

## 5 . 将来計画及び運営方針

### 5-1 電子計算機センター将来計画

#### 5-1-1 現有計算機の構成と利用状況

平成11年1月現在の利用者の総計は約700名、研究課題は174件である。電子計算機センターの計算機システムは、平成6年1月からスーパーコンピュータ NEC SX-3 が、平成7年1月より並列計算機 IBM SP と汎用高速計算機 NEC HSP がそれぞれ導入された。この時から、オペレーティングシステム (OS) も UNIX に統一された。また汎用演算性能および並列演算性能を増強する目的で、平成8年9月より NEC HPC 計算機、平成9年10月より日立製作所 SR2201、平成10年9月よりシリコングラフィックス社 Origin2000 を導入し公開運用を行っている。平成11年2月より、高速汎用計算機の HSP は NEC SX-5 に更新され、3月から試験運用を開始、4月より本格的な課金運用を行う予定である。

SX-3は3個のベクトル演算器を持ち最高性能は19.2ギガフロップスである。また、2ギガバイトの主記憶容量とジョブの一時作業領域として高速に読み書きが可能な RAID ディスクを約60ギガバイト持つ。現在では大規模な配置間相互作用(CI)計算や分子動力学計算など、ベクトル化率が高くしかも大容量の主記憶と一時記憶装置を必要とする大型ジョブを中心に利用されている。

分散メモリ型並列計算機 SP2 は、平均100メガフロップスの性能をもつ48個の演算装置 (CPU ノード) から構成されており、各CPU ノードは40メガバイト / 秒以上の高速度で互いに通信を行うことが出来る高速ネットワークスイッチにより結合されており、メッセージパッシング型の並列計算プログラムの実行を効率よく行うことが出来る。SP2は現在約3分の2のCPU ノードは主に逐次実行型のジョブによって利用され、残りの3分の1は並列計算ジョブ用に利用されている。SP2の導入後約4年が経過し現在では並列ジョブ処理環境を利用するユーザの数が徐々に増え、また利用法がよりいっそう高度化する傾向が見られる。新汎用システム SX5 の利用度の向上に伴い、並列ジョブの割合を増し、利用者の並列プログラムの開発・利用を促進する。

新汎用高速演算システム SX-5 は、ピーク性能が32ギガフロップス以上の高性能ベクトル計算機であり、8ギガバイトの主記憶装置と約150ギガバイトの RAID ディスクをもつ。この計算機は、SP2の逐次専用ノードでは実行が困難な大容量メモリと一時作業ディスクを必要とするジョブの実行に利用され、その意味でスーパーコンピュータと並列コンピュータそれぞれの役割を補間する重要な役目を果たすことが期待されている。NEC HPC は1ギガバイトの主記憶と2ギガバイトの拡張記憶装置を有し、中規模なベクトルジョブの処理に利用されている。

分子研計算機センターのCPU サーバーとしての能力は平成6年1月にはそれまでのおよそ9倍、平成7年1月には平成6年1月以前のおよそ14倍になったが、年間平均でもその全CPU能力の約70%が利用されており、常時数十件の待ちジョブが待機している状況になっている。当センターの計算機は、365日24時間運転を行っているため、実稼働率が7割を超えた場合には、平日の日中には常に待ちジョブがある状況となる。特に学会前の混雑時には投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況も発生している。平成11年4月から本格稼働を予定している汎用高速演算システム SX-5 のCPU能力により、一時的とはいえ、このような事態が緩和されることが期待される。

#### 5-1-2 平成11年度の計算機システム更新

平成9年度、文部省に概算要求をしていたスーパーコンピュータ借料の増額によるCPU能力の増強は認められなかった。また導入一時経費もつかないという厳しい結果となったため、外部委員を含む「スーパーコンピュータ検討小委員会」の結論に従い、平成11年1月に機種を更新することを断念し、更新を1年延期することとした。

スーパーコンピュータ検討小委員会では、スーパーコンピュータの更新を1年延期したことから、汎用システムの機種更新を1年早めて、平成11(1999)年2月に行うことが望まれるとの結論を得た。これを受けて、岡崎機構管理局及び文部省と協議の結果、現有の汎用高速演算システムであるIBM SP2とNEC HSPを平成11年2月に新たな機種に更新するための準備を進め、最高演算性能が5ギガフロップスを上回る機種の導入を検討し、スーパーコンピュータに準ずる調達手続きを採用することとなった。平成10年5月1日に最終仕様書が完成し、6月22日入札、7月7日開札が行われ上記のSX-5に決定した。現在は、公開に向けて汎用高速演算システムの最終調整作業を行うと同時に、更新を1年延期したスーパーコンピュータシステムの調達手続きが進行中である。

#### (1)スーパーコンピュータシステムに要求される性能

スーパーコンピュータの更新目的の第一は、分子科学分野において大学等では実行が困難である大規模なベクトル並列計算を行う計算環境を整備することにある。一方、現状のように投入したジョブが実行されるまでの待ち時間が数日に及ぶ状況を早急に改善しなければならないため、中小規模のシリアルジョブの実行スループットを向上させる配慮も重要である。このように、ある意味では相反する更新要求を、レンタル期間中の運用変更によって適応可能とする計算構成を選択することが重要である。すなわち、高い単体演算性能を持つ計算ノードをできる限り多数導入し、CPUリソースの分割運用によって、大規模ベクトル並列計算の実行と中小規模ベクトル計算の両方が干渉することなく実行できることが重要である。これを実現するためには、システム全体として大容量の主記憶と一時作業ディスクが必要である。

具体的には、現有スーパーコンピュータの(SX3/34R)単体CPU能力を上回る8ギガフロップス程度の計算ノード48以上が必要であり、16ノードと32ノードのようにリソースを分割運用する。主記憶は128ギガバイト以上、作業ディスクは1500ギガバイト以上必要である。平成8年に発足した次期スーパーコンピュータ検討委員会では単体CPU性能を重視するかCPU台数(並列計算の規模)を重視するかで活発な討論がおこなわれた。並列度の高いプログラムへ比較的容易に移行が可能な分子動力学(MD)分野の研究者からはCPU台数を重視すべきとの意見がだされ、一方、大規模な分子軌道(MO)計算や配置間相互作用計算などに代表される並列化が困難な電子状態分野の研究者からは単体のベクトル演算性能と大容量の主記憶および拡張記憶装置の重要性が示された。上記のCPUリソースの分割運用は、大規模ジョブの実行と中小規模ジョブのスループットを運用によりバランスをとってゆく観点としてだけでなく、MD計算とMO計算分野の要求に柔軟に答えて行くための方策としても重要である。

又、CPUリソースの利用状況によっては、超大型計算を奨励する新しい運用方法の導入も検討する必要がある。従来の課金制度とは違う形で、研究課題を募集し、従来のCPU時間やメモリー利用制限の枠を大幅に越えた計算機利用を可能にして、優れた研究成果を引き出すような施策の検討である。このように次期スーパーコンピュータシステムは、その利用目的が汎用高速演算システムと明確にことなり、超大規模計算を実行できる環境を常に意識した運用体制が必要である。

#### (2)センターの運用方針

前年度の報告にもあるように、計算機センターの利用者は大別すると4つに分類される。

グループA: 分子研理論部門(計算センター含む)。

グループB: 所外の大きな理論グループ。

グループC: 所外の小さな(一人ないし三人程度の若い)理論グループ。

グループ D: 実験を主体とする研究グループ。

それぞれのグループで計算機を利用する分野・形態や、必要な CPU 時間に相違があり、どのグループを重点的にサポートして行くかの議論には慎重を要す。最近では、高速ワークステーションの普及によって、研究所内外のいくつかの研究室単位で強力な計算環境を持つことも一部では可能になってきている。そのような研究グループがさらに強力な演算性能を必要とする研究プロジェクトで成果を上げるためには、グループ A と B に一層力点を置いた運営方針を取ることが望ましい。一方、グループ C と D の研究者にとって、本センターは研究遂行上不可欠なものであることも事実であり、今後とも適切な配慮が必要である。特にここ 1 ~ 2 年は、グループ D の実験を主体とする研究グループの利用が急増しており、このような研究室において高性能のワークステーションを自前で運用管理してゆくための人的・技術的負担を回避する上でも、本センターの計算機資源は重要である。

### (3)世界のスーパーコンピュータの動向とセンターの立場

現在の計算機は様々な観点から分類することができる。たとえば、単体 CPU 性能の観点からは、1 CPU のベクトル性能が 5 ギガフロップス以上の高価な計算機、4 ギガフロップス以下のもの、そしてワークステーションに代表されるベクトル演算器を持たない安価なものという分け方ができる。また、並列度の観点から見ると、並列度の高い（3 桁以上の）超並列計算機、並列度の少ないもの、並列計算ができないものという分け方ができる。また CPU とメモリの構成の違いからは、全ての CPU がシステム全体のメモリを共有する「共有メモリ型」と各 CPU がそれぞれ局所メモリを持つ「分散メモリ型」、そして分散メモリのハードウェア構成を持ちながら基本ソフトウェアにより論理的に共有メモリ計算機として利用できる「分散共有メモリ型」に分類することができる。さらに、並列計算機では CPU 間を結ぶ通信経路のトポロジーと通信性能の違いによって幾つかの形態がある。

欧米では、計算機アーキテクチャの研究を専門とする分野はもちろんのこと、科学計算分野においても単体 CPU 性能の向上に頼る時代は終わり、基本ソフトウェアと高速通信技術における並列計算技術の発展に将来の大規模計算環境を委ねる機運が高まっている。ここで並列化の基本ソフトウェア技術として分散共有メモリ計算機におけるマルチスレッドや分散メモリ計算機のメッセージパッシングが挙げられる。たとえば米国では 1996 年より Accelerated Strategic Computing Initiative (ASCI) を国家プロジェクトとして提案し、コンピュータメーカーと国立研究所が共同で大規模な超並列計算機の開発を推進している。我が国でも欧米の計算機動向に追従し、かつて単体 CPU 性能で世界 1, 2 位を争っていたスーパーコンピュータメーカーも、超並列計算機のみ開発に方針転換している。このような状況の中、電子計算機センターは将来にわたり最先端の大規模計算環境を分子科学者に提供することを最重要と考え、計算機アーキテクチャの動向に注視する努力を怠ってはならない。一方、現状では並列コンパイラや並列プログラム開発のための支援ツールが未成熟な状況であることもまた事実であり、分子科学計算分野はあくまで高速計算機を研究道具として利用し続ける 1 研究分野であり、安易に並列計算機一辺倒の運営に踏み切ることもしなければならない。

## 5-1-3 分子研所内及び岡崎国立共同研究機構におけるセンターの役割

### (1)分子研における計算分子科学分野の重要性とセンターの役割

今日、理論化学的手法の発展と計算機の進歩によって、従来では不可能と考えられていたような複雑な系を不必要なモデル化を行わずそのまま研究対象として扱うことができるようになってきている。分子科学における計算科学は、単に実験の解析にとどまらず実験の先導的な役割を果たしており、90年代の後半に至り計算的手法の重要性は質的転換を遂げたと言える。21世紀において計算分子科学は一層の発展が期待されている。特に、分子研の理論部門は平成

7年度から1部門が増設され、計算機センターのグループを加えると専任の研究グループは7になった。各研究グループは独自にワークステーションを持ちプログラム開発や応用計算を進めているが、同時に計算機センターの計算機利用の中で大口利用者でもある。計算機センターは、研究所内の理論グループに卓越した計算環境を提供していく必要がある。そのためには、所外には公開しない特別な運用を行う計算機の導入も検討していく必要がある。その一環として、理論研究系と計算機センターのスタッフが中心となって、たとえば文部省研究基盤重点設備費に「計算分子科学の展開」を要求していくなどの努力も必要である。また平成10年度より、学術振興会および科学技術振興事業団の外部資金によって所内理論グループが導入する計算機の維持管理業務を、電子計算機センターで行うことも試行されている。これは、計算機センターの計算機管理技術と電源・冷却設備等の設置環境を考慮した方策の一つであり、今後このような所内グループ専用計算機の導入がますます増えることが予想されることから、業務分担及び維持費等についての制度化が必要である。

1986年のベクトル型スーパーコンピュータのセンターへの導入は、分子動力学計算と反応動力学計算分野の研究者に大きな刺激を与えた。この様に将来の超並列スーパーコンピュータの導入が、新たな分子科学計算分野の進展を促す可能性も十分にあり、前述のように超並列時代を見据えた方法論の開拓が重要である。計算機のハード・ソフトの両面の進歩は速く、またその最新の成果を研究に取り入れることによって、質的な変化をもたらす研究を進めることが可能になる。計算機センターの現スタッフはあくまで計算機利用者の一員として、計算機アーキテクチャの動向や並列ソフトウェアの進展状況を冷静に判断し、プログラム開発やアルゴリズム理論の非専門家である分子科学者に適切な計算環境をバランスよく提供するための人員構成をとっている。一方、計算機の発展に密着しベクトル並列型、超並列及び分散共有メモリの並列計算機などの新しいアーキテクチャの計算機の能力をフルに活用するためのスタッフも重要であり、分子科学計算アルゴリズムの開拓や、計算機アーキテクチャの特徴を生かした分子シミュレーションプログラムの開発研究を行うことのできる研究グループが、計算機センター内に新たに1グループ（助教授1，助手1，技官1）は必要である。また研究要素として大規模なソフトウェアの構築を含む研究開発テーマなど、多くの若手研究者を必要とする分野（この分野は欧米に依然立ち後れていると言わざるを得ない）では、研究系教官と共同でプロジェクト研究課題を提案し、大学等では困難な課題にも挑戦してゆく必要がある。

## (2) 岡崎機構における分子科学境界分野の重要性とセンターの役割

スーパーコンピュータを中心とする本センターの計算機システムは世界的な観点で見ても、分子の電子構造と反応性・機能、クラスター・液体・固体表面など多くの分子科学分野で多大な研究成果を生み出してきた。計算機の演算速度と記憶容量の向上は、研究対象となる物質範囲を広げることが出来、さらに新分野の開拓に向かうことが出来る。例えば、分子科学研究所理論研究系の二つの研究グループと生理学研究所分子生理研究系のグループが中心となり、大規模分子動力学計算及びモンテカルロ計算によるタンパク質の3次元構造解析が平成10年度学術振興会未来開拓事業の新規テーマとして開始され、研究業績を上げ始めている。このように分子科学と生理学の境界領域における計算シミュレーション分野では、近年目覚ましい発展があり、今後、環境ホルモン、生理活性物質の構造・機能の解析などへの応用が切望されており、分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の学際研究領域である生命環境科学研究では、分子レベルでの生体物質のシミュレーションはもちろん、神経系、脳研究といった生理科学の領域までも計算対象とした高性能計算機システムの共同利用が始まりつつある。この様に計算分野自身が今までの少数多体系としての分子科学から分子科学と生命および環境科学の境界領域に拡大するなかで、今後、本センターの計算機システムの役割は今まで以上に重要となるため、近い将来において他2研究所の計算機室と協力し、岡崎機構の計算機センターとしての位置づけを真剣に議論する必要がある。

#### 5-1-4 国際分子科学計算センターとして

分子研理論部門における外国人長期滞在研究者の割合は高い。インターネットを通じての計算機利用が可能になった今日、これら長期滞在者は帰国後も共同研究が継続されるようになっている。このようなインターネットを通じた国際共同研究も進めていく必要がある。また、現在分子研が概算要求している「多国間国際協力事業」の一つとしてプロジェクト方式の研究課題を新たに設定することが可能であろう。

アジア諸国を中心に、計算環境が十分備わっていないが潜在的に優秀な分子科学研究者を持つ国々の研究者に対し、プロジェクト申請の道を開き、国際的な計算機センターへ飛躍させる事は今後の検討課題である。この制度の実現のためには、計算環境の一層の充実が何より前提であり、さらに課題審査制度の確立、専任の助手（出来る限り外国人の）の採用など多くの課題を解決しなければならない。

#### 5-1-5 センターライブラリ開発の研究プロジェクト化

センターライブラリ開発制度を見直し、件数を絞って集中的に開発支援できる形にしなければならない。外部研究者に開発プロジェクトを公募すると同時に、予算的措置を伴ったプロジェクト開発制度を発足させることも検討する必要がある。

#### 5-1-6 QCLDB の事業化

センターのスタッフが過去に積極的に参加し、量子化学者のみならず広く化学・物理学研究者から高い評価を受けている QCLDB ( Quantum Chemistry Literature Data Base ) の開発に対し今後も予算的にはもちろんのこと、センターの業務として支援する体制をとり続ける必要がある。現在、米国のいくつかの国立研究機関では、WWW ( World Wide Web ) を通じてその機関が作成したデータベースを全世界に公開している。このような形の全世界の学会に対する寄与は、特に生物学や素粒子・原子核の分野などではその研究機関の一つの「業績」として高く評価されている。

我が国ではデータベース作成による世界の学会への寄与は、QCLDB を除いて皆無であると言われているが、平成 9 年夏からは QCLDB も、WWW を通じて登録制の公開を試験的に開始した。この公開に対する世界中の研究者からの反響は著しく高い。この公開をハード・ソフトの両面で長期的に安定運用をするためには、正式に分子科学研究所の事業の一つとする必要がある。1) データベース作成・管理・運用のためのハードウェア整備、2) データベース作成のための謝金と事務費の確保のために早急に予算的措置をとる必要があり、平成 12 年度概算要求を行う予定である。もちろん QCLDB を開発・作成している QCDB ( Quantum Chemistry Data Base ) 研究会と緊密に連携をとってこの事業は進めなければならない。

#### 5-1-7 情報ネットワークと計算機センター

平成 7 年度末に完成した岡崎国立共同研究機構の超高速 ATM ネットワークシステム ( 新 ORION と呼ぶ ) によって、分子研のスタッフ・学生の電子メール・インターネットの利用は著しく向上し、ほとんどの研究者にとって情報収集と発信のための不可欠な手段になっている。計算機センターは機構情報ネットワークの構築と運用に当初はたずさわらなかったが、平成 7 年度に情報ネットワークの担当技官が採用され、センターに配属されたのを契機に、センターは分子研内のネットワーク業務に関与するようになった。計算機センターの主要目的は、分子科学における計算科学の支援であり、情報ネットワーク、特に電子メールなど情報交換を支援する業務はこれまで軽視されてきた。これからも、このような業務は主要業務とはならないが、上述のように、研究所内はもとより国内外との高速情報交換網は、

計算科学を推進する上に非常に重要な基盤設備であり、また、情報ネットワークを企画・管理・維持するのに必要な知識や技術は計算機センターのスタッフに要求されている知識や技術と多くの共通部分があるので、センターは、分子研内はもとより、岡崎国立共同研究機構内のネットワークの企画・運用に関与する必要がある。

センターの計算機を国内外の研究機関から高速かつ安定に利用するために、情報交換速度を主要大学間と同じ速度に常に維持していく必要がある。そのための一つの手段として計算機センターの予算の中で学術情報センターへの専用回線を契約する可能性も追求する必要がある。

## 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。

## 5-3 岡崎国立共同研究機構の将来計画と現在の到達点

### 5-3-1 これまでの経過

分子科学研究所・基礎生物学研究所・生理学研究所の3研究所が合同で進めた岡崎国立共同研究機構将来構想懇談会およびワーキンググループを中心に機構全体の一年以上にわたる討議を経て、平成9年6月に「岡崎国立共同研究機構将来構想」がまとめられた。その内容は、機構を構成する3つの研究所独自の将来計画と共同歩調をとる形で「分子生命体科学共同研究推進センター（仮称）」のE地区への設立を提案するものであった。それは、1) 近年の学問の新しい発展に伴い、物理学及び化学と生物学・生命科学にまたがる研究領域が出現し、2) 三研究所の研究者間の交流が自然な流れとして増大している現状と、3) 生体の機能発現を個体や細胞レベルのみならず分子のレベルで解明しようとする研究が活発に行われ、分子科学研究所との協力の必要性が深く認識されるようになってきたこと、4) 分子科学研究所においても新しい機能を有する分子物質の探索・分子設計に関連して、蛋白質をはじめとする生体分子の構造と作用機構に関する分子レベルでの研究が盛んになりつつあることが主な理由であった。こうした機構内での動きを受けて、平成10年度に向けた概算要求では、E地区で行う研究の柱の一つと位置づけされる脳研究に関連する組織が生理学研究所に認められた。

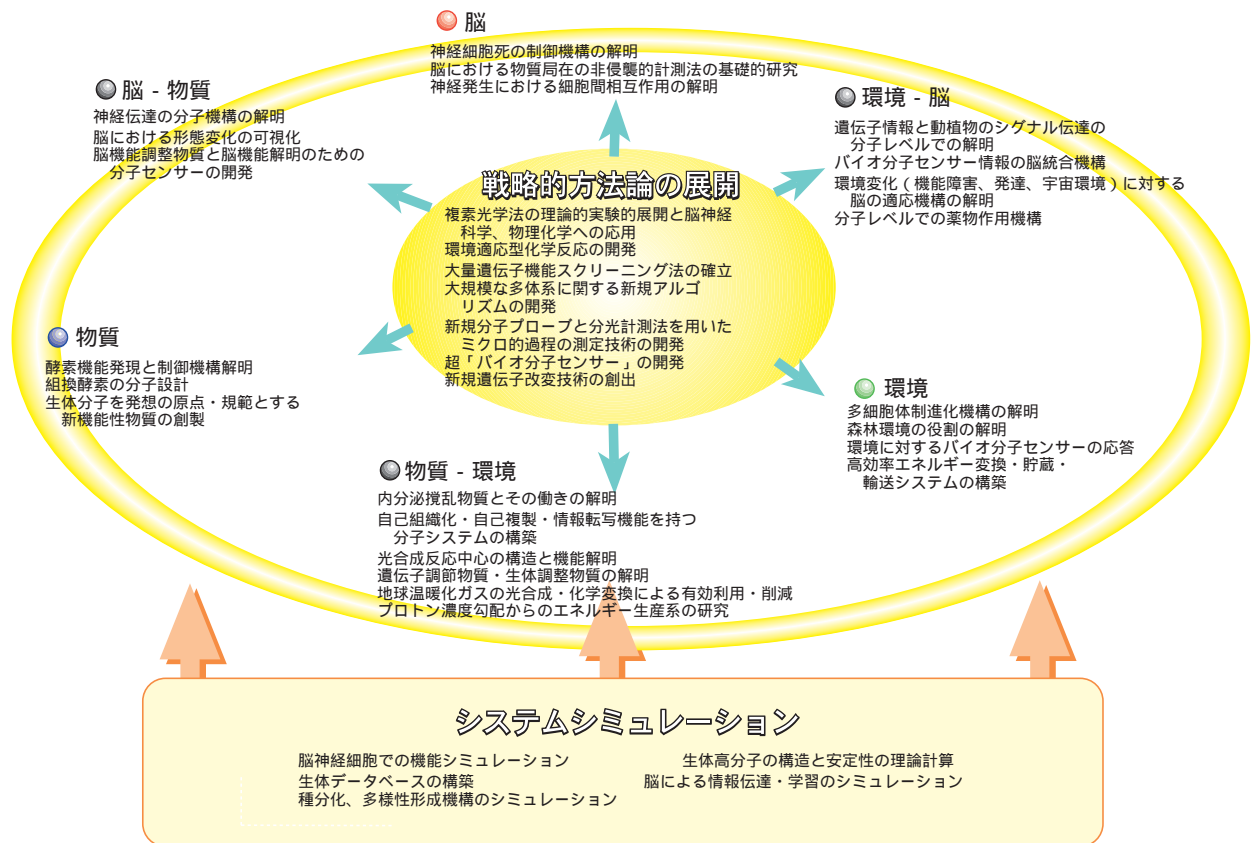
### 5-3-2 平成10年の活動

平成10年初旬からは、それまでの到達点をふまえて三研究所長・機構長の諮問機関として「分子生命体科学テーマ懇談会（略称：テーマ懇談会）」が発足した。テーマ懇談会は、E地区で三研究所が協力・共同して展開すべき研究領域・研究対象・研究の切り口等を中心に議論が交わされた。その結果、1) 具体的な研究ターゲットとして「脳」「物質」「環境」という大きな研究の柱と共に、その境界領域としての「脳-物質」「物質-環境」「環境-脳」を加えた六つの研究領域・対象の大枠が提案された。さらに、2) そうした研究を展開するための新たな方法論を開発する「戦略的方法論の展開」および、3) 研究の基礎を支える「システムシミュレーション」というフェイズの異なる切り口からの研究対象が加えられた。それぞれのフェイズの異なる領域における当面する具体的な研究課題と1)～3)の相互の関連を次頁の図にまとめた。

図に示した様に、「戦略的方法論の展開」は分子生命体科学共同研究推進センターにおける研究展開の中核を形成することが期待されるものであるが、複素光学法の理論的実験的展開・環境適応型化学反応の開発・新規分子プローブと分光計測法を用いたミクロ的過程の測定技術の開発等は、分子科学者の参画無しには達成できない課題である。それと同時に、測定対象としての脳神経や酵素・遺伝子等の取り扱いは基礎生物学・生理学の研究者の協力が必須となる。一方、実験の出来ない脳神経細胞での機能シミュレーション・生体高分子の構造と安定性の理論計算・内分泌攪乱物質と遺伝子調節ホルモンの相互作用などの理論科学の分野においても、分子科学者からの積極的な参加が求められる課題が多数提案されている。

テーマ懇談会での議論の期間中に、いわゆる環境ホルモンと呼ばれる内分泌攪乱物質の問題が社会的に大きくクローズアップされ、関連する研究の緊急性が検討された。その結果、分子生命体科学共同研究推進センターを中心とするE地区利用を前提とした新たな研究組織として、「生命環境科学研究センター」を三研究所の共同提案として平成11年度に向けた概算要求事項とすることを決定した。

# 分子生命体科学共同研究推進センター研究課題



## 5-3-3 生命環境科学研究センター

### 三研究所における関連研究の現状

分子科学研究所では、1) 金属錯体を用いて、地空温暖化の原因物質である二酸化炭素を炭素-炭素結合生成を伴った有用化合物に変換するプロセスを構築した。さらに、2) 人工酵素の設計による化学合成プロセス高効率化の研究で、酸化反応を行う蛋白質の構築に成功した。この人工酵素は、天然に存在する酸化酵素に匹敵する高い選択性と触媒能を有していることも明らかとなった。

さらに、環境情報伝達物質と生体機能という観点から、情報伝達物質の分子レベルでの生成機構と生体情報伝達物質を感知するレセプター蛋白の構造と機能解明を現在進めている。

一方、基礎生物学研究所では、生殖線の発生に不可欠な転写因子を世界に先駆けて発見し、この転写因子の遺伝子を破壊することで動物固体から生殖線が完全に消失することを示した。この研究は、内分泌攪乱物質の生体内作用機構解明の大きな足がかりとなるものである。

生物と環境との関係は多岐にわたるが、その基本は、生体を取り囲む環境変化に対する生物の応答である。その複雑な応答の解析の基礎となる全遺伝子、つまりゲノム構造の全配列決定に大きく寄与し、解析を行い、データベースを構築してきた。

生理学研究所では、生体内外の環境に対するバイオ分子センサーの発見あるいは機能解明を行っている。すなわち、細胞が内外の環境の変化を浸透圧変化による容積変化として感知し、正常容積に復帰する細胞容積バイオ分子センサーが、容積受容性Cl<sup>-</sup>チャンネルであることを明かした。さらに、カプサイシンに対するレセプター遺伝子のクローニ

ングから、それがチャンネル機能以外に温度や酸性度を感知するセンサーとして働く事、化学物質やウイルスによる肝硬変に至る一連の化学反応に対して、肝障害情報を感知し肝星細胞の活性化に関与するのがNa・Ca交換トランスポーターであることを明らかにしている。

#### 生命環境科学研究センターにおける研究内容

本センターでは、化学物質を最初に生体がどのように受け入れ、生体に進入した化学物質がどのような影響を及ぼし、生命維持活動によって化学物質がどのように分解されて体外に排出されるのかという環境問題に取り組み、その影響の有無によりどのように化学物質が有害なのかを解明し、普遍的で総合的な成果を上げるために、研究の展開を下記の4テーマで行う。

##### 1) バイオ分子センサーによる環境適応機構

色々な化学物質が生体に入り込む際に最初に感知する生体センサーと生体の応答

##### 2) 内分泌攪乱物質とその働きの解明

生体内に進入した化学物質と受容体の相互作用・生殖機能形成過程への作用機構

##### 3) 環境適応型化学反応の開発

環境ホルモンを含む有害化学物質の本質的な削減と、生体に進入した内分泌攪乱物質の生体内代謝機構の解明による環境中の環境ホルモンの分解プロセスの開発

##### 4) 環境生体データベースの構築

動物実験・遺伝子工学的な実験では達成し得ない分子レベルでの素過程解明を目指すシミュレーション技術の開発

#### 4 研究テーマの関連性

生命活動の維持にも影響を及ぼす有害な化学物質の作用を解明するためには、1) 生体がどのように化学物質を受け入れているのか、2) 受け入れた後どのようなメカニズムで障害を引き起こすのか、3) どのようにして体外へと排出しているのか・有害物質をいかに削減するか等の研究を進める。さらに、4) これらの成果等のデータベース構築による影響予測を合わせて行う必要がある。

これらの研究は、相互に連携を計りながら一体のものとして行う必要がある。個々のテーマの成果が互いに他のテーマの研究成果を生み出すための土台となりうるような関係であるため、4テーマの研究を同時に行うことにより、初めて書記の目的が達成出来るものである。

#### 5-3-4 まとめ

この3年間にわたる岡崎国立共同研究機構の将来計画策定のための討議を通じて、三研究所がそれぞれの研究所独自の研究の展開と併走する形で、三研究所が協力・共同する新たな研究の展開を目指す研究課題・方法論と、E地区の利用を視野に入れた物理的な研究施設の設置が提案されている。平成11年度に向けた概算要求では、「生命環境科学研究センター」の新設要求を行うに当たって、現段階では形式的に基礎生物学研究所にその組織を置く事になっている。しかしながら、この組織はE地区に展開を予定している「分子生命体科学共同研究推進センター」を中心とした三研究所の将来計画の展開の線上にあるものであり、将来的には、機構全体の組織として再編されることが前提となっている事を最後に付記するものである。