有機分子を基板上に成長させた際の基板との相互作用や表面分子間の相互作用の詳細が解明されつつあり

極めて興味深い実験が発展中と評価できる。ビームラインも 60 から 400 eV を 1 万分の一のエネルギー分解能でカバーできているようであり、今後も多様な分子系や分子と基板の相互作用など興味深い実験データが継続的に得られると期待出来る。電子状態の波数依存性など高い分解能を要すると思われるので、radiation damage の無い範囲で、エネルギーと波数分解能についてより高精度の実現を目指すことが期待される。

解良グループの研究については多くは実験室光源で行われており、UVSOR 利用は外部利用者と対等の立場でのビームタイム配分と理解した。有機半導体等を研究対象としているために radiation damage や charge up 効果が深刻な場合があり、励起光強度を抑えて実験が要請されることもあるとのことである。一方で分子内振動等を検出するために高い分解能等も要請されるとのことであり、これらの実現のためには 2 次元波数空間での ARPES の必要性も高い。そのために取り込み角度の大きな slit を用いた静電半球型電子エネルギー分析器を用いることが望まれるが、これらの問題を全て解決できる手法は、現状ではドイツ Max-Planck- 微細構造物理学研究所で開発された Momentum Microscope しか無いように思われる。radiation damage を避けるために試料上の照射域を常時動かす方法は場所的な不均一性がある試料には適用することは出来ないので、マイクロ分光には不適であろう。

田中清尚氏のビームライン全体説明は全貌理解に役立った。中でも詳細に現状報告された BL5U で行われている ARPES の高度化は、試料を回転することなくレンズパラメタを電子的に振ることで、或る  $E_K$  の電子に対する  $I(k_x, k_y)$  分布を波数空間のかなり広い範囲で測定できる手法であり、マイクロ分光にも適用できる手法である。ただしアナライザー軸やスリットに対する試料位置に対して  $I(k_x, k_y)$  分布の homogeneity が激変するようであり、この点を大幅に改善しないと精度高い 2 次元 ARPES は遂行が難しいと思われる。また近い将来、Fe-O スピン検出器を用いた SP-2D-ARPES が構想されているとのことであるが、スリット方向の角度範囲のみならずレンズ電場でスキャンするスリットに垂直方向の角度範囲にも制限があること、45 度反射でスピン検出するための電子入射エネルギーは 3 eV 程度と小さくなること、さらに 45 度と直交の方向での電子のスピン検出器への入射角の変化などを考慮すると即精度高いスピン計測は難しく、事前に確かめなければならないファクターがいくつかある。この手法は SP-2D-Momentum Microscope での計測が本質的にできない試料に有望な SP-ARPES 手法である。

全体として先端研究に対応できるビームラインと実験装置は確実に整備されてきてはいるが、UVSOR-III あるいは将来の -IV で世界を先導するような研究を目指すことを考えれば、目を外国（特にドイツ）に向けて革新的な手法の導入をかんがえることが焦眉の急と思われる。このためには、内部研究者・技術者と国内外の研究者との友好協力により数年以内に世界のフロンティアに立てる実験装置の整備が行われることが望まれる。その意味で内部 staff をある程度の期間（可能であれば半年以上）、海外の革新的手法を開発している現場に派遣し know how を共同研究の形で学んでくることも好ましい方策と思われる。

以上。