

5-2 極端紫外光実験施設の将来計画

極端紫外光実験施設(UVSOR)の点検評価は、これまで極端紫外光科学研究系の点検評価の一部、含まれる形で、間接的に行われてきた。今回、外国人評価委員として英国 Daresbury 研究所放射光施設(SRS)の施設長を 1997 年まで勤められた Munro 教授(現職:マンチェスター工科大学教授)にお願いし、UVSOR 施設の外部評価を実施した。以下に報告書を掲載する。

UVSOR 施設の将来計画については「分子研レポート'96」に中間報告したが、Munro 教授の評価結果及び昨今の所内外の情勢変化を踏まえた上で、来年度、さらに具体的に将来計画を策定していく予定である。

5-2-1 Munro 教授によるUVSOR外部評価(原文)

Dear Professor Kosugi,

It is just over ten years since I was last privileged to work at I.M.S. -and at UVSOR- for any substantial period of time. During the intervening period and particularly for the past four or five years. I have watched and appreciated a very significant growth in the scale and the quality of the science program supported by the UVSOR facility.

The Facility:

UVSOR now has 20 user stations (including 2 undulators and 1 superconducting wiggler) operating for periods of up to 3000 hours per years and a total user community of between 600 and 1000 scientists. This is, in itself, a very considerable achievement given by the extremely small number, compared with staff numbers at synchrotron radiation user facilities elsewhere, of dedicated and extremely hardworking scientific and technical staff who support the UVSOR machine, beamlines and stations. In this context, the level of machine improvements including the unique short wavelength FEL and the characterization of the UVSOR operating modes during recent years are a worthy "Highlight."

Future for the Facility:

These achievements of course maintain a challenge for the future since the primary objective of every facility must be to provide at all times, a functioning, reliable and predictable synchrotron radiation source. To be scientifically (and cost) effective it has to provide the maximum possible number of hours per year of photon beams with the optical properties matched to the needs of each different experiment. This is particularly important since many users travel significant distances to use the facility and now the demand for beamtime exceeds the supply. One solution for the future would be to increase the supply of beamtime, although the total number of user stations at least, is probably already at or close to the maximum.

In order to maintain the current position and certainly to generate fresh scientific initiatives resources of extra staff and money are needed by the UVSOR to continue the sound "scrap and build" policy which has already begun. That is, to scrap older, less scientifically competitive stations and replace them with new and (usually!) more expensive ones.

Future growth should be achieved wherever feasible by support from sources *external* to I.M.S. For example outside Research Institutes or Universities, perhaps sometimes with support from researchers based in industry, could be encouraged to provide their

own “private” beamlines or stations (a successful policy called PRT’s and CRT’s in USA and Europe respectively.) Beamlines or stations on UVSOR which are the property of outside Universities or Institutes would be an alternative way in which the level of exploitation and use of the UVSOR could be increased - and this mechanism also gives a very good signals about the competitiveness and merits of the UVSOR facility.

The Research Program:

The overall scientific research output from UVSOR is extremely impressive. Over the past few years the number of reports has increased to more than 110 per year (in 1996) and the number of refereed publications has risen to around 80. The published science in 1996 showed that about one third of the overall programme was related to solid state research. The research on organic conductors, superconductors and ionic solids, together with a substantial number of publications on photoemission and exciton-luminescence studies and also work on glassy materials and catalysts often using XANES for low Z structural information are notable. Some of the work in this area, for example on angle resolved resonant photoemission has been very highly cited in the literature. Around one third of the research publications relate primarily to surface studies and the study of surface chemical reactions, surface structures, thin films, overlayers, interfaces and buried layers. This research incorporates infra-red and soft x-ray spectroscopies and also includes research on the physics and chemistry of surface processing and on photon assisted reactions at surfaces. Many of these activities have considerable relevance to future manufacturing and processing technologies and must be seen as important areas for future investment and growth.

Approximately *one quarter of the UVSOR programme focuses on basic studies in the gas phase* — an area for which the work at I.M.S. has justly achieved world-wide recognition using both laser and synchrotron radiation photo-excitation. Much of this research exploits to the full the great advantage to I.M.S. of “owning” a synchrotron radiation facility. It permits the inclusion of experimental stations of considerable complexity and gives an opportunity to conduct experiments where the timescales involved for data collection are very long. Notable work in this area includes molecular spectroscopy and the study of molecular dynamics, excitation, ionization and fragmentation using a wide variety of angle and energy resolved methods and time of flight studies.

In this work, the links within I.M.S. between theoreticians and experimentalists help play a vital role in defining the good quality of the research programme. Wherever possible, this excellent combination of theoretical and experimental skills within I.M.S. should be further strengthened and increased beyond the Department of VUV Photoscience to cover other areas such as magnetic materials, nano assemblies, molecules at surfaces etc..

The final group of research publications from the UVSOR facility include *the technical and experimental developments*. This category includes machine instrumentation (eg., the helical undulator and UV-FEL), novel research instrumentation (eg. the potentially very important new combined synchrotron radiation /laser research activities) and “multi technique” research where synchrotron radiation is combined with a range of characterization methods (such as STM and perhaps AFM, RAS etc.). The vitality of the UVSOR facility will always depend importantly upon the development of new techniques and equipment such as monochromators and detectors. Whenever possible, the instrumentation resources within other Centres and Departments in I.M.S. should be pooled to achieve some kind of a “critical mass” in this area ,when required, in order to ensure the most rapid completion of new projects.

General Comments:

UVSOR was built about 15 years ago to help create new fields in Molecular Science. It is now a reliable and productive Facility

— of medium to large size — with a science programme which has derived largely from the excellent skills and interests of the staff of the VUV Photoscience Department and the UVSOR facility within I. M. S. There is now an opportunity to capitalise further on this substantial long term investment by seeking wider usage within I.M.S. Staff in almost all I.M.S. Departments could and should be users and certainly must take the lead in stimulating new collaborations with (chemistry orientated) molecular science outside user groups. New broad objectives for example in the areas of new materials, combined laser with synchrotron radiation experiments, surface chemical reactions and thin film studies are well chosen and offer excellent and realistic targets for the medium term.

I think that within UVSOR the level of activity in the area of molecular biological and biochemical spectroscopy and imaging is a little low. Outside Japan, bio-science represents - from 15% to 20% of all SR activity (~25% in the UK) and is predicted to rise to around 30% within 5 years or so across Europe and the USA. Much of this activity is linked to crystallographic structure studies and small angle diffraction and scattering mainly at around 12keV using high energy (>2GeV) storage rings but there is significant interest - and potentially growth - in the use of SXR and VUV radiation for biological spectroscopy and imaging.

In any case, the proximity on the same site as UVSOR of two world class bio-science Institutes (i.e. of N.I.B.B. and N.I.P.S.) - in addition to I.M.S. itself, obviously offers a unique opportunity to create a good bio-molecular science program. There are many potential areas of research using VUV/SXR from UVSOR including, for example, low Z XAFS, VUV/SXR absorption, polarization and fluorescence spectroscopies, laser/synchrotron radiation time resolved studies, radiation damage and VUV confocal and SXR biological imaging etc. The study of wet samples in the VUV/SXR is feasible in principle and could give quite new information to the biologist. The use of far I.R. radiation and future exploitation of I.R. FELs will probably also find many important applications in the study of wet biological samples.

The long term plan ———UVSOR 2?

In the long term, the proposal for any new Facility and, certainly the achievement of a successful outcome will require at least as much “political” as scientific insight. Any new Facility will have to come with an “operational and reliability guarantee”-like SPring 8, ESRF, APS etc. In the USA and Europe at least, the days of hoping that new science might somehow emerge from an expensive and often not fully tested technology have essentially disappeared.

The Okazaki Institutes may be unique in world terms in their concentration of science expertise in the area of the molecular sciences. There are probably more opportunities now to carry out “ground breaking” molecular science using synchrotron radiation than ever before. For the past few years there has been an increasing convergence of attention on the behavior of all systems at a molecular level. This has undoubtedly been stimulated by the great ease with which the atomic structures of exceedingly complex “molecules” (chemical or biological) can be measured by using SR for diffraction and scattering studies.

However it is also driven by the desire to understand and to manipulate large molecular assemblies to carry out new functions -for the greater benefit of mankind and no doubt also of industry. This emphasis on “molecular microscience” has been further enhanced by the recent discovery of many new materials. The desire to fabricate new structures implies working at the interface between small molecule and solid state science. It will be crucial to understand at a theoretical and an experimental level all that science needed to underpin the electronic and communication devices likely to shape human activity in the next century. This will include Si ULSI mesoscopic single electron devices, nanoparticle based lasers, display materials, all types of quantum device, thin layer research, lithography of all kinds, nanofabricated catalysts and no doubt many others.

In Europe and the USA, the current message to potential researchers is that the intellectual challenge to study “real” systems is at

least as great as any other. Resources are a little more likely to be given to projects which are applied or strategic rather than basic (which is sometimes mistakenly equated with open ended and uncontrolled.) Inside Japan there are other (new) storage ring facilities which are capable of undertaking molecular studies but non of which has made it their exclusive objective.

There is a niche now — in world terms — for an insertion device storage ring with small source size, high flux, primary photon range from 6 eV to 1keV and with perhaps a superconducting magnet array to give some access to ~10-20 keV radiation to be exploited primarily for “Applied Molecular Science,” “Molecular Microscience” or “Molecular Materials Science.” The research agenda should include molecular science associated with industrial, environmental and biological fields. It would require the support of researchers in the fields of molecular and material science, coordination chemistry, biochemistry and applied and industrial molecular science (for example, in the areas of surface modification, thin film studies, photo processing, bonding in solids etc.). The reputation and experience of the Okazaki Institutes combined with their location in Chubu / Aichi would perhaps be a significant point in this debate. The ring could specialise on “two color” experiments and exploit to the full these new activities started at I.M.S. There could be some growth stimulated now in the area of materials science covering magnetism and magnetic structures, disordered systems, buried interfaces etc., and perhaps in the use of SR for routine analysis. “UVSOR 2” should support all spectroscopies in VUV/SXR range and would be capable of low Z XAFS and some diffraction and scattering.

The strength of such a Facility would lie in its incorporation of interdisciplinary research efforts beyond the traditional boundaries of chemistry and biology and could include for example pharmaceutical material science and medicine.

In conclusion, whatever the long term plans might be for the future of UVSOR and I.M.S, it is quite clear that the UVSOR facility is already a major player both in Japan and at world level as a source for synchrotron radiation science and technology and that it will continue remain so for a very considerable time to come.

Yours sincerely,

Professor Ian Munro

UMIST

5-2-2 Munro 教授によるUVSOR外部評価（和訳）

（Munro 教授より小杉施設長あての書簡）

私が分子研すなわち UVSOR で研究する機会を得てから10年以上経っている。特にこの4, 5年, 規模の点及び質の点で UVSOR での科学的成果はめざましいものがある。

現施設

現 UVSOR は20のステーション（2本のアンジュレータと1本の超伝導ウィグラーを含む）を有し, 年間3000時間もの運転を行い, 600人から1000人もの科学者をユーザーとして受け入れている。UVSOR光源加速器, ビームライン, ステーションなどの支援業務を一生懸命行っている専任の研究者及び技官が他の施設に比較して極端に少人数なことを考えると, UVSOR 施設の活動は脅威的である。また, 最近の短波長FELや UVSOR 運転モード特性などの光源加速

器の向上は「ハイライト」と呼べる価値の高いものである。

施設の将来

これまでUVSOR施設でやってきたことは当然、将来に向けてのものにもなりうる。なぜならどの放射光施設であってもその主目的は信頼できる光源としていつでも動作し続けることでなければならないからである。科学面から言ってもコスト面から言っても、放射光施設であれば、多種多様な実験の要請に応えることのできる性質の光を可能な限り提供しなければならない。このことは施設を利用しに、遠くからやってくる多くのユーザーにとって特に大切である。また、ユーザーが必要とするビームタイムが供給量を越えていることを考えても大切なことである。需要オーバーに対する将来に向けてのひとつの解決法として、ステーション数はすでに限界に達していても、ビームタイムの供給量は増やすことができよう。

現在の地位を維持し、さらに科学面でのイニシアチブを新しく生み出していくには、施設要員と予算を増やすことが必須である。それによって、すでに始まっている「スクラップアンドビルド」の計画を続けていくことが可能となる。これは、古くて競争力のなくなったステーションをスクラップし、もっと金のかかるステーション(普通は!)に置き換えることだからである。

UVSORの将来の発展を考えると、可能なところがあればどこからでも外部資金を得るべきである。例えば、企業サイドの研究者の支援を得て、企業「専用」のビームラインやステーション(アメリカのPRTとかヨーロッパのCRTとか呼ばれている有効な方法)を作ることは可能ではないか。あるいは、分子研外の研究所や大学の所有になるようなビームラインやステーションも可能ではないか。これらはUVSOR施設の競争力や長所を増す点で好都合なやり方である。

研究内容

UVSORにおける研究業績は全般的に顕著で印象的なものである。過去数年で見ると毎年110件を越えるレポートが出され、80件前後の審査付き論文が出版されている。1996年のActivity Reportを見ると、成果の1/3が固体研究である。有機伝導体、超伝導体、イオン結晶に対して、光電子、励起子、ルミネッセンスに関する発表が多く、また、非晶質物質や触媒中の軽元素周辺局所構造のXANES実験も貴重なものである。これらの業績では、例えば、角度分解共鳴光電子分光の成果は非常に頻繁に引用されている。さらに、成果の約1/3は、固体表面の研究や表面化学反応、薄膜、界面、埋め込み層に関するもので、赤外分光、軟X線分光の研究や固体表面の加工の物理や化学の研究を含む。その多くは未来の表面加工技術として間違いなく発展するはずの重要な分野である。

成果の約1/4は気相分子の基礎研究である。これは世界的に分子研がレーザーと放射光による光励起研究で認められている所以の成果に当たる。その多くは分子研が放射光施設を所有しているという利点を十分に生かして得られたものである。すなわち、かなり複雑な実験ステーションが整備でき、データ収集にも非常に長い測定時間をかけることができる。この分野で価値のある成果としては、角度やエネルギーを分解するいろいろな方法や飛行時間の測定方法などを利用して行った分子分光学、分子動力学、励起、イオン化、解離の研究が挙げられる。

UVSORでの研究において、分子研内で理論家と実験家が協力することは、研究内容の質を高める際に不可欠な役割を果たす。可能な限り、分子研内の理論家と実験家が力を合わせることをもっと強化すべきであり、増やすべきである。そのことによって、極端紫外光科学研究系の枠を超えて、磁性材料、ナノ材料、固体表面分子など他の分野もカバーすることにつながる。

その他の成果として技術的な面や実験手法の面での進歩が挙げられる。これには光源加速器関係の装置(例えば、ヘリカルアンジュレータや紫外域自由電子レーザー)、新しい装置(例えば、非常に重要で有望なものとして放射光とレーザーを組み合わせた研究など)、放射光を他の解析装置(STMやAFM、RASなど)と組み合わせた「複合技術」などが含まれる。UVSOR施設の活力はこれからも分光器や検出器のような技術や装置を新しく開発することに依存するであろう。分子研の他の施設・センターや研究系の装置・設備を、必要となれば可能な限り共同利用することで、新しいプロジェクトを最も速く完了させるのに必要な「臨界質量」に達するようにすべきである。

一般的コメント

UVSORは分子科学に新しい分野を構築するために約15年前に建設された。極端紫外光研究系とUVSORのスタッフの優れた技術と関心の高さによって科学的成果に関して今や信頼性もあり生産性も高い中～大規模施設となっている。分子研内でもっと広く活用方法を探ることでUVSORに対し実質的に長期にわたって資金投入の可能性が増えることになる。分子研のほとんどすべての研究系の研究者がUVSORのユーザーになることは可能であろうし、そうすべきである。また、すべての研究者が分子科学分野(化学指向)の所外ユーザーとの共同研究を新たに進めるように指揮を執るべきである。例えば、新材料、放射光との併用実験に使うレーザー、表面化学反応や薄膜などの研究分野において新しく広範囲な目標をうまく定めて、中期計画として優れた現実味のある計画を打ち出すこと。

UVSORにおいて分子生物学や生化学の分光学やイメージングの分野の活動が少し低いのではないかと私は思う。日本以外では生物科学は放射光利用の15%～25%(イギリスでは～25%)にも達し、ヨーロッパやアメリカでは5年程度のうちに30%まで増えると予想されている。利用の多くは2 GeV以上の高エネルギー蓄積リングで主に12 keV前後での結晶構造解析や小角回折・散乱に関係したものである。しかし、生物学の分光学やイメージングのために放射光軟X線や極端紫外光を利用することも非常に興味を持たれており、今後の発展が有力視されている。

いずれにしてもUVSORと同じキャンパスに分子研以外に二つの世界的な生物科学の研究所(つまり、基礎生物学研究所と生理学研究所)が近接しているということは、優れた生物分子科学の研究テーマを創成するには、明らかに他に類を見ない環境である。例えば、軽元素XAFS、極端紫外光や軟X線の吸収、偏光、蛍光スペクトル、レーザー及び放射光による時間分解研究、放射線損傷、極端紫外光共焦点イメージングとか軟X線生物学イメージングなど、UVSORの極端紫外光・軟X線が利用できる有望な多くの研究分野がある。極端紫外光・軟X線による水分を含んだ試料の研究は原理的に可能であり、生物学者に全く新しい知見を与えうる。遠赤外線の利用や将来の赤外域自由電子レーザー開発によっても、水分を含んだ生物学的試料の研究への重要な応用が多数生み出されるであろう。

長期計画 UVSOR 2

長期計画においては、いかなる新規施設の計画であっても科学的見識に加えて「政治的」洞察力が少なくとも必要であろう。いかなる新規施設であってもSPring 8、ESRF、APSなどのように「運転と信頼性の保証」のもとに建設しなければならない。少なくともアメリカやヨーロッパでは、十分なテストをおこなっているわけではないし金もかかるが、新しい技術によって新しい科学を生み出そうとする時代は過去のものとなった。

岡崎国立共同研究機構は、分子の科学分野を専門として研究している世界にも類を見ない組織であろう。「開拓的」な放射光利用分子科学の研究が実施できる機会が今後、多くなるであろう。ここ数年、すべての研究対象に対して分子レベルで研究するような方向性が増している。このことは疑いもなく放射光による回折・散乱の研究によって著しく複雑な「分子」(化学あるいは生物学)でも原子構造を非常に容易に明らかにできるようになったためである。

しかしながら、人類にとってさらに利益があり、疑いもなく産業にとっても利益になることとして、新しい機能を発現する分子集合体を理解し、巧みに操りたいという願望によっても分子レベルの研究が促進される。「分子マイクロ化学」は多数の新材料の発見によって最近、さらに強調されるようになった。新しい構造を作り上げたいという願望には、分子と固体の科学の境界領域で研究するという意味が含まれている。人類の活動を形作るような電子デバイスや通信デバイスの基礎固めに必要な科学を理論と実験の立場から理解することは21世紀において決定的に重要であろう。Si ULSI メソスコピック単一電子デバイス、ナノ粒子レーザー、ディスプレイ素子、すべての量子デバイス、薄膜、リソグラフィ、ナノ操作触媒やその他多くのものが挙げられる。

ヨーロッパとアメリカにおいて、「実在」の系に対し知的に挑戦することも重要なことであるということが叫ばれている。基礎的なことよりも応用的あるいは戦略的なプロジェクトに対して研究資金が与えられることが少し多いように思える。その際、基礎的な研究は切りがなく手に負えない代物であると誤解を受けていることがある。日本国内では他の（新しい）放射光施設があり、分子の研究を行うことが可能である。しかし、そのどれも分子の研究だけを目的としてはいない。

今、小さな光源サイズ、高い光量で 6 eV ~ 1 keV の光エネルギー域の挿入光源を有する蓄積リング（10 ~ 20 keV のエネルギーも可能な超伝導磁石列もたぶん備えることのできる）を「応用分子科学」、「分子マイクロ科学」、あるいは「分子材料科学」を主目的として開発することは世界的に見ても誰も目をつけていない目新しいものである。研究内容として工学、環境、生物学の分野に関連する分子科学を含めるべきである。分子材料科学、錯体化学、生化学、応用・工業分子科学（例えば、表面修飾、薄膜、光プロセス、固体内結合）の分野の研究者を支援することが必要とされる。これらを議論する際には、中部地区や愛知県における岡崎国立共同研究機構の名声と経験が重要な点になるであろう。蓄積リングは「2波長」実験に特殊化することもできる。また、分子研で始まった新しい研究分野に対して開発することもできるであろう。例えば、磁性や磁気構造、無秩序系、埋め込み層などの材料科学分野や放射光を利用した日常的な材料分析などに今、発展しているものがある。「UVSOR 2」は極端紫外・軟X線の領域のすべての分光学を支援すべきであるし、軽元素 XAFS や一部の回折・散乱実験も可能にできるであろう。

このような施設で強調すべきなのは伝統的な化学と生物学の境界を越えて学際的な研究を含めることにあり、さらに例えば、薬剤学や医学も含むことができよう。

結論として、UVSOR と分子研の将来に対する長期計画がいかなるものであれ、現 UVSOR 施設は日本と世界の両方において放射光科学のための光源として重要な役割をすでに果たしており、今後もまだまだ重要な役割を果たし続けるであろう。