

7. 点検評価と課題

2017年度は Hrvoje Petek 教授（ピッツバーグ大学）と中嶋 敦教授（慶應義塾大学）を研究顧問としてお招きし、所全体の研究評価，研究体制についての提言をいただいた。

2017年11月にはマックスプランク研究所（石炭科学研究所）の Benjamin List 教授より生命・錯体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。2018年2月にはヴェルツブルク大学の Eberhard Umbach 名誉教授により，光分子科学研究領域，UVSOR 施設，および本年度設置されたメゾスコピック計測研究センターを中心にヒアリングが実施され，それぞれの研究内容の評価および活動の評価をいただいた。

昨年度2月に開催された運営会議の際に，4つの研究領域の研究内容および研究方針について所外委員を務める関係研究者からのアドバイスを仰いだ。そのレポートについてもここに掲載させていただいた。

(川合真紀)

7-1 研究顧問による点検評価

7-1-1 中嶋 敦 研究顧問

評価レポート (2018年1月29日)

私は2017年12月26, 27日に分子研で行われている研究の評価をおこないました。所長および、4つの領域と2つのセンターの主幹を含む10名を越える教授陣と会い、9つの全体総括の発表を聴きました。また、9つの研究室と3つの主な施設(計算科学研究センター、UVSOR放射光施設、装置開発室)を訪問し、12月26日夕刻には、分子研助教や博士研究員による研究ポスター発表に臨みました。去る2017年4月4, 5日の32件の口頭発表の内容とともに、今回の全体の発表や研究室訪問を通じて、分子研の各領域や各センターにおける現在の研究活動を理解するように努めました。以下はその評価報告で3つの部分から構成しました。1つ目の(I)では、近い将来に解決が望まれる分子研の活動状況に対する提言を行ない、2つ目の(II)では、各領域・センターと各研究者の研究活動についてそれぞれ検証しました。

(I) 分子研の領域・センターへの提言

1. 現在の研究活動へのコメント

詳細な提言とは別にいくつかの重要な点をまず述べたいと思います。第一に、分子科学研究所の研究活動はたいへん充実しており、川合眞紀所長の優れた指導力のもとに十分な支援と組織化が図られています。設定されている研究テーマはいずれも最先端の科学であり、その先見性は分野を先導しています。第二に協奏分子システム研究センター(CIMoS)やメゾスコピック科学の新たなセンターを構築している運営方針は、これからの分子研の研究業績を高め、国際競争力をもちうる戦略であると考えられます。それを裏打ちするように創造性溢れる共同研究が始まり、新たな最前線の研究を拓くことが期待されます。最後に、研究所も各研究者も分子研の研究人材をグローバルな視点で活性化されており、研究会合を通じて十分な意思疎通が図られています。この研究所のあり方は、国際性豊かな若手研究者を育む上でも十分に機能しています。

2. 一層優れた研究所に向けた提言

分子研における研究活動を一層優れたものにするために2つの提言を以下に示します。

1) 最先端機器の先鋭化と高度化

分子研の重要な役割の一つには、分子科学分野の研究を一層力強く進めるために分子研を訪れる研究者に最高レベルの研究機器を提供することがあります。分子研ですべての最先端機器を整備することは困難ではありますが、「分子研には最先端機器としてこれが備わっている」、という状況は期待したいと思います。具体的には、微細構造X線解析、高分解能質量分析、微小領域電子分光、高分解能プローブ顕微鏡など、どれかの手法で先端研究を牽引することが期待され、その手法の先鋭化と高度化を通じて分子研の研究者が一層の研究の高みを目指して頂きたいと思います。

2) 広い視野をもった若手人材の育成プログラムと戦略

これまでの分子科学研究所の努力の結果として、国内外の学部生や前期博士課程(修士)大学院生のインターンシップを通じて、若手研究者の育成につながる質の高いきっかけや動機付けが行われていることは高く評価できます。その結果、総研大への進学プログラムを利用した大学院生の獲得に結びつくことは、優れた結果であるばかりでなく、各研究グループの研究活動の充実にもつながる展望が開けていることは、特筆すべきことです。この取り組みが分子

研のすべての研究室に広がるのが望ましいですが、海外からの大学院生の場合には、博士取得後に母国に戻った際に研究活動基盤が確保できるかを意識するものであり、研究分野の必要性や成熟度に応じて、国ごとに志向する研究課題に偏りを生じることが避けられません。近年、増加している東南アジア諸国からは、材料系実験や理論系の比重が高いので、今後、欧米の諸国から先端計測系の研究分野にも人材育成が波及することが望まれます。人事交流では、長年の信頼関係が重要であることから、機関ごとの協定による交流の前に、個人ベースの研究交流が先行する必要があります。その実行の際は、所外のプログラムを利用することはもちろん、所内での手当てを惜しまない支援体制の構築と精神が醸成されると良いと思います。

また、併せて大事なことは、所内の他の研究室との研究交流を、大学院生はもとより、ポストドクにも推奨し、学術の多様化と柔軟性の確保に留意することは有効な施策であると考えられます。合同発表会に全員が顔を揃えることを最低条件にしつつ、座長などの役回りに大学院生の貢献を求めるなど、質の高い時間を共有する仕組みを運用するとよいかもしれません。研究の視点に複眼的な要素が加わることに加えて、仲間作りにつながる研究交流は、研究機関への心地よい所属意識につながる可能性も高まり、「分子研ファン」の増加につながることを期待します。

(II-1) 分子研の領域とセンターの構成について

A. 協奏分子システム研究センター

分子科学における分子と分子集合との階層間のロジックを解析し、新たな分子システムを創成することを目的としているグループで、研究課題の先端性と国際性は高く、また構成員の研究活動は極めて活発である。研究グループ間の交流を通じて、センターとして特に力を入れる課題を打ち出せるとセンターの意義は一層高まると期待される。

B. 物質分子科学研究領域

新たな機能分子とその集合体の創製を念頭に、これらの物理的、化学的特性の解明を先端計測手法の開発をしながら進める研究グループで、研究活動は活発で多くの共同研究から多岐にわたる研究成果を挙げている。新たに2名の准教授の公募を進めており、先端計測手法の観点から人選が進めば、さらに強力な研究領域になることが期待される。

C. 生命・錯体分子科学研究領域

分子科学の視点からタンパク質の構造と機能を研究するとともに、生体分子の機能に学びつつ無駄のない化学反応を実現することを目指している。各研究室の研究課題は先端的で国際レベルであり、研究活動は共同研究を含めてとても活発で、優れた准教授が多くいる。分子科学的な方法論の駆使という観点から、適切な高精度分光法などを用いた共同研究が進むと、分子科学研究所の特徴がさらに高まるものと期待される。

D. 理論・計算分子科学研究領域

本研究領域では、量子力学や統計力学に基づいて理論・概念を構築し、さらに、大規模コンピューターによる計算を行うことにより、分子ならびに分子集合体の様々な現象を分子レベルで解明し、新規な物性機能の予測を行っている。計算手法の開拓研究、実験グループとの共同研究の両面にわたって、国際的にも高いレベルの研究が進められている。最近数年間で人材の若返りが起こった中で、的確な人材登用が進められた結果が感じられ、センターとしての機能を充分果たしている。それぞれの成長によって学術の発展が楽しみではあるが、大学などへの人材流出へ対応などは、国家プロジェクトのAI指向への取り組みと併せて注意深い対応が必要であろう。

E. 装置開発室

装置開発室は、機器開発、電子機器開発、リソグラフィ微細加工、デジタルエンジニアリングの4つの部門からなり、それぞれ分子研内外のユーザーの最先端研究の要望に的確に応えている。今後の取り組みとして、ものを作らずに設計指針をシミュレーションする Computer Aided Engineering (CAE) への技術対応、電子描画によるリソグラフィ微細加工、従来のプラスチック材料に加えて金属材料の3次元プリンター、という3つを挙げている。これらのマイクロファブリケーションの拡充などの方策は、いずれも今後の研究発展に資する技術であり、工作機器類の高度化に伴ってスタッフの機器操作への習熟が重要である。また、的確な人材の登用と育成が、この新しい装置開発室の活動の充実の鍵であると考えられる。

F. 光分子科学研究領域

本分野では、X線からテラヘルツ波までの光発生のための大型放射光施設 UVSOR とともに、固体フォトンクス制御に立脚したマイクロチップレーザーなど、高性能な光源の開発を進め、その光源の利用によって分子及び分子集合体の物性・機能・反応の研究を展開している。計測手法の高度化とともに、反応の精密制御などの研究は先端的で、共同研究を含めて十分な活力を示している。

G. UVSOR 放射光施設

維持管理と装置の高度化について、研究者の目が行き届いている様子が感じられたが、決して余裕のある状況ではなく、予期しない装置トラブルの発生への対処や高度化へのスピード感の加速には、人的手当が必要であるように感じられた。

H. メゾスコピック計測研究センター

本センターは、新たな分子能力の創発を念頭に、ミクロとマクロの機能が相乗的に作用するメゾスコピック領域における分子の機能や反応過程を明らかにする研究を精力的に展開している。新たな物性機能の舞台の化学合成に加えて、物質スケールに適合させた革新的な計測解析手法の開拓の先鋭化が生命線であり、国際競争に負けない研究体制作りが重要である。

(II-2) 個別研究者

1. 秋山修志教授 協奏分子システム研究センターセンター長

秋山教授のグループは、生物時計タンパク質の24時間の起源を反応素過程から解き明かす取り組みで大変ユニークな研究を分子科学の視点から展開しており、研究の意義は高く先駆的である。タンパク質時計の生化学的な活性測定、X線結晶構造解析や動的構造解析、分子動態計測、などの実験研究を軸に、研究所内の優れた理論化学の研究者と組むアプローチは合理的である。研究グループは小さいものの研究成果は活発に出されている。

2. 小林玄器特任准教授 協奏分子システム研究センター

小林特任准教授のグループは、二次電池などの電気化学デバイスを念頭に新規なイオン導電体の合成と物性計測の研究を展開している。とりわけ、水素原子アニオンであるヒドリドを導電の担い手とする固体電解質の物質を新たに合成することに成功しており、その高速イオン導電に着目して、さらに優れた特性をもつ物質合成が精力的に進めら

れている点は、特筆すべき点である。イオン導電のみならず物質変換に関しても研究アイデアが豊富であり、研究グループの拡充によって更なる発展が見込まれる国際トップレベルの研究者の一人である。

3. 古賀信康准教授 協奏分子システム研究センター

古賀准教授のグループは、タンパク質分子の立体構造形成と機能発現の原理を解明することを目的として、そのためのタンパク質分子を新たに計算機上でデザインして生化学実験によって検証する研究を展開している。研究者一人一人が、計算と実験の両方を手掛けることによって、スピーディーな研究展開を重視している姿勢は、限られた研究資源の制約を克服しようとする戦略に基づいており、研究推進の力強さを感じた。タンパク質分子の構造変化に協同した機能発現を解明しようとする課題への取り組みは国際的にも優れていると考えられ、また、千葉大学や東京大学とも興味深い共同研究が進められている。

4. 横山利彦教授 物質分子科学研究領域研究主幹

横山教授のグループは、放射光を用いた優れた研究実績を基礎に、機能物質の素性やさまざまな測定環境に合わせて、動作下の燃料電池触媒や大気圧下の金属酸化状態を研究するための新しい分光手法を開発している。電気化学の反応下の白金触媒に対する硬X線光電子分光（HAXPES）や、新たに立ち上げたX線磁気円二色性分光などの手法開拓は、共同利用機関として極めて先端的な手法提供であり、実用技術の基礎としても重要な視点を見据えている。また、得られている学術的成果は優れており、播磨 SACLA などの外部機関との連携にも積極的で、重層的な研究活動を展開している。

5. 平本昌宏教授 物質分子科学研究領域

平本教授のグループは、有機太陽電池に関する研究を有機半導体材料の超高純度化を基礎として、高精度なドーピングとナノ構造デザインを駆使して、高い素子性能の実現を達成し、さらに発展させている。有機半導体のバンドギャップの制御に着目しつつ、基礎物性から素子性能までを見通した研究の視点は明快で、太陽電池をはじめとするさまざまな有機エレクトロニクス素子の実現に貢献しうる実用上の価値も高い、独創的な研究と判断される。

6. 魚住泰広教授 生命・錯体分子科学研究領域研究主幹

魚住教授のグループは、水溶媒中で作用する精密な分子設計に基づく触媒（水中不均一系有機分子変換）や極めて高活性な金属錯体触媒を中心に極めて精力的に研究を展開している。これらの研究課題はこれまでの優れた研究実績を背景とした独創性の高いもので、グリーンケミストリーの視点を十分に実現した有機合成の研究において、その精密さが格段に高まり、優れた実用性の実証がなされている点は高く評価できる。

7. 飯野亮太教授 岡崎統合バイオサイエンスセンター

飯野教授のグループは、タンパク質でできた生体分子機械の作動原理と設計原理の解明を目的として、金属ナノ粒子を用いて生体分子機械の動きを単分子検出で可視化する研究を展開している。ユニークな金属ナノ粒子の活用を提案しており、観測と解析は容易ではないかもしれないが、非天然の生体分子機械の創製につながる生体分子機械の動作原理を詳細に明らかにできる期待がもてる。

8. 正岡重行准教授 生命・錯体分子科学研究領域

正岡准教授のグループは、人工光合成システムの構築を目指して新しい金属錯体の合成研究を精力的に展開している。酸素発生の触媒として鉄5量体の発見を基礎として、水分子をはじめとして、窒素分子、二酸化炭素など、活性化の難しい小分子の利用を可能とする金属錯体を精密合成する研究が精力的に進められ、海外留学生を含めて研究室にも活気が溢れている。生体酵素のクラスター骨格の例から考えて、標的としている合成対象は合理的であり、新たな金属クラスター骨格の触媒が見出される期待が高い。

9. 椋山儀恵准教授 生命・錯体分子科学研究領域

椋山准教授のグループでは、金属フリーの新たな有機触媒の設計とその触媒による合成研究が展開されている。これまでの豊かな研究実績を基礎に、新たに独自の世界を構築する途上にあり、研究成果の論文発表はこれからではあるものの、その研究成果は着実に生まれている。反応機構の解析を所内の理論グループとも精力的に進めており、新たな知見は分子分光学の上からも興味の対象となると期待される。研究成果について話を聞くのは今回が2回目であるが、研究の進展とともに話し方に自信がみなぎってきたことはたいへん頼もしい。

10. 齊藤真司教授 理論・計算分子科学研究領域研究主幹

齊藤教授のグループは、液体や生体分子系などの多体分子系の理論研究から、系の揺らぎ、揺らぎによる物性や機能などの研究を展開している。解析が十分になされていない多体問題に対する理論的な機構解明を進める課題では、課題設定にセンスの良さが感じられ、生体分子機能、水の異常熱力学特性などの研究はいずれも迫力ある本質的成果につながっている。実験研究との連携にも意欲的であり、理論化学を国際的に先導する中心的役割を果たしている。

11. 江原正博教授 計算科学研究センター

江原教授のグループは、極限環境下や溶媒中の化学反応を取り扱うための電子状態理論の開発とともに、電子状態理論を様々な化学現象に適用しながら、新しい化学概念の構築に取り組んでいる。電子状態理論計算の適用範囲は、光機能分子の励起状態ダイナミクス、不均一系の合金ナノクラスターの触媒作用、生体分子の電子励起状態解析、など非常に幅広く、実験研究との連携はきわめて真摯であり、それぞれの課題で優れた研究成果を挙げている。とりわけ、理論化学の活用による現象解明に大いに貢献していることは、理論計算の重要性の実証はもとより、化学現象の本質を理論的に見極める眼力が優れていることの証左である。

12. 石崎章仁教授 理論・計算分子科学研究領域

石崎教授のグループは、凝縮相における化学動力学の理論研究を独自のアイデアに基づいて推進している。光合成捕獲系の動作機構に関する生物物理を、量子動力学理論によって解明する研究において、実験研究者とも連携して優れた実績を挙げており、その成果を基礎とする今後の発展は大いに期待される。国際学術研究からの手厚い支援を受けながら、光合成捕獲系の構造ダイナミクス、エネルギー散逸、消光といった過程を、単分子分光の実験研究者との連携しつつ、理論を構築する研究を進めることは、今後も学術的に優れた成果を生み出すものと大いに期待される。

13. 奥村久士准教授 計算科学研究センター

奥村准教授のグループは、新しい分子動力学シミュレーションの手法開発を基礎に、タンパク質の構造と物性を明らかにする研究を展開している。タンパク質のヘリックスのミスフォールディングに起因する病気の機構解明を視野に、分子動力学シミュレーションを用いてアミロイド線維の動的挙動を解き明かすために、Replica Exchange 法や Replica Permutation 法などの新たな MD 法の開発を含めた理論研究を展開しており、研究の位置づけと方針は独創的で明確である。比較すべき定量的な実験の困難さに加えて、自ら行う計算の長時間化によって、現象論的な議論が中心になりがちであるにもかかわらず、アミロイド線維の形成に関する本質が解き明かされつつあることはたいへん頼もしい。

14. 柳井 毅准教授 理論・計算分子科学研究領域

柳井准教授のグループは、多電子波動関数理論とその光化学への応用に関する研究を、密度行列繰り込み群 (DMRG) 法を基礎として様々な化学現象の理解につなげる独創的な研究を展開している。計算の方法論の開拓、構築とその進展に合わせて、実験科学との連携にも積極的に取り組んでおり、これらの研究活動を通じて、多電子理論に基づく国際的に注目される成果を挙げている。

15. 大森賢治教授 光分子科学研究領域研究主幹

大森教授のグループは、量子コンピューティングや化学反応制御、さらには量子論の実験的検証までを念頭に、物質の波動関数の干渉を光で制御する先端的研究を展開している。高精度なアト秒レーザー光の発生手法と極低温のアルカリ金属集合体の生成手法とを組み合わせ量子波束エンジニアリングを実現し、高速量子シミュレーターを構築する研究は、独創性が高く、分子科学研究所の誇るべき優れた研究の1つである。また、国際的な研究連携の研究レベルも高く、この学術領域を牽引している。

16. 解良 聡教授 光分子科学研究領域

解良教授のグループは、弱い分子間力で集合した有機分子固体や有機薄膜の電子物性を精密に評価する研究を展開している。丹念な試料作りと精緻な分光手段との組み合わせによる高い実績を踏まえて、UVSOR 光を基礎とする各種光電子分光装置を利用して、有機分子と固体表面の界面における相互作用とその電子状態を高精度に評価することに成功している。また、表面化学関連分野の周辺技術を取り入れることにも積極的で、厚みのある優れた成果を挙げていくことが期待される。共同利用施設として運営でもその信頼は厚く、共同研究においても優れた成果を挙げている。

17. 岡本裕巳教授 メゾスコピック計測研究センターセンター長

岡本教授のグループは、ナノ物質と光の相互作用を巧みに用いてナノ物質のカイラリティーとそれに付随する磁気的性質を明らかにする先駆的研究を展開している。プラズモン共鳴励起に伴う光電場を近接場円二色性によって可視化することに成功するなど、研究手法や考え方は独創的で、研究グループのサイズは小さいが、研究活動は活発で優れた成果を挙げている。

18. 平等拓範准教授 メゾスコピック計測研究センター

平等准教授のグループは、光学材料の性質をミクロンオーダーで精密制御することによって、レーザー光を発生で

きる「マイクロ固体フォトニクス」の研究を展開している。この手法は高輝度レーザーや極端パルスの開発につながるなど、その技術レベルは世界的に注目されている。目的とするフォトニクス材料の創製のためにマイクロ固体として、精密なマイクロ周期構造の構築と希土類イオンのドーピング構造体の構築を進めている。国際学術論文の公刊にも注力しており、研究活動は十分なされている。実験室の案内は大変丁寧で、この技術開発の重要性を相手が理解できるように説明する姿勢がとても好印象だった。

7-1-2 Hrvoje Petek 研究顧問

The Advisory Committee thanks the IMS Director, Faculty, and Staff for a productive review.

The presentations were organized according to different Centers and Departments, with the head of each unit providing an overview of the ongoing research, and the purpose for existence and function of the unit. What was missing universally how each unit is contributing to the advances in molecular science, though the purpose of some units is to support other research groups inside and outside of IMS, rather than to perform research at the forefront of molecular science.

The structure of various centers at IMS has evolved over a long time with the Center for Mesoscopic Sciences being established most recently. From the themes of the Centers it is clear that someone envisioned a long time ago how IMS could continue to be a significant player in the field of molecular science if the goals of the center were actually pursued. Based on the themes, I think if the envisioned research were really pursued, IMS would be making significant contributions. However, what we experienced are different commitments by the center leaders and members to the function of each center. For the most part, the group members are pursuing their own research interests, regardless of the center theme. In part, this is driven by the funding. If a group leader obtains significant outside funding to perform such a research topic that is not directly related to the center theme, it is appropriate to carry out such research. Another model would be for group leaders to join together and use the strength of the center to seek outside funding on a topic related to the center theme. In fact, the purpose of the center should be to facilitate such interactions and to enhance the possibility of obtaining such funding.

What I found is that there is little ongoing research that is focused on the current popular topics in molecular science. Personally, one topic that I find very exciting is the research on quantum materials where the molecular structures of a solid-state material impart special electronic properties that are generally unavailable and rare in most materials. For example, two-dimensional materials such as graphene and chalcogenide semiconductors have special electronic properties related to electron spin and charge that exist only when a material is a single molecular sheet. This is clearly not a strong theme at IMS, but I find the center goals to be more ambitious and longer term; they may not be fashionable now, but progress at IMS could make them one of the growing fields in molecular science and thereby make IMS a center of excellence for such research. For that to happen Centers and Center leaders should advance the center goals, rather than to promote unrelated strengths. For the center theme research to thrive, the research funding could be allocated to topics, which are proposed by several center principle investigators, and contribute to the center theme.

What I found disappointing, was when center leaders could not communicate the research and role of each principle investigator to the center theme. This made it clear that the center leader does not himself believe in the center theme. If that is the case, the center

leader should strive to change the center theme, so that it suits better the center member's strengths or interests. A center is failing, however, if the center leader is mainly interested in pursuing his/her own research, rather than leading the center. Perhaps, in that case it is best for the center leader to step down and a new one to be appointed. This is also a good time to reevaluate the center themes and goals, and how they are being achieved.

It is important to reevaluate the center themes after some time. After some time, the center theme may be successfully accomplished or prove to be too difficult. Other themes where IMS has strength may emerge and provide new targets for new centers. It is important to have a continuous turn over in research themes as faculty leave for other positions, retire, and new faculty are hired. The hiring of new faculty is particularly important, because they bring in new ideas and topics, which should be made to flourish. Hiring should be made with a clear strategy of how a person can contribute to IMS by bringing in new ideas and expertise. When someone is hired, they should be provided the resources to establish their research quickly so that the ideas that they bring in can be put into action and not be realized elsewhere.

It is important for IMS to be a dynamical research institution, which can respond to developments and lead research in molecular science. I believe, that when IMS was established the policy of no internal promotion was instituted to make it a more dynamical and rapidly evolving research institution. This has made it an attractive institution in Japan for persons at the Associate professor level to establish their research careers and move on to other leadership positions in Japan. Associate Professors can make IMS and incubator for new ideas and research directions in Japan. One would hope that Professors would also have similarly impactful roles, but in addition, they should also nurture and guide the advance of young scientists in their department.

When I first decided to go to IMS as a postdoctoral fellow 32 years ago, IMS was a leading international institution in Molecular Science. Although I heard about very successful internship opportunities at IMS, I did not see much evidence that IMS attracts the top researchers or faculty, who come to advance their careers by a longer stay at IMS. There should be ample internal resources to support international collaborations, as well as stronger effort to use the existing government resources to attract visitors. One way to easily judge the IMS perception in the field of molecular science is by how many top international scientists can be attracted to spend some time in Okazaki, and how many IMS scientists have international research experience and collaborations.

Another tradition at IMS that should be renewed and strengthened are the Okazaki conferences. They are an excellent venue to open up IMS to the Japanese and international research community, to show the strength of IMS research, and to build new avenues for international collaborations. The lack of new initiatives and paucity of seminars and colloquia is not encouraging. IMS faculty need to be more active in communicating their results and exchanging ideas with research leaders in their field.

IMS has always provided unprecedented opportunities for leaders in molecular science to pursue and develop their research interests. This can best be accomplished by engaging their center leaders and director in communication. IMS researchers should use the available and substantial resources to advance their fields and the resources should be provided based on evidence of contributions to molecular science within IMS and in the broader community.

7-2 外国人運営顧問による点検評価

7-2-1 Benjamin List 外国人運営顧問

Dear Professor Kawai,

Thank you very much for giving me the opportunity to serve on the Scientific Advisory Board of the Institute for Molecular Science, of which you are the Director General, and which belongs to the National Institutes of Natural Sciences. It has been an honor to meet you and to have an on site visit from November 13th to November 14th at your institute. You have kindly presented to me the history, funding, structure, and science conducted at your impressive institute. I have also had the pleasure to be personally introduced to your individual departments by their department heads, including the Department of Materials Molecular Science, headed by Professor Toshihiko Yokoyama, the Department of Theoretical and Computational Molecular Science, headed by Professor Shinji Saito, the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, headed by Professor Yasuhiro Uozumi, and the Department of Photo-Molecular Science, headed by Professor Kenji Ohmori. Furthermore, I have been given the opportunity to visit the IMS research facilities, including the UVSOR Facility, and the Research Center for Computational Science. Finally, as part of my duties, I had the pleasure to hold individual interviews with the members of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science (Professor Koichi Kato, Assoc. Professor Norie Momiyama, Assoc. Professor Shigeyuki Masaoka, Professor Ryota Iino, Professor Shigetoshi Aono, Professor Yasuhiro Uozumi, Assoc. Professor Yuji Furutani, and Res. Assoc. Professor Kensuke Kurihara).

My overall impression of both, the institute in general and the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science in particular, has been excellent.

Before discussing specific aspects of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, I would like to take this opportunity, to make a few general remarks concerning your institute.

First of all, I noticed that there are several similarities to my own institution, the Max-Planck Institut für Kohlenforschung, and to the Max-Planck-Society in general. But there are also differences. For example, both of our institutes have five departments. While our institute has about 350 employees, including scientist as well as administrative and service members, and has a budget of around €27 million, the IMS has fewer employees (277) but a slightly higher budget (4 Billion Yen, ca. €29 million). Accordingly, one coworker on average costs around €105,000 per year at the IMS, whereas at my institute, on average, one person costs €77,000 per year. I am not sure, how to explain this difference. Perhaps income and cost of living are generally higher in Japan. I was also considering the possibility that the large infrastructural costs of your synchrotron beam line is responsible for this difference. However, from what I learned, it costs only 6% of your annual budget.

A significant difference can be seen both in the number of groups in each department and also in the individual group sizes. While your departments on average have eight groups, at our institute there are merely three. I would assume that spreading your resources among so many groups is expected to increase the chances of a scientific “hit.” On the other hand, some of your groups are clearly subcritical and even non-competitive regarding manpower. In the Max Planck Society we have a different philosophy

and give each department's director the complete freedom as to how he or she uses the resources allocated to the department. This typically leads to much larger groups of the director, which can be a quite powerful scenario. Sometimes, a diminished scientific diversity may result in such departments, but overall such a funding situation is possibly more attractive for the top scientists we aim to recruit. Possibly, reducing the number of groups in each department or giving each director the freedom to decide how many groups he deems suitable for his department is something for you to consider. This may also be discussed at the National Institutes of Natural Sciences.

Another aspect concerns the quest for recruiting outstanding scientists. In my opinion, to meet these challenges, a very high level of flexibility is required. In the Max Planck Society, we have similar rules like you, according to which assistant professor or associate professor level scientists cannot be promoted to director, which is our full professor level. However, we keep the flexibility to promote junior level group leaders, in very few exceptional cases (probably less than 1%), to the position of a director. Why would we voluntarily ask our most outstanding scientists to leave the society? My advice would be to seriously consider this model also for the IMS. I have seen amazing younger talents at your institute, some of which clearly have the caliber for top positions, be it at the MPG or at your institute or anywhere else in the world.

A minor recommendation concerns the names of your departments. I personally favor short names. For example, you may consider "Theory," "Light," "Materials," and "Life and Synthesis." Obviously, this is a matter of taste and I realize that this may well not meet yours or that of Japanese scientists in general. Also, a clear mission of the institute that can be expressed in one sentence may be helpful.

With regards to the group leaders of the Department of Life and Coordination-Complex Molecular Science, I would like to say the following: The order of individual group leaders follows the order of my interaction with them. (First Day: 1. Koichi Kato, 2. Norie Momiyama, 3. Shigeyuki Masaoka, 4. Ryota Iino, 5. Shigetoshi Aono. Second day: 6. Yasuhiro Uozumi, 7. Yuji Furutani, 8. Kensuke Kurihara)

1. Professor Koichi Kato: Professor Kato heads the Division of Biomolecular Function. In a nutshell, the highly ambitious aims of this group are to understand how life self-assembles from molecules, and ultimately to create life. I would say that this group works on one of the grand challenges of not only chemistry and biology but also of mankind. This question is perhaps paralleled by the quest of physicists to find the Grand Unified Theory, or to understand dark matter. Obviously, such a big problem cannot be solved by one group only and requires the collaborative effort of diverse scientists. These include synthetic chemists as well as experts from spectroscopy (NMR, IR, *etc.*), cryo-EM, Mass Spectrometry, and computation. It is highly impressive how Professor Kato oversees all these activities and how he collaborates with various scientists all over the planet that are engaged in the few missing areas that he is not covering himself. He has a keen and authentic interest in a real "synthetic biology" and also has been highly successful in establishing major consortia towards such a science. Examples of his particular activities include the investigation of how protein glycosidation patterns govern their biological fate and also how the proteasome assembles, which is probably one of the most complex supramolecular events in life. His interdisciplinarity, ambition, and scientific excellency is internationally well-recognized. His research is outstanding and I am confident that this world class group is among those at the institute that have the potential to publish

major papers in the very top journals such as *Nature* and *Science*.

2. **Assoc. Professor Norie Momiyama:** I can probably judge her work best, since my research interests overlap significantly with hers. She studies asymmetric organocatalysis and has, in a relatively short time at the institute, already made significant, original, and highly noticeable contributions. Specifically, she is engaged in three complementary projects: 1. she has discovered a fascinating and rather unexpected rearrangement reaction of butenyl amines with aldehydes. The mechanism of this reaction is being elucidated very carefully in her lab and in collaboration with Professor Suzuki, also at the IMS. This group also designs and develops new catalysts for asymmetric Brønsted acid catalysis. Finally, the Momiyama group develops new concepts within the area of halogen bonding. For example, they discovered a halogen bonding mediated allylation of heteroaromatics. Even more impressively, they immobilize organocatalysts onto polymers that possess halogen bonding sites. The resulting heterogeneous catalysts are very active and can be used in a synthesis of amino acids. Taken together, Professor Momiyama is clearly a very good scientist and leads a group that does promising and highly original research in the area of organocatalysis. She has a very keen interest in mechanistic questions and has clearly the potential to become an excellent professor in the near future.

3. **Assoc. Professor Shigeyuki Masaoka:** This group is engaged in extremely relevant problems such as the water oxidation, the CO₂ to CO reduction, and the N₂ to NH₃ conversion. All of these processes have the potential to make a massive impact for human life on earth. The group has recently had a major breakthrough with the discovery of a well-designed water oxidation catalyst based on a pentanuclear iron cluster (*Nature* **2016**, 530, 465). By solving the overpotential problem, their spectacular system catalyzes the water oxidation with rates higher than its natural counterpart. In addition, they are extremely meticulous in elucidating the mechanism of their reaction. In fact, each intermediate has been carefully characterized by cyclic voltammetry, DFT studies, Mössbauer spectroscopy, and the synthesis of individual intermediate states. They also have made impressive progress in the other areas of their interest, including fuel production from CO₂, photo-induced electron transfer, and active site assembly. Congratulations to Professor Masaoka for these amazing results and to the institute for hiring such an outstanding scientist.

4. **Professor Ryota Iino:** Professor Iino is interested in molecular machines. It is rather fascinating to note that while in biology essentially all of the key systems, including ATPase and many others, involve spectacular molecular motors, chemists are still far away from being able to produce even simplistic synthetic analogs. This is where the group makes its impact. Professor Iino and his team want to build molecular motors using computational design and directed evolution but they also intend to build hybrid or chimera that combine synthetic structures with biological entities. Towards these goals, in addition to computational work and saturation mutagenesis studies, they use a plethora of techniques such as optical MS, AS-AFM, x-ray and neutron diffraction, CryoEM. They also intensely collaborate with many other groups both at the IMS (with physicists at the photo department and with theory department) but also with other institutions in Japan and around the globe. They have published their excellent results in high ranking journals, including in the *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, in *Angewandte Chemie* and in *Nature Chemical Biology*.

5. **Professor Shigetoshi Aono:** Professor Aono's research interests are in the general area of bioinorganic chemistry. For his research he relies on protein crystallography and on biochemical methods. Key findings of this very good group include the study of sophisticated

iron uptake mechanisms that bacteria have developed, which rely on the chemical recycling of heme molecules of their hosts. His group also studies how heme regulates gene-expression and how vitamin B12 can function as an unexpected photosensing unit.

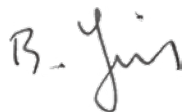
6. **Professor Yasuhiro Uozumi:** Professor Uozumi is a world-wide leader in the area of catalysis design and engineering. He continues to be an inspiration to many in advancing spectacular catalyst systems with properties that approach perfection. For example, they have developed hyperactive catalysts with ppb level activity. The group has also pioneered flow chemistry. The main inspiration of Professor Uozumi comes from enzyme catalysis but not in the sense that they try to make synthetic analogs but more in terms of learning from the key reactivity driving forces, which include a hydrophobic pocket, water-based conditions, and the utilization of transition metal complexes. On the basis of these considerations, they have developed amphiphilic resins that have led to extremely active and recyclable catalysts for applications in water. Examples include sub-ppm catalysis of the Suzuki reaction, and Heck reaction catalysts that approach one billion turnovers! He has also developed fascinating polymeric Brønsted acid catalysts that can be used to make biofuel. A particularly interesting topic is the immobilization of Pd-catalysts onto silicon wafers. The resulting catalysts can be recycled >100 times. The group publishes their excellent results in many papers in different journals.

7. **Assoc. Professor Yuji Furutani:** Since many years, Professor Furutani is interested in using infrared spectroscopy to study protein function. Considering that he has a very small group (two additional members), his group has made very good progress, even though he works in an extremely competitive research field. They collaborate with the group of Professor T. Fuji at the photo department of the IMS. The group is specifically interested in studying potassium channels and they have published very well in this area. FTIR is established by Professor Furutani and his team as an ideal tool to investigate membrane proteins, which are notoriously difficult to study using crystallography. This is where the group can make a strong impact in the future.

8. **Research Assoc. Professor Kensuke Kurihara:** This team aims at the formidable challenge of creating artificial cells. They use the more difficult bottom-up approach in contrast to the top down approach used by other groups around the world. They have elegantly studied oil droplet protocells that self-reproduce. They also study interesting approaches of using in situ generated amphiphilic catalysts from an oily amine and an aldehyde catalyst. It will be interesting to follow the development of this laboratory in the future.

Thank you very much again for giving me the opportunity to visit and learn about IMS. It has been both a pleasure and an inspiration to serve your excellent institute.

Best regards,



Professor Benjamin List,

Professor of Chemistry at the University of Cologne and Director at the Max-Planck-Institut für Kohlenforschung

7-2-2 Eberhard Umbach 外国人運営顧問

Report on the visit to the Institute for Molecular Science (IMS), Okazaki

27 February – 2 March, 2018

This was the first visit with the mission to become acquainted with the entire institute and to focus on the Department of Photo-Molecular Science and the Research Facilities, UVSOR Synchrotron Facility and Center for Mesoscopic Sciences.

General impression:

The overall impression of the IMS was excellent: a research institute of high scientific quality on international scales, with an on average relatively young team of principal investigators (PI, *i.e.* professors and associate professors), well equipped with mostly state-of-the-art instrumentation, highly visible in the international community and well connected and cooperating with leading research groups world-wide. Consequently, the scientific results are well received, highly appreciated, and hence frequently cited by the international community in the research fields covered by IMS.

A closer look into the list of publications reveals that the overall quality is very high, as judged by some recent examples (checked by the reviewer), proven by the percentage of highly ranked publications within the last two years (about one quarter), and corroborated by the top results of national and international citation indices (resulting from past performances). However, the number of peer-reviewed (ISI) publications per year and division (or per PI) is relatively low (5-6/a) compared to similar research institutions world-wide. This is mostly due to the fact that the research groups at IMS are relatively small on average, in particular because some of them do not have graduate students. Thus, the absolute number of graduate students at IMS is relatively small, not even as large as the number of professors (PIs). Of course, this is due to the specific situation of a non-university research institute and probably difficult to change, but efforts and incentives to increase this number could help to support the missions, such as educating young scientists, making more use of the very good infrastructure, and increasing the output.

IMS is one of the five national institutes of natural sciences with the mission of doing fundamental research of high quality in the field of molecular science. This is perfectly fulfilled by the activities of the present research groups. The selected fields covered by the PIs are topical research areas on international scales, some even at the forefront. The frame conditions of a non-university research institute, namely to allow “large-scale research” (involving long time scales, big or complex experiments, high quality technical infrastructure and personnel, *etc.*), are well used by most of the PIs thus perfectly fulfilling the mission of a national research institute. In this context it is highly appreciated that some groups work on topics that require many new developments, high precision and skills, and hence a large amount of endurance, although they may not result in many short-term publications and hence immediate success.

In spite of the mission of IMS to perform fundamental research it is evidently of considerable advantage if some research activities lead to patents, applications, or to successful cooperation with industry. This is not only for giving tax payers and politicians arguments why basic research is useful for society apart from the generation of basic knowledge and education. It also helps to provide motivation and the “arc of suspense” between fundamental questions and “real life” applications. The number of existing good such examples at IMS could be extended, perhaps by suitable incentives.

In addition to these more general remarks, some specific comments are added concerning the above mentioned department and research facilities.

Department of Photo-Molecular Science:

Although the name of this department sounds a bit strange at first glance it makes sense to bundle all fundamental research on molecules interacting with photons in one department because the related topics have several basic aspects in common. Nevertheless the department spans a wide range of interactions of photons with matter including a wide range of wave lengths (infrared to x-rays), time scales (attoseconds to continuous), length scales (single atoms to solid state), and of course research questions. The diversity of the selected topics is high in order to cover a significant range of different issues. It ranges from Laser research (fundamental quantum physics, ultrafast lasers, development of high-power micro-lasers) over nano-optical research for instance in chiral nano-systems over all-parameter band structure investigations on highly correlated materials to investigations on inner- and intermolecular interaction in various liquids and functional organic layers and interfaces. Although the various fields appear significantly different from each other, in at least one case coherence is achieved by adjacent, complementary research fields in order to make best use of the large infrastructure UVSOR. Altogether, the past strategy to set up a department around photon-matter interaction was apparently very successful. Nevertheless, for future hiring processes and infrastructure decisions a careful further development of the strategy appears adequate.

The quality of the research groups as judged from the written reports, from the publications and from the presentations given during the visit can be stated as very high comparing the research groups of this department with similar groups around the world. The attempt to achieve the deepest possible understanding and the very careful investigation of all details and parameters is a common “trade-mark” of this department which is highly appreciated. Several high quality publications and the received international recognition underline this statement. Nevertheless, the output, especially the number of ISI publications per research group (PI) and year, is quite different: it ranges from one to about 10 publications. Although, quality is much more important than quantity, and although the research fields are very different, an enhancement of output in terms of publications in peer-reviewed journals is recommended in some cases.

Professor Ohmori Group:

The visit of the Laser laboratory of K. Ohmori and his team was also very impressive. There are just a few laboratories around the world that have instrumentation of this quality and the scientific potential for studies of quantum states of matter using trapped ultracold atoms and molecules. It is a good choice and nevertheless a great challenge to study the long-range interaction between Rydberg atoms in lattices of three dimensions with attosecond time resolution. There are several fundamental questions that can be answered by such experiments, and once studies of three-dimensional lattices of Rydberg atoms become routine, several new findings for instance concerning collective excitations, surface phenomena, and topological effects in such very weakly interacting “solids” are expected to be accessible.

UVSOR Synchrotron Facility:

UVSOR is a 750 MeV synchrotron radiation (SR) facility of second generation which has very successfully been upgraded in two stages to a competitive, quasi third generation SR source with high brilliance due to a rather low emittance (15 nm-rad). Because

of its low primary energy it is dedicated to the UV- and soft x-ray range and because of its low emittance and its 6 undulators it is competitive to all other synchrotron sources in this energy range world-wide. Of course, higher energy synchrotron sources (3 GeV and more) can also cover the low photon energy range, and longer undulators and lower emittance at higher electron energy can provide much higher photon flux densities, but many experiments do not need such high flux densities or the hence possible energy or time resolution. In such cases the availability of a source like UVSOR has several advantages, not least much lower overall costs per experiment. Nevertheless, a careful consideration of the pros and cons as well as a convincing future scientific concept as well as a sufficiently large and effective user community appear necessary if further upgrades and major investments are taken into consideration.

In the past and present N. Kosugi (chair and experiments) and M. Katoh (machine) and their teams have done a marvelous job. With limited resources (as compared to other SR facilities) they have done much refurbishment and many improvements, have achieved an optimum of resulting SR power and research results per time and money within the given boundary conditions; nevertheless still many old components can cause and have caused troubles and need to be replaced. Performance of machine and instruments as well as the obtained scientific results deserve admiration and have significantly contributed to the international visibility of IMS.

Center for Mesoscopic Sciences:

The newly founded Center for Mesoscopic Sciences addresses a field of increasing importance: the mesoscopic “world” covers the range between the fundamental “bricks” atoms and molecules and the macroscopic ensembles like solids and liquids. On mesoscopic scales the size of the systems often plays a decisive role, and properties largely depend on length scales and the number of microscopic elements. Mesoscopic systems are hence scientifically interesting, may require new approaches and may lead to new applications.

Several activities of existing research groups of IMS can be considered to belong to mesoscopic science; others may also contribute to this Center by slight changes of their research program. At present, however only a few research groups are integrated in this Center.

The tour through H. Okamoto’s laboratory for nano-optical investigations was also impressive and yielded a convincing idea of what mesoscopic research for instance could mean at IMS. The further development of this Center, the participation of other research groups with mesoscopic topics, and perhaps some structural clarification could stimulate the success and visibility of this new center.

Conclusion: IMS is a leading research institute with convincing national mission and high international visibility, which has a very good infrastructure and a high research performance. The visit was very interesting and enjoyable, also due to the high professionalism and great hospitality of IMS members.

Eberhard Umbach

Former President, Karlsruhe Institute of Technology, Germany,

Professor Emeritus in Physics, University of Wuerzburg

Theilheim, March 11th, 2018

7-3 運営会議委員による点検評価

7-3-1 高原 淳 運営会議委員

若手独立フェロー

昨年から文部科学省が実施している卓越研究員のモデルとなるような素晴らしい制度である。プレゼンテーションされた2名のフェローは理論・計算系でいずれも優れた業績をあげておられ、若手研究者の発掘が十分行われている。議論でも指摘があったように実験系の場合は5年の期間では厳しく、7年程度の期間、さらにはPDなどの共同研究者のサポートが必要不可欠である。

理論・計算分子科学研究領域

優れた研究成果が発信されている。グループによって発表論文数が大きく異なるが、そのグループの構成メンバーの数とも関連している可能性もある。実験系の研究者も分子設計・物性予測に関して理論・計算科学に期待するところは非常に大きいので、実験系と連携し良い研究対象を見だし積極的な連携をすることによってこの研究領域の活性化を行って欲しい。研究活動分野は比較的構造の明確な系が多く、ソフトマターのような時空間的に複雑な階層構造をもつダイナミックな系への理論・計算が展開出来る研究者（グループ）も今後必要ではないかと考えられる。

物質分子科学研究領域と協奏分子システム研究センター

研究対象はかなり広範囲で、電子物性、エネルギー材料系を中心に優れた研究成果が発信されている。分野的には若干、電子物性系に偏りがあるように感じられる。実験手法としては電子物性評価、ESR、NMR、UVSORなどを駆使した先端測定、特にUVSORに関してはオペランド計測により最先端の研究が推進されている。分子集合体に関しては有機材料系や有機無機ハイブリッドにも多くの研究対象があるので、その分野の研究領域も充実させることによってさらに研究領域の充実が期待できる。

7-3-2 米田忠弘 運営会議委員

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）評価

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）の研究内容、領域のあり方や分野のバランスに関して意見を述べる。

1) 研究内容

横山グループ

SPring-8のBL36XUでの雰囲気制御型硬X線光電子分光装置を開発し、固体高分子形燃料電池をターゲットとして完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定。また他の新規測定手法としては、時間分解X線吸収微細構造（XAFS）分光を開発し、光触媒材料の光励起過程での電子状態及び構造ダイナミクスを明らかにしている。これらは装置開発に力点がおかれており、対象物質もより社会からのニーズの高い燃料電池や触媒への応用を目指している。他方、分子研シンクロトロン放射光施設UVSOR-III BL4Bを用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）の装置開発を行っている。表面界面での分子研究、とくにスピンに関する研究に欠くことのできない存在となってきたXMCD手法であるが、最大限の威力を発揮するためには低温や強磁場が要求され、世界最先端にすることは容易ではない。また対象は基礎的学理の興味であることが多い。このような状況ながら、共同利用公開を行って分子磁性の新しい評価

装置としての重要性が国内外で認識されつつ有ることは特筆すべきである。グループ内部で基礎化学および装置開発から、応用を目指した物質探索やデバイス動作下でのキャラクタリゼーションまでバランス良くテーマが配置されておりよくマネジメントされている。反面、限られたスタッフで研究レベルを維持することは、かなりの困難を生じていることは予想される。

代表的論文として [“Hierarchy of Bond Stiffnesses within Icosahedral-Based Gold Clusters Protected by Thiolates,” *Nat. Commun.* **7**, 10414 (2016)] が挙げられるが、開放型共同研究拠点としての良い例である。また海外との共同研究の件数も特筆すべきである。

中村グループ

分子性固体の電子状態（磁性、導電性）を主に微視的な手法（ESR, NMR）により明らかにしようとし、同時に高周波 ESR を用いたスピン科学研究を進めている。対象物質は有機導体・低次元スピン系である。

特徴は、他に類を見ない磁気共鳴分光測定手法を用いた、最先端の ESR 測定研究の展開や、高圧下・極低温下といった極端条件での測定である。分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を目論んでいる。代表論文として [Organometallics **35**, 3281–3287 (2016)] などが挙げられているが、他のグループに比較して少ないといえる。NIMS からの分子提供を受けた共同研究での新規な導電性有機物質の電子／スピン状態の解明を行うなど共同研究は順調に進行していると考えられる。

平本グループ

有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓するために必要な基礎的研究を行っている。最近の研究では、電界効果トランジスタ（FET）移動度測定を用い、ドーピングによって有機単結晶中に形成される欠陥によるトラップが、キャリア濃度、キャリア移動度に大きな影響を与えていることを明らかにした。また、超高速ホール移動度有機半導体と超高速電子移動度有機半導体を用いた、交互積層超格子キャリア横取り出し型超格子単結晶セルを作製し、ブレンド接合が不必要な新しいタイプの単結晶超格子有機太陽電池として提案している。業績としては、代表的論文として示されている [J. Mol. Liq. **217**, 51–56 (2016)] や [Langmuir **32**, 4352–4360 (2016)] に発表された内容よりも、NEDO プロジェクト（2015.3–2016.2, 超高性能単結晶有機太陽電池の原理と動作検証）CREST プロジェクト（有機 PN 制御技術）など大型プロジェクトに直結した社会ニーズの高い物質に特化しようとしている。

西村グループ

固体 NMR を用いた有機・無機分子材料の解析とくに糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミロイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析を行っている。有機溶剤に不溶な非晶性の有機分子材料の状態解析は一般に困難であるが、固体 NMR は非破壊でその分子情報を得ることの出来る手法である。複数の新規合成高分子、分子材料および高分子複合体などの分子状態や、高分子の分子状態の解析を行っている。代表的論文として [“Multiple-Component Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Commun.* **7**, 12325 (2016)] が挙げられており、特に生体分子での構造解析に注目が集まっている。所外からの構造解析の依頼、及びこれらを対象とした測定法の開発研究も進めており、NMR 分光器の更新も行っているが、研究の対象は新規測定手法と呼ぶよりも、従来の NMR の新規物質への展開と考えられる。国際的な共同研究の例が少ないのが気になる。

小林グループ

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索や H⁻ のイオン導電現象を利用した新規イオクスデバイスの創成、および電極/電解質界面制御によるリチウム二次電池の高性能化を行っている。特に H⁻ 導電体 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ の研究から得られた知見を基に物質探索を進めた酸水素化物の物質設計に資する固体化学的手法は大変注目を集めている。電池応用のイオン伝導物質の探索が精力的に行われている。 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ が全固体電池の固体電解質として働くこと、あるいはリチウム二次電池の高容量正極材料として期待されている $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ (M = Ni, Co, Mn) の研究が行われている。大変タイムリーな電池関係物質の探索が注目される。

山本グループ

有機モット FET (FET = 電界効果トランジスタ)、有機超伝導 FET および超分子ナノワイヤーの研究が精力的に行われている。有機モット絶縁体 $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{X}$ (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いた FET を作製。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが、トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活するという原理を用いたスイッチングを実現している。

また上記モット絶縁体のモットハバードギャップを、歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において超伝導状態が実現することが予想されている。そこで基板からの歪みを制御することによって極限まで電荷ギャップを小さくした FET を作製し、これにゲート電圧を印加することによって、電界誘起超伝導を実現した。

代表的論文として [Nat. Commun. 7, 12356 (2016)], [Appl. Phys. Lett. 109, 233301 (2016)] が示されているが、理研・加藤礼三グループから提供される物資群を FET という場でエネルギーを調整することで新規な物性を創出している。グループメンバーである須田らを含めて活発な研究活動が行われている。

鈴木グループ

曲面グラフェン分子の開発 (芳香族ベルト・サドル) など新規な炭素系物質の合成からその物性測定を行っている。また電界効果トランジスタのための有機半導体の開発の研究を手がけている。

具体的にはシクロパラフェニレン (CPP) を京大化研・山子グループとの共同研究により合成を進め、いくつかの興味深い CPP 類縁体 (カーボンナノフープ) の作成に成功している。目標として初のナノベルトの完成を目指している。これらナノフープはベンゼン環同士がねじれているため、固体での分子間 $\pi\text{-}\pi$ 相互作用が生じにくい。一方、ナノベルトはナノフープより長く、CNT と同じく一枚の連続した表面をもつ。このため、2 次元的な分子間 $\pi\text{-}\pi$ 相互作用を取りやすく、有機半導体などのユニークな固体物性が期待できるとしている。

カーボン系物質の合成から半導体応用を目指している。最近の代表論文として [Chem. -Eur. J. 21, 18939-18943 (2015)] あるいは [J. Org. Chem. 81, 3356-3363 (2016)] が示されているが、競争の厳しい領域であるので世界的にリーダーとなる研究分野の探索は容易ではないと考えられる。

2) 領域の構成や分野バランス

物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター (物質関連) は基礎的な物理化学とマテリアルサイエンス領域の両方をカバーするものと考えられる。

一般的に、基礎的な物理化学の研究を通して、物質の新規物性の発見と、新しい測定手法が生まれると考えられて

いる。またマテリアルサイエンスはデバイス応用や社会的研究需要と大きく結びついている。従って、当該分野は幅広いスペクトルの研究領域をカバーすることになり、また研究室の性格も幅広いスタイルが予想される。

そこで解析手法・手段と、開発・研究対象としている物質の種類から研究室のスタイルを、私見によって2次元に図示したものを下記に示す。横軸に解析手法や装置について、新しい原理に基づいた装置開発を行っている場合に右に、従来手法を組み合わせた手法を駆使している場合を左に取った。縦軸には、研究対象の物質・分子がより社会需要の強い場合を上、学理的性格の強い場合を下にとってみた。その分布を見ると左上にグループが集合していることが伺える。既存の手法を駆使して需要の高い物質研究にシフトしている傾向が見える。

分子研が日本を代表するリーディング研究組織で有るためには、個々の研究者のレベルがトップクラスであるとともに、共同研究や装置開放により分野の発展の核となることの両方が要求される。個々のグループの業績は素晴らしいと考えるが、後者の日本の分子科学研究の核となるためには新奇測定手法／装置開発の比重を高めることも重要であると考えられる。

測定手法も幅広い対象があるが、分子を対象とした顕微鏡技術の開発はその必要なものの1つと考えられる。無機物質よりも電子線ダメージに弱く、既存の透過型電子顕微鏡を越えた装置を開発することが必要かと考える。分子への損失が少ない走査型トンネル顕微鏡・原子間力顕微鏡も候補であると考えられる。また生体分子の観察のための新規手法も要求される。このような分野を将来的に充実させることは全体のバランスを考えた場合、必要かと考える。

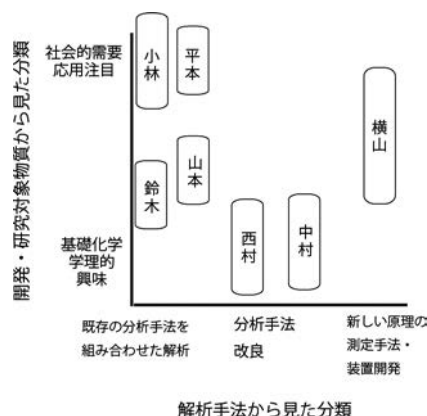


図 物質分子科学研究領域および協奏分子システム研究センター（物質関連）領域を、横軸に解析手法、縦軸に物質をとったときのグループ分布

7-3-3 大西 洋 運営会議委員

光分子科学研究領域について：3研究部門と1センター・1施設からなる本領域は cutting-edge study とよぶにふさわしい先端的な研究成果を多くあげており、国内においても海外においても存在感を示していることを高く評価できる。第一研究部門は紫外－可視波長域の空間分解分光，第二研究部門は同じく時間分解分光，第三研究部門では軟エックス線分光を極めようとする役割分担は、限られた人員によってできるだけ広い分野をカバーする方策として合理的である。分子制御レーザー開発研究センターならびに極端紫外光研究施設における光源開発と施設提供は分子科学コミュニティに対する非常に重要な貢献であり、今後も高いアクティビティを維持発展することが望ましい。

中長期的な視点では、光分子科学の発展方向を予感させるような先導的（先端的であると同時に先導的）な研究のたねをまくことの重要性をあえて指摘したい。源義経の鶴越や織田信長の桶狭間のように、少人数チームによる局地

戦であっても長く語り継がれるような研究をめざしてほしい。そのような方向性が、ネットワーク型共同研究の拡充をもたらし、分子科学研究所のビジビリティをさらに向上させることを所外評価委員として期待する。

7-3-4 田原太平 運営会議委員

光分子科学研究領域に対する評価レポート

分子科学研究所の光分子科学研究領域の研究者は、各々ユニークでレベルの高い研究を行っている。ナノ構造物質におけるプラズモニクス、特にそのキラリティに関する研究や、量子コンピュータを視野に入れた気相分子の超高速分光はこの領域の中心的な研究であり、オリジナルな研究を展開している。発表論文数は必ずしも多くはないが、分子研はプロフェッショナルな研究者の集団であり、研究の質が最も重要であるのでそれは問題ではないだろう。

極端紫外光研究施設は高度化に成功し、軟X線領域の研究に最適化した放射光施設として、より高エネルギーで大型な他の施設との差別化がうまく図られて世界的に見ても優位性を確保している。放射光光源としての性能向上を背景に、所内の研究者は液体研究や有機薄膜研究などの新しい問題へとその研究を展開し成功を収めている。また、世界中から研究者が UVSOR を使用するために集まってきており、この分野での研究と運営が大変うまくいっていることを端的に表している。

レーザー開発研究においても、産業利用を視野に入れた研究およびパルス光発生 of 極限を追求する研究の両方において優れた研究を推進している。開発した技術を共同研究などを通して外部へ提供することで、分子研を中心とするネットワークを構築することができる。分子研は最先端の研究を追求する研究所であり、産業応用を必ずしも視野に入れる必要はないが、あえて否定する必要もなく、これらレーザー開発の自然な発展としてそれがかなうのならばそれは素晴らしいことであろう。

以上のように光分子科学研究領域の研究者は大変優れており、その多くが世界レベルの研究活動を行っている。しかし以下の点で、活動度をさらに上げる余地が残されていると考える。

まず、光分子科学研究領域の研究者がどのような分野をカバーしているかを鳥瞰すると、明らかに凝縮相の先端的分光計測分野が弱いことに気づく。この研究分野は世界的に見ると分子科学研究所の中心の一つであり、周辺分野への波及効果も大きい分野である。歴史的に見てもかつて分子研はきわめて高いレベルの研究を推進し、世界的にその存在感を示していた。また現在、分子研の理論分野には凝縮相ダイナミクスの研究で世界的に良く知られた優れた研究者が複数おり、所内での連携や共同研究という側面から考えても、凝縮相の先端的分光分野の実験家が分子研にいないのは残念である。今後の人事において補強が望まれる。

次に、分子研の“分子科学分野の中心”としての役割の再確認の重要性を指摘したい。すでに述べたように個々の研究者の研究レベルは高いが、それが国内さらには国際的な中心になっているかという観点に立つと改善の余地があると思われる。テーマの設定がややニッチ、あるいは特殊ではないかを感じる研究もある。ただし新奇さとニッチさは表裏の関係にあるので、このこと自体は一概に問題であるとは言えないが、ニッチさはやがて深さや広がりを持った大木になり得て本当の意味があるので、そこに留まることを良しとするべきではないだろう。共同利用機関として、

分子研には国内外の分子科学分野の研究者たちが集い議論を交わす場となることが期待されているし、また実際に長らくその機能を果たして来た。その実現と維持には研究者個々の利益を超えた、学問分野に対する奉仕という側面があり、分子研の研究者（特に教授レベル）に労力を要求するものであるが、これは決して雑用ではないだろう。所長のイニシアティブと求心力のもと、分子研の研究者が協力して（雑用をできるだけ押さえつつ）分子研が外部の研究者の集う場所であり続けるための戦略的努力を、光分子科学研究領域が中心となって行うことを期待したい。極端紫外光研究施設には施設の性格上そういう側面がもともと色濃くあるが、他の分野においても研究者個々の高い研究アクティビティと人的魅力によって外部の研究者を分子研にさらに引き寄せるようになることを期待したい。

7-3-5 西原 寛 運営会議委員

「生命・錯体分子科学研究領域」について

平成 29 年 2 月 9 日に分子科学研究所にて開催された分子研運営会議において、理論・計算分子科学研究領域、光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域、および生命・錯体分子科学研究領域について、各領域の研究主幹が研究組織と活動について報告されました。生命・錯体分子科学研究領域については魚住泰広教授から、最近の研究成果や研究連携を含めてご説明をいただきました。本稿では、外部運営委員として、この領域について意見を述べさせていただきます。

生命・錯体分子科学研究領域は、現在、生体分子機能研究部門（教授 3 名、准教授 1 名）、生体分子情報研究部門（教授 1 名、准教授 1 名）、錯体触媒研究部門（教授 1 名、准教授 1 名）、錯体物性研究部門（准教授 1 名）で構成されている。各研究グループのテーマは、「新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能」、「生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探求」、「生体分子機械の作動原理の解明、設計、創製」、「柔らかい分子集合体で創る人工細胞」、「生物時計タンパク質が 24 時間周期のリズムを奏でる仕組みを解き明かす」、「赤外差スペクトル法による膜タンパク質の機能発現機構の研究」、「有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築」、「有機化学的手法によるキラル分子の設計・合成・機能創出」、「人工光合成システムの構築を志向した金属錯体化学」である。他の 3 研究領域とのバランスにおいては、本研究領域が金属錯体から、高分子、生体系までの広がりを持つ分子や物質の合成、構造、性質、反応、機能を対象にしており、物理から生物までの幅広い領域を包含する分子科学の発展に重要な役割を担っていると判断できる。各研究グループでは、継続して *Nature* やそのシスタージャーナルをはじめとする高レベルの国際誌に研究成果を発表しており（例、M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, V. K. K. Praneeth, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata, S. Masaoka, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” *Nature* **530**, 465 (2016)), 国際的に非常に高いアクティビティを示していると評価される。

分子科学研究所における本領域の立ち位置について敢えて意見を申し上げると、領域内の研究者のアクティビティ並びに研究内容の充実の向上に関して、さらに改善できる余地があると思われる。まず、本領域の両看板である生命と錯体のバランスに関して、生命の方は研究グループが充実しているが、錯体の方は教授、准教授が少ない。分子科学研究所においては、昭和 59（1984）年 4 月に「錯体化学実験施設」が研究所内に発足してから、教授 2 名の体制で日本および世界の錯体化学の拠点として、同分野を先導してきた（北川 進, 分子研レターズ, **74**, 51–53 (2016))。この歴史を踏まえると、現在の教授 1 名の体制は錯体化学の分野を国際的に先導するためには十分とは言い難い。特に、分子科学研究所はこれまで、現在世界で活躍している金属錯体固体物性の研究者を数多く輩出してきたが（例、大塩寛紀教授（筑波大学）、山下正廣教授（東北大学）、北川 宏教授（京都大学）、加藤昌子教授（北海道大学）、藤田

誠教授（東京大学）、塩谷光彦教授（東京大学）、現在の錯体の研究グループの研究の殆どは溶液系に関するものであり、錯体の固体物性化学の研究は皆無であると言える。もし、ユニークな物性を示す金属錯体の合成や物性を研究しているアクティブな研究者が加われば、生命・錯体分子科学研究領域の研究のバランスがより適切になるだけでなく、分子科学研究所の誇りである他に追従を許さない集中した物性科学者や理論化学者との連携や最先端機器や理論を用いる研究が可能になる。したがって、単純な研究人員の増加だけでなく、相乗的な研究による分子科学の領域の創成や革新が期待できる。この観点から、分子科学研究所における次の人事選考において、生命・錯体分子科学研究領域のさらなる充実が分子科学研究所の価値を高め、世界を先導する研究所としての分子科学研究所の地位を確固たるものにし、分子科学を基盤とする自然科学の発展を通して、人類にとって豊かな社会を導くと判断する。

7-3-6 山口茂弘 運営会議委員

生命・錯体分子科学研究領域に関する評価・意見

生命・錯体分子科学研究領域に関し、2月9日に開催されました研究報告会を拝聴し感じた意見を以下にまとめました。

研究内容・分野バランス：生命分野と錯体分野からなる。錯体分野には、魚住グループ、榎山グループ、正岡グループが含まれる。その分野は、担持触媒、有機触媒、錯体触媒と「触媒」の観点からはバランスよく広がっているといえる。そのアクティビティも、魚住らの ACCEL プロジェクトの推進や、正岡らの *Nature* 誌への論文発表など、極めてビジブルで高く評価できる。

特に正岡らの触媒開発は、分子研の看板の一つとなる研究であり、かつ計算科学、測定の観点も含めて包括的に進めることにより、分子研ならではの研究になると期待できる。戦略的な取り組み・支援ができるとよいと思われる。

また、正岡氏自身も、当該分野の若手注目株となっており、無機化学分野で人事が走る際には常に強力な候補になると思われる。最高の転出になるような某かの支援があるとよいと思われる。

榎山氏に関しては、個人的に存じ上げず、その状況はわからないが、分子触媒分野のホープであることには間違いなく、自立性を尊重しつつも、丁寧に育てていただきたい。制度としてだけでなく、必要としている研究者にとって実質的にワークする女性支援プログラムの整備が肝要であろう。

生命科学分野は、生物無機化学分野の青野グループ、構造生物学の加藤グループ、生物物理の飯野グループ、時間生物学の秋山グループに加え、界面化学・超分子化学の栗原グループ、生体分子科学の古谷グループ、タンパク質分子デザインの古賀グループが存在する。詳細は専門外のためわからないが、このように挙げてみると、バランスよく幅広い分野がカバーされているように思われる。新学術領域なども走っており、アクティビティも高いといえる。

領域のあり方・補強プラン：錯体分野と生命科学分野の連携という観点では、必ずしもその意識が高いとは説明からは思えなかったが、潜在的には、栗原グループなど、化学的視点で研究をされているグループが生命分野にも含まれることから、十分に可能であろう。個々のグループが尖った研究をすればよいというものもちろん正しいであろうが、一方で、

一つのグループ内だけでできることも限られつつあるのが現状である。個々のグループが少しずつ幅を広げ、グループ間の重なりをもたせることが研究所の特徴をより顕著にするには重要であり、その意識の共有化が望まれる。また、それを円滑に後押しする仕掛けになるような人事も必要であろう。この観点では、生命・錯体分子科学研究領域に関していえば、錯体触媒分野と生命科学とをつなぐケミカルバイオロジー的な分野が加わればより強くなるように思われる。

生命・錯体分子科学研究領域からは外れるが、合成化学という視点から見れば、分子物性分野に優れた研究者が集まるのが分子研の特徴であるので、その陣容とうまくシナジーを生み出すような機能分子合成の強いグループもやはり一つはあるべきかと思われる。光・電子機能分子材料の合成グループは既にあるものの、マンパワーが確保できておらず、アクティビティが高いとは言い難い。学生をうまく全国から集められるようなカリスマ性をもった人材の登用が鍵であろう。

全体の問題点：全体の研究成果を聞いての驚きは、これだけのビジブルな研究者が集まり、尖った研究により秀逸な成果を多く挙げながらも、各々のグループはかなり小グループで運営されている点である。特に合成系の研究室ではマンパワーの確保が死活問題であり、魚住グループや正岡グループのようにこの点でうまくいっている研究室は成果につながっていることからこの重要性は明白である。昨今、他大学から大学院生を集めるのは益々難しくなっており、小職が属する研究科においても苦戦しているのでその難しさは痛切に感じている。一方、分子研はこれまで、大学院説明会などで工夫を凝らした活動をされ、またアジア等でのリクルート活動においても極めて活発に取り組まれているのもよく知られた事実である。しかし、この観点での継続的かつ変化のある取り組みが必須であろう。周りの大学との研究・教育連携の強化や、地域の高校へのアウトリーチ活動等への「戦略的」な取り組みが益々重要になるように思われる。

以上、散文で申し訳ありません。今後の貴研究所の運営にお役に立てば幸いです。