

5 . 将来計画及び運営方針

分子科学は分子の構造・機能・反応を解明し、分子スケールでの新しい物質概念を創製する言わば「広義の物質科学」として定義される分子スケールの基礎科学である。20世紀において、量子力学を基盤に原子・分子についての詳細な研究が展開された結果、物質の基本単位としての分子が認知される存在となった。しかも、生命体にまで及び実に幅広い分子の世界が自然科学の諸階層を跨がった重要な基礎科学の研究対象である事が認識される様になった。今日では、極低温でしか存在しない極めて弱い結合をもつ分子錯体から、マイクロメートルに達する巨大分子集合まで、多種多様な分子が生成され、そのようなさまざまな分子の示す構造、物性、反応性などの精緻な測定、操作が可能となった。この結果、環境科学、生命科学を含む多くの分野にも分子の概念が適用され、分子レベルでの研究が根付く時代となるうとしている。いいかえれば、分子スケールの科学、つまり分子科学は21世紀の科学技術の発展に基盤的役割を担っている。

分子科学研究所は、この四半世紀間、B地区においてわが国の分子科学発展の拠点としての役割を果たしてきたが、新世紀においてはE地区への展開を含めて新しい物質の概念を提供しつつ、アジアを含む多国間の国際共同研究拠点として科学技術の広汎な分野に影響を与える高等学術機関としての役割を果たさねばならない。特にB地区では極端紫外光実験施設と分子制御レーザー開発研究センターの基盤設備を利用した光分子科学および化学反応ダイナミクス研究の新たな展開、E地区においては分子物質開発研究センターおよび統合バイオサイエンスセンター（平成12年度に発足した岡崎3研究所の連携組織）の基盤設備を利用した物質科学の新たな展開に実験研究者の全勢力を注がねばならない。実際、すでに分子科学研究所では外部の共同研究者のみならず、内部においてもこれまでの研究系の枠にとらわれない共同研究の輪を広げることで、新しい展開を図っているところである。また、分子科学研究所電子計算機センターが発展する形で平成12年度に創設された計算科学研究センターを基盤設備とする理論分子科学研究も他の組織にはない分子科学研究所の際だった特徴として強化しなければならない。

このような将来計画を推進していく上で、現在、最も重要なのはB地区では極端紫外光実験施設の高度化および組織再編である。また、E地区では単一分子を基本とする分子素子の基本概念の確立である。極端紫外光実験施設においては平成12年度、外部評価（4章を参照のこと）を受け、高度化および組織再編の緊急度が非常に高いとの指摘を受けている。また、平成13年度から、東北大学金属材料研究所、高エネルギー加速器研究機構物質構造研究所、東京大学物性研究所、京都大学化学研究所と本研究所が物理と化学の枠を越えた新しい物質科学の分野開拓を目指して共同研究の試みを開始することになっており、分子素子研究の重要度が非常に高まっている。

この25年間の活動の場であったB地区に加え、E地区への展開が分子科学研究所の新しい発展の可能性を大きく膨らませてくれている今、分子科学研究所は将来計画委員会において、以下のような将来構想の枠組みを固めた。

- (1) 光分子科学
- (2) 物質科学
- (3) 化学反応ダイナミクス
- (4) 理論化学分野
- (5) 多国間国際共同

(1) 光分子科学

B地区において、極端紫外光実験施設、分子制御レーザー開発研究センターなどを中核として、21世紀の重要な柱

としての光科学の新展開を図る。レーザーに加え、放射光という地上には存在しないエネルギー領域の光を持つことは、これからの分子科学研究に大きな利点を与えるであろう。本研究所の放射光施設は国内の多数の利用者を抱え、活発な研究が展開されているが、設置17年を迎え性能的に問題を生じつつある。現段階で、高度化を図り、「地上にない光」としての放射光を利用した、新しい光分子科学の研究が展開されることは、本研究所にとって第一に取り上げられるべき緊急の課題である。

光分子科学に対する新展開には光源の開発に加えて、従来の枠組みを越えた共同研究体制の推進が極めて重要である。共同研究体制を担う極端紫外光実験施設および分子制御レーザー開発研究センターは分子科学が必要とする先鋭化した放射光源およびレーザーを開発しつつ、電子構造、分子構造、極端紫外光研究系との共同研究を推進している。この2つの施設はさらに広範囲の研究グループが参加する協力体制の確立に寄与することで、極微空間計測など近年急速に進歩しつつある計測手段との結合も積極的に試み、化学反応制御、ナノ領域の単分子測定と機能制御など分子科学の根幹の問題へ挑戦する事が必要である。

(2) 物質科学の新展開

我が国の分子物質科学は本年度の白川英樹先生のノーベル賞の受賞にみられるように非常に高いレベルにある。分子科学研究所は、E地区において、分子科学と生命科学の新しい連帯の場を持つが、新しい物質観を構築する場として、分子集団研究系、関連領域研究系そして錯体化学実験施設それらと連携をもつ分子物質開発研究センターなどを中核とした、新しい研究環境を創設する。分子スケールでの物質科学という立場から、物理、化学、生物の共同作業によりナノサイエンスをも包含するポストナノサイエンスともいべき分子科学の新領域の開拓を目指している。具体的には、分子を単位とする分子素子、分子エレクトロニクス、分子情報伝達系の設計と構築のみならず、それらの物質系の情報発生システムなど、人工物ながら息づいているがごとき系の構築と計測、制御が目標である。さらに統合バイオサイエンスセンターにおける戦略的方法論および生命環境研究領域との連携による生命科学における新たな研究展開を広い意味での物質科学の視野に立って進める予定である。このような物質創製の場が、物理、化学、生物、そして情報科学などの異分野間の国内外の共同研究の場としてE地区に展開し、分子物質開発センターを軸として分子集団研究系・関連領域研究系および錯体化学研究施設が発展的な協力体制をとることにより、新たな分子科学を創造する。

(3) 化学反応ダイナミクス

物質創製の必須過程は化学反応であり、その意味で物質変換としての化学反応ダイナミクス研究の新展開を図ることが、分子科学研究の重要な柱であることは説明の要もない。本研究所において、新しい理論と、それに対応する先端的な実験が先導的研究グループによってなされ、国の内外において高い評価を受けている。このような根源的研究は物質分子科学と光分子科学にまたがるものであり、分子構造研究系、電子構造研究系、極端紫外光科学研究系など化学反応を研究対象とする研究系と分子物質研究開発センター、分子制御レーザー開発研究センターおよび極端紫外光実験施設との密接な関係を保持しつつ、この活性をますます発展させることが本研究所にとって重要な使命である。

(4) 理論分子科学の充実

わが国において、理論分子科学は、福井謙一先生のノーベル賞受賞にみられるように、世界的にも極めて高い水準

にある。分子科学研究所の理論研究系は、発足時から常に世界の先端にあり、現在でもあらゆるスタッフが高い評価を受けており、わが国の理論分子科学研究の中心として機能し、ここから発信された多くのすぐれた成果が、世界の分子科学研究に大きな影響を及ぼしている。最近の計算科学の進歩、そして情報通信の革命的な発展にも支えられて、この21世紀に理論の果たす役割は、加速度的に強まり、物質科学のみならず、生命科学、環境科学の研究などが、理論を基盤として行われる時代に突入しつつある。分子科学研究所が、上述した諸分野における実験研究を強める一方、計算科学研究センターを機構共通施設とし、生命科学との融合的研究が統合バイオサイエンスセンターにおいて実現した今日、分子科学研究所の理論部門のさらなる充実をハード、ソフト両面から実現していく事が肝要である。

(5) 多国間国際共同研究

分子科学研究所は、創設以来多くの国際共同研究を主催するとともに客員を始めとする多数の外国人研究員を受け入れ、国際共同研究事業を積極的に推進し、国際的に開かれた研究所として高い評価を得ている。このような今までの経緯を踏まえ、その問題点を明確にして新世紀にふさわしい国際共同研究拠点の体制を構築しなくてはならないと考えている。その主要な論点は次の通りである。第一に国際共同研究のグローバル化が進行しており、二国間のみの共同研究では対応しきれなくなっている。第二には、分子科学研究所のような国際的な研究期間は「世界の分子科学の拠点」として自らの主導権の下に柔軟に臨機応変に共同研究を遂行し得る体制を持たなくてはならない。第三に、新しい世紀におけるアジアの重要性とその一員としての日本の役割を考えたとき、アジアの基礎科学を支援するとともに共同研究を推進していくことが極めて大事である。しかも、この共同研究は分子研が主導権を持った形で推進出来る事が肝要である。新しい世紀を迎えるにあたり、アジアにおける基礎科学の高揚をうながす為に日本が果たさなくてはならない役割と責任の大きさを考え、国際共同研究拠点として、アジアの若手研究者の受け入れと育成（特に博士研究員の受け入れと育成）各種研究施設（特に電子計算機センター（平成12年度から岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターとなる）や極端紫外光実験施設）の提供、研究者の交流と共同研究の実施を効率良く遂行出来る体制と予算的裏付けを求めていく。具体的には「物質分子科学」、「光分子科学」及び「化学反応ダイナミクス」の分子科学3大分野に関して国際共同研究のネットワークを構築し、経済的に各分野毎に2 - 3件ずつの共同研究をそれぞれ2 - 3年計画で実施出来るようにするとともにアジアの若手博士研究者を年間数人程度受け入れる体制を構築していくべきであると考えます。

概算要求の具体案

(1) UVSORの高度化

2年～4年程度で高度化を図り、第3世代に近付ける。

組織強化：現行の極端紫外光実験施設の組織を5部門とし、その一つとして光源加速器開発研究部を新設部門として教授1、助手1の定員増を要求する。

(2) 特別課題研究

(2-1) 分子物質開発研究センターを中心としたプロジェクト

研究課題：分子スケール物質科学

目的：分子科学と生命科学の融合による物質観の創製

内容：機能発現の最小単位を追求し、その創製を図る。

・単一分子化学と単一分子エレクトロニクス：

1分子の機能性化学物質を適切に配置することにより、従来にない電子的性質の発現や、機能の開発を行う。

・生体反応場の構築と生体触媒（タンパク質空間の反応化学）：

統合バイオサイエンスセンターと協力して蛋白質間のナノ空間を化学反応を行う場として利用した新たな反応システムの構築を行う。

・ミクロの目で見た液体（生体での液体の役割）：

生体内、フラスコ内を問わず、化学反応は溶液中で進行するのが一般的である。特に水は水素結合や、イオン化などの性質から特殊な反応場を形成しており、酵素やDNAもこうした性質を利用している。こうした溶液の本質を理解し、積極的に利用する物質化学の展開を目指す。

・化学エネルギー変換：

現在の物質変換はエネルギー効率という意味では、ほとんどのエネルギーを熱として浪費しているというのが現状である。分子スケールでの新たな化学反応に伴うエネルギー変換システムを作り上げる。

組 織：分子物質開発研究センターの協力体制の強化

分子集団研究系に加え、関連領域研究系に教授1、助教授1、助手2を擁する生命分子素子部門を創設する。錯体化学実験施設に教授1、助教授1、助手2を擁する錯体分子素子部門を創設する。

(2-2) 分子制御レーザー開発研究センターを中心としたプロジェクト

研究課題：分子スケールの反応と構造制御

目 的：時間軸あるいはエネルギー軸を制御したレーザーによる新しい分子の概念の構築

内 容：新たなナノ空間分解計測法の開発とそれを利用した時間・空間・エネルギーを全て特定した分子・超分子の計測と制御

・波長可変光と走査トンネル顕微鏡による分子マニピュレーション：

走査トンネル顕微鏡の探針先端付近にレーザー光を照射すると、先端近傍での電場増強効果により、大きな光電場の勾配が生じる。これにより単一分子マニピュレーションを実現する。

・有機レーザーの開発：

ナノサイズのFET構造を用いて有機色素をレーザー発振させると、あらゆる波長のレーザー光が容易に得られる。このような新規レーザー開発を推進すると共に有機1分子に対する電場効果から新たな分子物性の解明を行なう。

・単一分子光計測と生命体の分子運動：

レーザー蛍光顕微鏡の時間空間分解能の極限化、近接場顕微鏡、さらに2波長レーザーを用いたファーフィールド超解像空間分光の開発により、ナノ空間領域の解像を実現し、単一分子の時間分解光計測を実現する。さらにタンパクモーターに代表される生命体ユニットの分子運動を実時間計測して生命体のメカニズムを可視化する。

組 織：分子制御レーザー開発研究センターの協力体制

分子構造研究系、電子構造研究系、極端紫外光科学研究系、極端紫外光実験施設、新たに統合バイオサ

イエンスセンター戦略的方法論研究領域が参加する。

(3) 多国間国際共同研究

具体的計画

(3 - 1) 「物質分子科学」、「光分子科学」、「化学反応ダイナミックス」の各分野毎に欧米及びアジアから毎年8名程度の研究者を受け入れ、8名程度を派遣し、共同研究を実施する。

(3 - 2) アジアの若手博士研究員を毎年5名程度受け入れられるようにする。

5-1 極端紫外光実験施設の将来計画、特に高度化計画について

「分子研レポート 99」に報告したように概算要求の重点事項として極端紫外光実験施設(UVSOR)の高度化と組織再編を計画しているが、まだ、予算化に成功しておらず、来年度実現に向けて鋭意努力しているところである。組織再編については昨年報告した通り、UVSOR施設共同利用17年目に入り、利用研究分野の細分化・先鋭化に対応するための開発研究部制の導入及び長期的に加速器設備に責任を持つ体制作り(教授職要求)を計画している。また、高度化計画は競争的資金等ではカバーできないUVSOR施設の根幹部分の光源加速器に関わるものであり、現在、光源グループの加藤政博助教授を中心にして検討を進めている。なお、2年乃至4年かけて光源の高度化を実現した後は、高度化された光源の性能を十分に生かすための20力所にわたる分光器・実験装置(ビームライン)の高度化が控えているが、これらに関しては競争的資金等を順次、導入してできるところから進めていくつもりである。

以下に高度化について現在、検討している内容の詳細を報告する。

5-1-1 UVSOR高度化とは

UVSORは1984年の共同利用開始以来、我が国における主要な放射光施設のひとつとして順調に稼働を続けている。多数の利用者に安定に放射光を供給する一方で、自由電子レーザー研究など光源加速器技術の開発研究においても目覚ましい成果を挙げてきた。しかしながらUVSORの放射光源としての基本的な性能は建設以来変わっていない。UVSORは典型的な第2世代の放射光源であり、最新の第3世代光源に比べると、挿入光源数や放射光輝度といった点で大きく劣っている。また加速器装置の多くが製造後20年近くが経過しており、老朽化も深刻になりつつある。

UVSOR高度化計画は、

- (イ) 挿入光源設置可能な直線部の増設
- (ロ) 低エミッタンス化による放射光高輝度化
- (ハ) 既設挿入光源およびビームラインの更新による高性能化
- (ニ) 加速器各部の更新による高性能化、信頼性向上

を実現することで、UVSORを第3世代光源と競争可能な放射光源に転換し、今後10年前後、VUV軟X線領域における最先端の放射光利用実験が行える施設として現在の地位を維持・強化していこうとするものである。

5-1-2 新ラティス

UVSOR高度化の中心となるのはラティス(電磁石配列)の改造による直線部の増設と低エミッタンス化である。ラティスの改造は図1に示すようなものになる。現在3台の四極電磁石と2台の六極電磁石が設置されている短直線部に、新たに1.5mのフリースペースを設け、その両側に四極電磁石2台ずつを配置する。限られた空間を有効に活用するために六極磁場は四極電磁石に設ける補助コイルにより発生する。長直線部に関しても四極電磁石を全て交換し、現在の3mのフリースペースを4mまで拡大する。これらの四極電磁石にも六極磁場を組み込み低エミッタンス化した場合のダイナミックアパーチャの最適化を行う。最終的に直線部

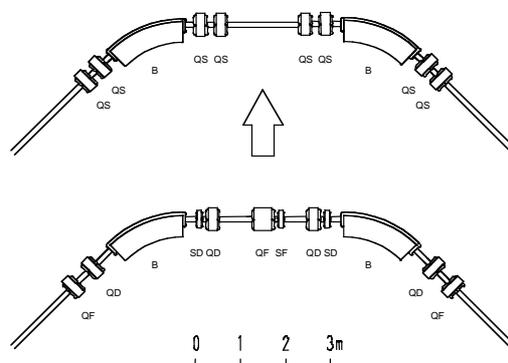


図1 UVSOR 高度化のためのラティス改造
(下:現在のラティス、上:新ラティスXリング1/4周)

数は、現在の3 m直線部4本から、4 m直線部4本、1.5 m直線部4本の合計8本へと倍増される。これらのうち2本は入射や高周波加速などに使用され残りの6本が挿入光源に利用可能となる。偏向電磁石には手を加えないため、既設ビームラインへの影響は基本的には無い。

ビーム光学は図2のように変わる。エミッタンスは現在の160 nm-radから27 nm-radと約1/6まで小さくできる。新光学では、四極電磁石による収束を強めることに加え、全ての直線部に有限の分散を持たせることで効果的に低エミッタンス化を実現している。直線部に有限の分散を持たせることそれ自体は直線部のビームサイズを増大させる方向に働くが、エミッタンスの減少の効果がこれに優るため、放射光輝度にとっては有利となる。また、全ての直線部において垂直方向のベータatron関数を1 m程度と小さくしてあり、磁極間隙の小さい短周期アンジュレータの導入が可能となっている。

六極補正に関しては4ファミリーの四極電磁石のそれぞれに組み込んである4ファミリーの六極磁場強度を最適化することで、線形色収差を補正し且つ入射蓄積に十分なダイナミックアパーチャを得ることができる。新光学のダイナミックアパーチャを図3に示す。

新しいラティスで最大の問題となるのはTouschek効果によるビーム寿命の短縮である。これはUVSORのような低エネルギーリングを低エミッタンス化した場合には避けられない問題である。これに対しては、まず既設の3倍高調波RF空洞を利用しパンチ長を延ばすことで、Touschek効果を緩和する。さらに、現在、主RF加速空洞に投入できる電力を制限している入力カブラー部を改良し加速電圧を高くすることでRF bucket heightを高める。これらにより現在と同等の寿命を実現できる見込みである(図4)。なお真空による寿命は、支配的とはならないと予想されるが、制動放射による放射線の問題などもあり、高度化改造には直線部の真空系の増強を含めている。

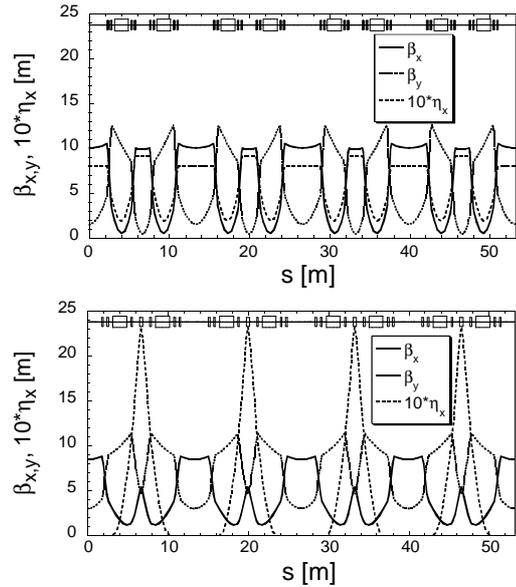


図2 UVSOR 高度化のための新ビーム光学 (上: 新光学、下: 現在の光学)

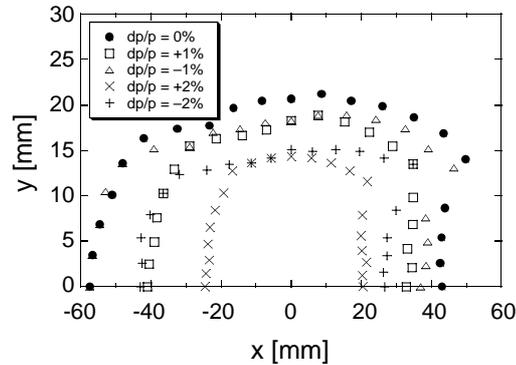


図3 UVSOR新ビーム光学のダイナミックアパーチャ (直線部中心)

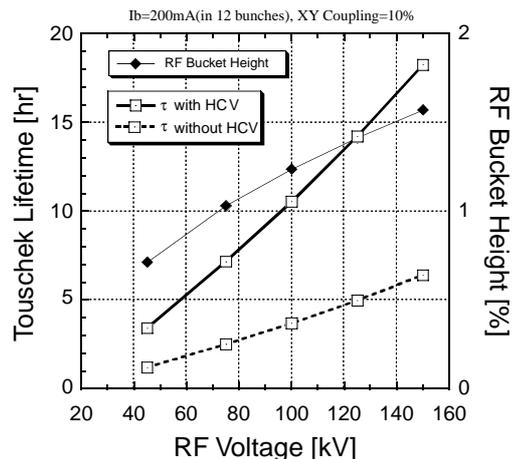


図4 Touschek 寿命
低エミッタンス化後のTouschek寿命がRF電圧の関数として示してある。3倍高調波RF空洞(HCV)の使用によるパンチ長伸長と、主RF空洞の改良により加速電圧を現状の45 kVから80 kV程度まで引き上げることで現状と同等のビーム寿命が実現できる。

表1 UVSOR光源リングの主要なパラメータ

	Present	Upgraded
Circumference	53.2 m	
Lattice Type	DBA	extended DBA
Number of Cells	4	4
Straight Sections	3 m × 4	4 m × 4, 1.5 m × 4
Beam Energy	750 MeV	
Emittance	165 nm-rad	27.4 nm-rad
Energy Spread	4.2×10^{-4}	
Betatron Tunes	(3.16, 1.44)	(3.75, 3.20)
Nat. Chromaticity	(-3.4, -2.5)	(-8.1, -7.3)
XY Coupling	~10%	
Mom. Comp. Fac.	0.026	0.028
RF Frequency	90.115 MHz	
Harmonic Number	16	
RF Voltage	46 kV	~80 kV
RF Bucket Height	0.74 %	1.03 %
Max. Beam Current	250 mA	> 250 mA
Beam Lifetime(200mA)	~6 hr	> 6 hr

5-1-3 光源性能

低エミッタンス化により放射光輝度は大幅に改善される。既設アンジュレータや偏向電磁石の放射光輝度の向上の様子を図5に示してある。概ね一桁高くなるのがわかる。これに加えて、新オプティクスでは全ての直線部で垂直方向のベータトロン関数を1 m程度と小さくしてあり、磁極間隙の狭い短周期の真空封止型アンジュレータを導入することが可能となる。磁極間隙は、ビーム寿命に影響を与えることなく、最小で10 mmまで狭めることができる。このようなアンジュレータを導入することにより、これまでUVSORでは発生することの出来なかった100 eV超の領域でアンジュレータ光(基本波)を発生することが可能となる。近年、レーザー光の短波長化が進んでいるので、レーザーでは当分不可能な、このようなエネルギー領域でUVSORの特長を出す必要がある。周期長32 mmのアンジュレータを導入した場合の例を図5に示してある。

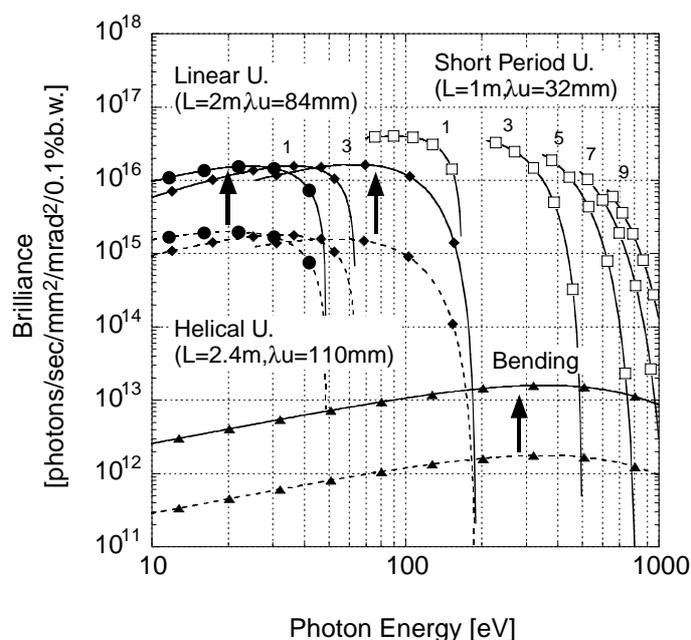


図5 高度化後の放射光スペクトル
既設直線偏光アンジュレータ(Linear U.、 \bullet) 既設円偏光アンジュレータ(Helical U.、 \blacktriangle) 既設偏向電磁石(Bending、 \blacktriangle) 将来の真空封止型アンジュレータの一例(Short Period U.、 \square ; 周期長32 mm、最小磁極間隙10 mm)が示してある。既設光源の高度化前後での輝度変化は矢印で示してある。

5-1-4 加速器改造

加速器改造は、直線部の電磁石系、真空系の改造が中心となる。高度化前後の加速器配置(案)を図6に示す。

周長を一定に保ったまま挿入光源のためのフリースペースを作り出すために、限られた空間に加速器要素を効率よく配置する必要がある。このために六極磁場は四極電磁石の磁極面に設けた補助コイルで発生する。新収束電磁石(四

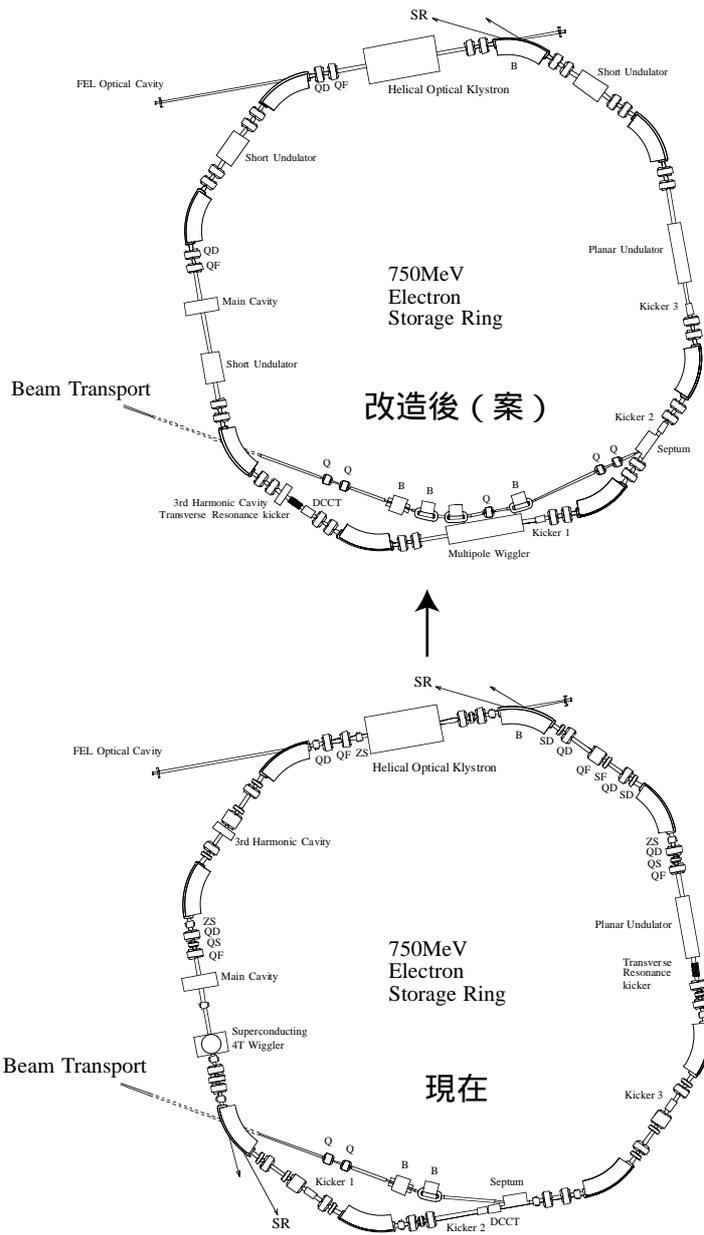


図6 高度化前後の加速器配置
(上：高度化改造後、下：現在)

高度化後の配置にはオプションの一つである入射点の変更も含めてある。また挿入光源の配置は案の一つであり、最終的には利用側と協議して決定する。

加速器改造のもう一つの重要項目は入射器の増強・更新である。入射器も光源リングと同じく製造後20年近くが経過しており、各部の老朽化が進行している。施設の安定な運転のためには入射器に関しても各部の更新による高性能化、信頼性向上を実現する必要がある。今回の高度化では特に前段入射器である線形加速器の主要部分の更新に重点をおく。入射効率の向上、信頼性の向上を実現することに加え、単バンチ入射のための短パルス発生が可能な仕様にする。現状の単バンチ運転では、多バンチで入射した後、不要な電子バンチを削り落とすことで単バンチ化しているが、直接単バンチで入射することで入射時間の短縮、蓄積電流値の一層の向上が実現できる。これは蓄積リング自由

極、六極組込み)の主要パラメータは表2に示すとおり。低エミッタンス化後のダイナミックアパーチャ最適化のために、4ファミリの収束電磁石全てに六極磁場を組み込む。直線部のビームダクトの断面形状は現在と同じく内径110 mm × 39 mmのレーストラック型とし、真空排気ポートを増設する。現在ビーム位置検出器の電極は偏向電磁石ダクトに取り付けられているが、電磁石に対する位置精度が悪い。このため各直線部の収束電磁石近傍に新たに2台ずつビーム位置検出器(BPM)を取り付ける。

表2 新収束電磁石の主要パラメータ

Number of Magnets	32
Core Length	0.2 m
Bore Diameter	94 mm
Max. Quad. Field	15 T/m
Max. Sext. Field	35 T/m ²

直線部以外の改造・増強項目では、光源リングの高周波加速空洞の増強が重要である。これは低エミッタンス化後のビーム寿命確保のために不可欠である。既設のRF空洞は本来75 kV程度の加速電圧を発生できるように設計されているが、現状は高周波入力部の冷却の問題で45 kV程度の加速電圧が限界になっている。空洞を改造することで定格の加速電圧を発生できるようにする。ちなみに既存の高周波源はこれに十分な能力を有している。現在、入力部の小改造と空洞本体も含めた全面更新の両方について検討を進めている。

電子レーザーなど単バンチを利用する光源開発にとっても重要である。入射器の増強は、電子銃部分などの部分更新と全面更新の両方について検討を進めている。

既存挿入光源の更新に関しては、まず真空封止型短周期アンジュレータを1台新たに製作し超伝導ウィグラと交換する。ちなみに超伝導ウィグラについてはこれまでの故障頻度の高さ、運転維持管理に要する費用・人員、利用側にとっての必要性などを総合的に考え、利用者の了解の上、UVSOR運営委員会で廃止が了承された。新アンジュレータは、導入当初は、真空封止型アンジュレータの性能評価、ビームへの影響評価を行うために使用し、その後、達成された実性能に適した利用実験を選定する予定である。このアンジュレータの製作は既に開始されている。周期長は36 mm 全長は約1 mで、現在のオプティクス化での実用性も考慮して図5に示した例よりも若干周期長を長く取っている。期待できる放射光スペクトルを図7に示す。

高度化計画スタート後は、上記、真空封止型アンジュレータの経験の上にならって、さらに約3 m長のアンジュレータ1台を製作し、現在BL3Aに設置されている直線偏光アンジュレータと交換する。挿入光源ビームラインの整備についても高度化計画の一部として実施する。なお本高度化計画終了後、新たに設けられた短直線部については、利用側と協議しながら分光器に適合した挿入光源を設計することになる。

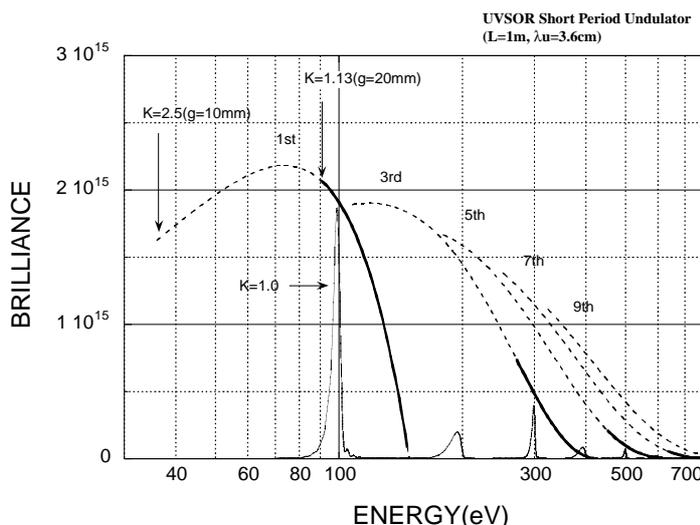


図7 短周期アンジュレータ（テスト機）の放射光スペクトル
周期長36 m、全長1 m。現在のオプティクス下での放射光輝度を示してある。高度化前は最小磁極間隔は20 mmが限度となり波長範囲は限定的となる（実線部分）が1次光で100 eV付近がカバーできる。高度化改造後、短直線部中心に設置した場合には最小ギャップは10 mm程度まで可能となり、VUVの幅広い領域（実線部分+点線部分）がカバーできるようになる。

5-1-5 準備状況など

現在ラティスの設計は完了しており、各加速器要素の検討を進めている。新収束電磁石については prototype の製作を進めており、今年度中に磁場測定を行う予定である。真空系についてはKEK-PFの真空グループとの協力の下で詳細設計を進めている。真空封止型アンジュレータは、SPring-8挿入光源グループとの協力のもとで、既に製作を開始している。今年度は磁極部分などを製作し、残りは来年度製作する予定である。順調に行けば来年度末には超伝導ウィグラを撤去しその跡地に据え付けることができる。

リング本体の改造のための準備作業の一環として、今年度末の停止期間中に電磁石据付精度の精密測量を実施する。現在の電磁石据付はmm単位で誤差を生じているものと思われ、リング改造時には精密据付をやり直す必要がある。リングの再アライメントはビームラインにも影響するため、事前にどの程度の移動となるか見当をつけておく必要がある。

挿入光源の多数設置された低エミッタンスリングでは、電子ビーム軌道の安定性は、挿入光源の高輝度特性を引き出すために極めて重要である。これを実現するためには高速高精度のビーム位置検出システム（BPM）が不可欠である。既設のBPMシステムは老朽化が進んでいくことに加え、リング1周の軌道を測定するのに約1分を要するなど、能力的にも問題がある。現在システムの更新の準備をすすめており今年度末までに新システムを完成させ、来年度初めには試験運転を開始できる見込みである。

5-2 計算科学研究センターの現状と将来

分子科学研究所・電子計算機センターは1978年に設立され、2000年4月より、岡崎国立共同研究機構（岡崎機構）計算科学研究センターに改組された。電子計算機センターは日本全国の分子科学研究者に大規模計算を実行する環境を提供する計算機センターとして設立され、22年を経た今日においても所内外の分子科学研究の基盤施設としての重要性は変わらない。実際、「分子研レポート 94」に報告されている通り、外部評価委員、運営委員、所内外の利用者の多くは、本センターが分子科学理論計算分野へ貢献してきた歴史的経緯を高く評価しており、当初の目標を高い水準で達成できていることを認めている。

5-2-1 現在の計算機システム

2000年3月から導入されたスーパーコンピュータシステムを図1の左側に、昨年度に更新を終えた汎用高速演算システムを右側に示す。新スーパーコンピュータシステムは、富士通製 VPP5000 と SGI 製 Origin2800 から構成される。

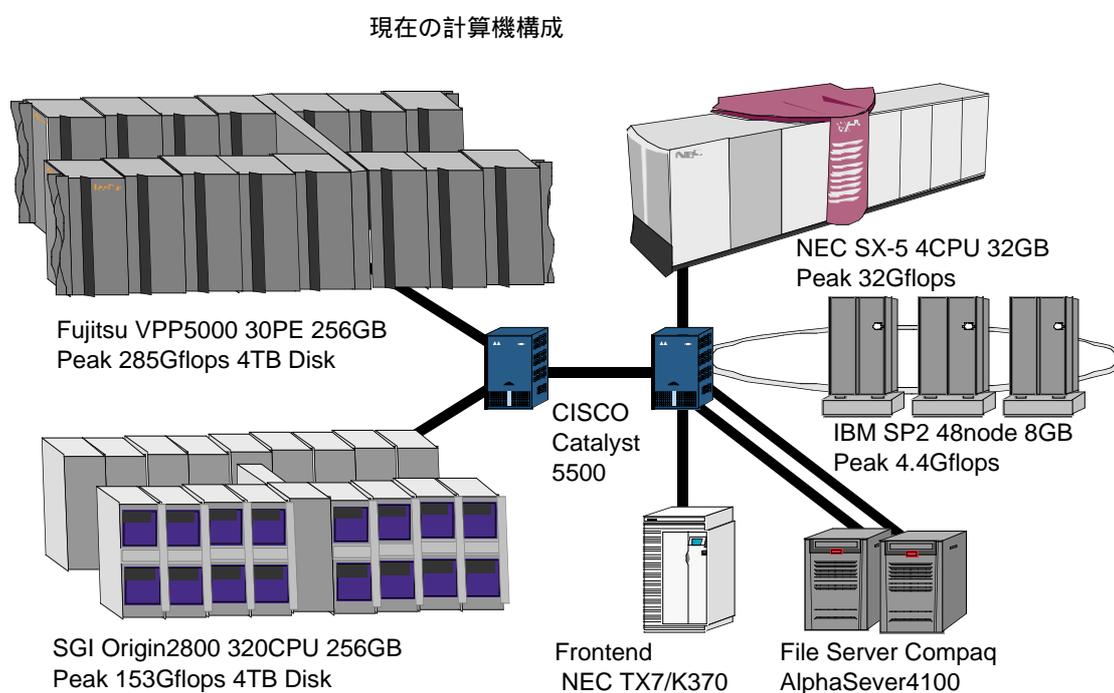


図1 . 2000年11月以降の計算機構成

VPP5000 は1 CPU 当たりの最高演算性能が9.5 Gflops のベクトル演算装置30台から構成され、各 CPU に8 ~ 16 GB の主記憶装置を持つベクトル並列計算機である。一方、SGI Origin2800 は1 CPU 当たりの最高演算性能が0.59 Gflops のスカラ演算装置256 CPU から構成され、CPU 当たり1 GB の主記憶をそれぞれのCPU から共有メモリとしてアクセスが可能な分散共有方式の超並列計算機である。2000年11月にはSGI側システムは320 CPU に増強され現在に至っている。VPP5000 では高速なベクトル演算能力を活かした大型ジョブの逐次演算処理はもちろん、例えば8台以上のベクトル演算装置を使った大規模なベクトル並列演算が可能となる。Origin2800 は Non Uniform Memory Access (NUMA)方式と呼ばれる論理的な共有メモリ機構を有する。NUMA は主記憶装置が各CPU に分散して配置されているためCPU から主記憶へのアクセス速度が非等価ではあるが、利用者プログラムから大容量のメモリを容易に利用することが出来るため、大規模な並列ジョブの実行が可能となる。1 昨年度、導入されたSX-5 は1 CPU 当たり8Gflops の最高演算能

力を持つ共有メモリ型ベクトル計算機であり、SP2は分散メモリ型スカラ並列計算機である。更に、2001年3月中旬より、分子科学およびバイオサイエンス関連の計算処理を目的とした高速シミュレーションシステムが稼働を始める。高速シミュレーションシステムは、日立製作所SR8000とSGI 3200から構成される中規模なシステムであり、当面の間は主に機構内における利用を目的として運用を行う。今後は、個々の計算機の特徴を活かしつつ、大規模な分子科学計算が実行できる基盤施設としての機構外施設利用として、および機構内の多様な計算処理に適応できるセンターとして、分散処理環境をさらに充実させ、利用者ジョブの効率的な実行環境を構築することがこれからの課題である。

2002年（平成14年度）には、機構から約1km離れた場所（E地区と呼ぶ）に、新たに統合バイオサイエンス棟と2つの付属施設棟が完工する。統合バイオサイエンス棟内には、E地区の計算科学の研究基盤施設およびネットワークのノード室として計算科学研究センターの分室が設置される予定であり、上述の高速シミュレーションシステムと関連周辺装置を移設する。更に平成14年度末には、計算科学研究センターの汎用高速演算システム（図1、右側）の拘束レンタル期間が終了するためシステムの更新が可能となるが、その更新時期については、施設利用を目的とした汎用システムとしての役割、近い将来予想される機構内の計算処理需要の増大等を熟慮して、現在（本稿原稿執筆時点）基礎生物学研究所、生理学研究所の関係者および外部運営委員と協議中である。

5-2-2 計算機施設利用枠の新設「特別申請」

本計算科学研究センターの前身である「分子研電算センター」はこれまで全国700人におよぶ分子科学者に対して文字どおり「共同利用施設」としてサービスを提供してきた実績をもっている。これは、他の研究機関の「スパコンセンター」がその利用者の大部分を事実上その機関内に閉じていることを思うとき、「分子研電算センター」が誇るべき偉大な実績であり、今後も「計算科学研究センター」が継承すべき特色である。しかし、一方、ワークステーションや高性能のパーソナルコンピュータの普及に伴って、これまで「計算機センター」が果たしてきた役割の一部が変更を迫られていることも確かである。これまで計算機センターを利用して行われていた計算のかなりの部分がワークステーションやパソコンで簡便に行えるようになり、「煩わしい手続きをして大型センターを利用するまでもない」と考えるユーザーも増えている。他方、国際的には米国を中心に超並列マシンの性能を極限まで使って初めて可能になるような計算が報告されつつあり、このままでは我が国の理論化学が国際的に遅れをとってしまうという危機感も生まれている。すなわち、一方では「できるだけ多くの研究者へのサービスの提供を維持」しながら、他方では「世界のピークを目指すような大規模計算を可能にする」という「二兎を追う」ことを要求されている。このような要請に応えるため、2000年春の運営委員会において計算資源の利用枠を「一般利用」と「特別利用」に2本化することが提案された。承された。「一般利用」はこれまでとほぼ同様であり、同様の手続きで申請を行う。他方、「特別利用」は毎年小数の大規模計算プロジェクトに供するものであり、特別の申請手続きと審査を経て許可されるものである。「特別利用」は他の多くの利用者の「犠牲」の上に行うわけであるから、その申請者の責任の自覚が不可欠であり、審査もそのような高い基準で行われる必要がある。

平成13年度春から試行予定の「特別利用」の概要を以下に示す。

毎年、少数（10件程度）の特別利用申請を公募する。このカテゴリーは他のユーザーの利用をある程度制限することを前提に行うもので、それを正当化する唯一の根拠は、その利用の結果、一般の利用ではできない、際立った研究成果を挙げる事以外にない。そのような成果を期待するには申請に関する審査と研究結果報告に対する評価をできるだけ厳しく行う必要がある。まず、申請書に基づいて審査を行い、点数に基づいて順位をきめる。その上位順位から、「特別利用」の枠内で採用を決定する。審査は通常の論文審査の場合と同様に複数の審査委員に依頼する。審査委員は

あらかじめ定められた審査基準に基づいて審査を行い採点すると同時に審査意見を述べる。最終的な可否は審査結果に基づき運営委員会において行う。また、研究結果の評価に関しては論文の発表を原則とし、その論文は計算科学研究センター特別利用申請と明記する。

2001年度中に特別利用に供する計算機資源は以下の2機種である。

超並列計算機 SGI3800 128 CPU (128 GB).....特別枠専用利用

(ただし2001年6月までは主記憶は64GBに制限される)

ベクトル計算機 VPP3000 最大16 CPU (128 GB).....一般施設利用ジョブと共存利用

VPP3000については特別枠の利用期間を限定する。

5-2-3 機構化の現状と将来展望

岡崎機構の計算科学研究センター(旧分子科学研究所電子計算機センター)はこの1年の間にいくつかの点で大きな変貌を遂げた。その第一はスーパーコンピュータの更新であり、この更新によって、演算処理能力は従来の約10倍に向上し、これまで滞りがちだった計算処理速度を大幅に改善することができた。

第二は従来の分子科学研究所のセンターから機構のセンターへの組織的変更である。この変更は、一方では、将来、岡崎機構内で分子科学と生物科学を融合した計算科学の新しい展開に大きな展望を与えるものであると同時に、他方では、もしそのような展開が十分な裏付けもなく性急に行われた場合、分子科学分野において国際的に高い評価を確立している計算センターの存立基盤そのものを危うくする契機を孕んでいる。ここでは「計算科学研究センター」の運営に主として責任を負っている分子科学研究所電算機室の立場から、特に、「機構化」に伴って生じる諸問題について言及し、「センター」の将来を展望する。

「計算科学研究センター」の将来を展望する上で二つの「座標軸」が必要である。ひとつは旧「分子研電算センター」が共同利用施設として分子科学の発展に果たしてきた役割であり、他のひとつは計算科学の発展において生物関係の問題が占める比重の増大である。「分子研電算センター」は約22年前に設立以来、国内における分子科学者の共同利用施設として、一方では国際的にもピークをなす計算を行い、他方では国内の計算化学全体の底上げを行うという二重の役割を果たしてきた。まだ、ワークステーションが普及していなかった時期に地方の大学などで計算機にアクセスできなかった研究者に計算資源を提供し、その中から国際的にも高い評価を受けている分子科学のリーダーを数多く輩出してきたことは周知の事実である。このことは、現在、世界で発表されている量子化学関連論文全体の2、3パーセントが旧「分子研電算センター」を使って行われたものであることから伺われる。さらに、最近、センター利用者の分布に見られる特徴は、有機化学や固体物性分野を中心として実験研究グループの利用の比重が増大していることである。その理由のひとつは量子化学、分子シミュレーションを始めとする理論化学における(計算プログラムを含む)各種方法論が成熟期を迎え、実験家自身ないしは実験家と理論家との協力によって、実験条件に近い系の理論計算が可能になったことが上げられる。このような傾向はナノサイエンスを始めとする物質科学の最近の展開によって今後さらに拍車がかげられることが予想される。最近のセンター利用状況に見られるこれらの特徴は実験研究において理論計算が有効であり得ることを実証する有力な根拠であり、まさに、旧「分子研電算センター」がその創設において企図した目的のひとつであった。したがって、分子科学分野における「計算科学研究センター」の役割が今後益々増大することは必至であり、この分野でのサービスを引き続き強化していくことが必要である。

もう一方の「座標軸」である生物関連分野の位置付けであるが、これまでもこの分野ではprotein data bankなどに象徴されるような国際的に公開された生物情報データを利用して、一方ではいわゆるバイオインフォマティクスに代

表されるようなデータベース処理において、他方では分子動力学 (MD) やモンテカルロ法 (MC) といった分子シミュレーションにおいて、計算科学が重要な役割を演じてきた。もちろん、分子科学自身、その発展に少なからぬ貢献をしてきたことは、MD や MC といった計算科学の手法が分子科学の分野で開発され、発展してきたことから見ても明らかである。このような生物分野における計算科学の位置付けは「人ゲノム計画」の進展とともに以前にも増した高まりを見せている。ゲノムの全解析によってもたらされる膨大な情報を巡って、医学から基礎科学に至る様々な学問分野だけでなく薬品工学や生命工学を含む広大な工業分野が創出されるであろうことは火を見るより明らかである。今後、ゲノムの情報解析において計算科学が有用な学問的知見を引き出し、また、新たな社会的資産を生み出すために重要な役割を果たすことは疑いないであろう。生物科学系の2研究所を有する機構内の「計算センター」がこのような学問の進展に手をこまねていることは許されないし、まさに、このことが「計算センター」機構化の重要な契機ともなった。したがって、「計算科学研究センター」が将来展望として生物関連分野の利用を視野に入れた展開を図るべきであることはいうまでもない、その方向については今後十分な検討が必要である。その検討の材料として以下の要素が考慮されるべきであろう。そのひとつは生物関連の計算科学分野の国内における現在の状況である。この分野は、現在、大きくふたつの流れで進みつつある。その流れのひとつはゲノム情報など生物「データベース」から情報処理の手法により生物進化や医学における有用な情報を得ることを目的にしたいわゆるバイオイオンフォ - マテイクスの分野である。この分野はこれまで京大 (化研)、東大、名大 (生物)、阪大 (蛋白研) を中心にいくつかの研究拠点が形成されており、これらに岡崎の基生研の「情報生物学研究センター」が新たに加わろうとしている。また、この分野の共同利用計算センターとしては遺伝研が機能している。生物関連計算科学のもうひとつの重要な流れは分子レベルから蛋白質の構造の成り立ちや揺らぎ、あるいはその機能を解明しようとする分野であり、いわば「生物分子科学」とも呼ぶべき研究領域である。

以上述べたきた諸点から「計算科学研究センター」における生物関連分野への展開は、分子科学分野における共同利用研究者へのサービスを低下させないことを前提に、次のように、短期、長期に分けて展望するのが最善であると思われる。

まず、短期的な展望としては、特に、生物科学と分子科学の境界に位置する分野、すなわち、「生物分子科学」分野における計算科学を発展させる。その理由のひとつは岡崎機構が分子科学研究所と生物関連の2研究所を有する国際的にもまれな地理的条件にある点である。このような条件を最大限に活かして、生物学と分子科学との「境界領域」に新しい計算科学の分野を構築していくことは「センター」に課せられた責務であるとさえ言える。もうひとつの理由は歴史的に見て「計算科学研究センター」の前身である「分子研電算センター」がもともと分子科学研究者の共同利用施設であり、計算科学におけるノウハウの蓄積の面でも、人的資源においても分子科学研究所にその大部分の基盤をおいている点である。そもそもスーパーコンピュータのような大型施設を使って行うような計算の多くは非常に大きく、かつ、高度に組織化されたソフトウェアを要求する。量子化学計算で使われる Gaussian や分子シミュレーションで使われる CHARMM などはその代表例である。そのようなソフトウェアはその製作だけでなくその維持、管理においても高度のノウハウと莫大な人的資源を要求し、一朝一夕にして出来上がるものでない。将来、生物独自の情報処理への展開を展望する場合には、まず、生物関連2研究所にその基盤となる研究グループを創出し、同時に、計算科学研究センターにおける財政面、人材、ハードウェア、ソフトウェアなどにおいてその分野の拡充を図ることが前提となる。すべての面においてその基盤を分子研電算センター時代の「資源」に依存している現状では、それらの「資源」を最大限に活用できる生物の分野に限定した展開を行うことは極めて自然であり、分子科学と生物の「境界領域」にその可能性を求める所以である。以下に、例として、生物・分子科学境界領域で未解決になっているいくつかの重

要問題について挙げておく。

(1)ゲノム情報から得られるアミノ酸配列に基づく未知蛋白質の立体構造予測。

ゲノム情報は生体内で活躍するすべての蛋白質の配列情報を含むはずであるが、それらの中には、未だ、構造どころか機能も明らかになっていないものが数多く存在する。このような蛋白質の構造を一次配列から予測することはその生体内での役割や生物進化における位置付けなどを明らかにする上で基本的な課題である。このような問題は蛋白質の熱力学的安定性と密接に関係しているが、それを溶媒をも含めて分子レベルで解明することは生物学と分子科学の境界に位置する重要課題である。

(2)生体系における光化学反応過程。

光化学反応はいうまでもなく生物が光エネルギーを物質に固定するもっとも重要な機能であり、すぐれて生物学上の問題である。一方、光の収集や電子移動（酸化・還元）といった機能を担うのは蛋白質という「分子」であり、その全プロセスに「水」というこれまた「分子」が極めて重要な役割を演じている。方法論的には量子化学、統計力学、分子シミュレーションなど分子科学において発展してきた方法が主役を演じる格好の生物学上の舞台だといえる。

(3)神経伝達系におけるイオンチャンネル。

細胞膜内外のイオンの移動は脳を含む神経伝達系におけるもっとも重要なプロセスのひとつであり、その解明は生理学における重要課題である。このプロセスには細胞膜や膜蛋白質の構造と揺らぎ、イオンの個性とその溶媒和などが複雑に関係しており、まさに分子レベルでの解析が本質的な意味をもっている。

この例の他にも、「DNAとペプチドの分子認識」、「受容体とリガンドの結合」、「各種酵素反応」、「人工酵素」などなど、分子科学と生物の「境界領域」に位置する計算科学の重要問題は数え上げればきりがなく、この分野において「計算科学研究センター」が果たすべき役割は極めて重要である。

長期的な展望としては上記の「生物分子科学」および「生物情報」を含む総合的な計算・情報処理拠点の創出を行うため基生研および「情報生物学研究センター」の協力のもとに特に物情報関連の計算・情報処理パワーの大幅な拡充をハード、ソフト、スタッフの面で行う。