

4. 点検評価と課題

4-1 分子制御レーザー開発研究センター

分子科学研究所「分子制御レーザー開発研究センター」に関する外部評価報告書

財団法人 豊田理化学研究所 岡田 正

独立行政法人 理化学研究所 緑川 克美

日程

平成16年11月30日（火）

10:00-12:20

あらかじめ送付された研究成果の概要などに関する資料に基づいて、猿倉助教授および平等助教授からの説明と質疑応答

13:00-14:30

松本センター長から資料に基づいてセンターの現状と将来計画について説明があった後、中村分子科学研究所長、猿倉、平等両助教授が参加して自由な意見交換

14:30-15:40

猿倉、平等両研究グループの研究室見学

4-1-1 分子制御レーザー開発研究センターの役割と成果について

分子制御レーザー開発研究センターは、新しい分子科学研究を切り開くための高性能かつ新規なレーザーシステムを自ら開発し、先端の分子科学研究の推進に寄与することを目指して平成9年度にスタートした。現在センターには、1) 分子位相制御レーザー開発研究部、2) 放射光同期レーザー開発研究部、3) 特殊波長レーザー開発研究部の3部門があり、レーザー開発研究を精力的に進めると共に、多数の共同利用機器を保有、維持管理し、利用者の便に供している。

先ず、センターにおける研究面について述べる。

レーザー開発研究に関しては、猿倉助教授のテラヘルツ光源や紫外固体レーザーの開発および平等助教授によるマイクロチップレーザーとその波長可変技術の開発等、顕著な成果をあげていると判断される。テラヘルツ電磁波を光源とする新しい分光研究が分子科学研究者との共同研究で進められていることや手のひらサイズの小型大出力のレーザーの民間への技術移転など、限られた人数で当初の目的を果たす大きな成果を挙げているといえる。

センターに設置されている3つの研究開発部は分子科学研究を支え推進するに相応しい体制であると考えられるが、分子位相制御レーザー開発研究部における佐藤助教授の早期の転出と放射光同期レーザーに関する研究計画の発展的変更という事態により開発が頓挫している。この点については、分子科学研究所における積極的な人事交流の重要性と急速に発展している分子科学領域の現状を考慮すると致し方ない面がある。特に、放射光同期レーザーに関しては、UVSORの今後の計画とも関連すると思われる重要な課題であり、十分な検討が必要であろう。

4-1-2 将来計画について

分子科学における広い意味での光科学研究の新しい展開の拠点としての新センターを設置し、「光を創る, 光で観る, 光で制御する」という3つの重点目標のもとに, 今後の重点課題としあげられた以下の3課題を推進することを強く支持したい。

- 1) テラヘルツから真空紫外にいたる新たなコヒーレント光源の開発
- 2) 光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発
- 3) 光位相の精密制御による物質波のマニピュレーション

新たな光分子科学を推進するにあたっては, 先端的光源や未踏の波長領域の光源を開発することは, 新しい計測法や方法論の開拓とともに不可欠である。レーザー開発が先端的になればなるほどその開発に期間を要することを考慮すると, 新センターと分子科学研究者, 特に, 分子科学研究所の研究者との連携が重要になる。このためには, センター長の役割が以前にも増して一層重要になると考えられるため, この点に関する十分な検討と配慮が必要である。

4-2 分子スケールナノサイエンスセンター

評価委員会（外部委員によるヒアリング）開催日：平成16年12月13日及び15日

所外委員 岩澤 康裕（東京大学，教授）
大寫幸一郎（京都大学，教授）
川合 真紀（東京大学，教授）
関 一彦（名古屋大学，教授）
所内委員 魚住 泰広（分子研，教授）
小川 琢治（分子研，教授）
松本 吉泰（分子研，教授）
オブザーバー 中村 宏樹（分子研，所長）

ナノセンターの研究グループを二つに分け、松本、佃、埴田、田中彰治の4グループは13日に岩澤委員、川合委員によるヒアリングを受け、魚住、小川、永田、鈴木、櫻井の5グループは15日に大寫委員、関委員によるヒアリングを受けた。それぞれの日に、委員と中村所長を交えて、センター全体に対する評価を受けた。

4-2-1 所外委員の意見書

委員 A

概要：

本センターは、平成14年に、諸研究系、分子物質開発研究センター、錯体化学実験施設などを先行組織とする改組により、「分子金属素子・分子エレクトロニクス」「ナノ触媒・生命分子素子」「ナノ光計測」の3研究部門と「先導分子科学」の流動研究部門として発足し、3年目の途中での評価である。従って、人事的には従来組織からの継続が多いが、幾人かの新規採用や転出予定によって構成が変化し始めたところであると言える。

構成員の研究レベルは高く、評価資料によれば、今回私が面接を担当した5グループ（永田・櫻井・魚住・鈴木・小川グループ）構成員は、2003、2004年度に原著論文23篇、総説・解説14篇を内外の一流研究誌に発表している他、特許を6件申請し、国際会議招待講演10件、国内招待講演15件を行っている。これらには前任地での業績も含まれるが、これらのメンバーが活発な研究活動を行っている証と言えるであろう。

より具体的に各研究グループの独自の研究活動に言及する。

小川教授のグループでは、分子スケールにおける電子物性測定の確立を目指して、物質合成から物性測定までの多彩な局面にわたって、優れた独自のアイデアで着実に研究を進展させている。この分野に係わる国内外の多くの研究者とのネットワークも構築しており、日本のリーダーとしての活躍を期待する。

魚住教授のグループは、豊富な外部資金や人員をもとに、水中での多種の不斉反応の実現など、環境調和性の高いナノ触媒を系統的に開発し、優れた成果を挙げている。魚住・永田・櫻井・佃グループが共同して開発しつつある金属微粒子触媒の成果も興味深い。

永田助教授のグループは生体系を規範とする光合成物質変換システムの開発を目指して、デンドリマーとフェロセン・キノン類を結合した大型有機分子を巧みに合成し、その光誘起電子移動などの機能を評価しており、関連系を用いた触媒的酸化還元反応の開発も視野に入れている。高度な合成技術を活かし、良いアイデアにより、「新しい系」から「新しい機能」を実現し、この分野での激しい競争の中で一步抜け出されることを期待する。

鈴木助教授のグループでは、パーフッ素化炭化水素や含窒素化合物など、有機EL素子、有機電界効果トランジスタ等の有機電子デバイス用材料の開発を進めている。実デバイスに用いたときにかなりの高性能を実現している材料もあり、今後の展開に期待したい。

櫻井助教授は着任後間がないが、このグループでは、 C_{60} などのフラーレン類の部分構造を有する、スマネンなどのバッキーボール分子の新規で効率的な合成法を開発し、蛍光材料などへの展開も図っている。物理化学的測定により、さらに深い展開が図れそうな点も多く見受けられ、所内外の他分野研究者との交流による今後の研究成果が期待される。

施設面では、分子研等の三研究所が従来展開していた明大寺地区からやや離れた山手地区に新築された山手3号館、4号館、5号館を用いて空間的には比較的余裕のある展開が行えている。中でも920MHz核磁気共鳴装置は、独立に5号館を用いるという恵まれた環境にある。

また、分子研は京都大学、九州大学とともに、文部科学省のナノテクノロジー総合支援プロジェクトの一環をになう分子・物質総合合成・解析センターに認定され、本センターはその中心として通常の共同利用の他に「分子電子素子のための、素子作成と電気特性計測システム」などを用いた共同利用（協力研究）を受け付けている。例えば平成16年度後期には17件を本センター教員が担当している。とくに平成17年度から共同利用に供される920MHz核磁気共鳴(NMR)装置は国内最高水準を誇る装置であり、このクラスの装置の全国共同利用は分子研のみで行われている。さらに平成17年度後期から固体高分解能測定を可能にする準備が進んでおり、この装置の価値を高めようとしている。高度な装置の効率的利用のため、予備測定システムの整備などが望まれよう。

分子研内外における本センターの位置づけと将来への展望：

センターのミッションは、センター規則によれば「原子・分子レベルでの物質の構造および機能の解明と制御、新しい機能を備えたナノ構造体の開発及びその電子物性の解明を行い、これらが示す物理的・化学的性質を体系化した新しい科学を展開するとともに、ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある物性機器、研究設備の集中管理を行い、これらを研究所内外の研究者の利用に供し緊密な連携協力の下で共同研究等を推進すること」となっている。このうち、原子・分子レベルでの物質の構造および機能の解明や制御は、従来の化学や物理の分野でも日常的に行われていることであり、近年のナノサイエンス・ナノテクノロジーの高まりの多くの部分は、従来の化学・物理の研究分野を超えた、新しい機能を備えたナノ構造体を念頭においた科学の展開、およびその体系化への努力によるものと考えて良いであろう。本センターでの研究・人事などにおいても、この点に特に留意した運営が望まれる。さらに、その中で、同様の方向を目指している国内外の諸研究拠点に対し、分子研としての独自性・先導性をどう見出していくかがセンター発展のキーとなるであろう。

分子スケールでの電気伝導測定や有機デバイスの評価は、この中で衆目の一致する研究主題の一つであり、小川教授、冨田助教授のコンビが優れた独自の視点に立った研究を押し進めて来た。今後もこの方向は重要であり、合成化学者とのセンター内連携、分子集団研究系（薬師、小林グループ）、極端紫外光科学研究系（宇理須・小杉グループ）などとの所内での効果的連携（例えば有機伝導体を用いたナノスケール素子の開発など）を含めて強力に推進されることを望みたい。ナノスケールでの測定は有機伝導体などのバルク測定とは異なる独自の技術を要するものであり、今回これまでセンターの活動の中心の一人であった冨田助教授が転出されるのに際し、後任ポストの確保、および優れた後任者の選定が本センターの活動の次のキーポイントになると思われる。この分野は世界的にも競争が激しく、グループのスケールが勝負の分かれ目になるところがあるので、折角の優れた研究の方向が十分に活きる陣容を整えられることが望まれる。これに対し、ナノスケール分子触媒の開発や、ナノ光計測は、分子研独自のものに発展する可

能性を持っている。既成分野との差異をいかにして打ち出し、ナノサイエンスに本質的寄与を行えるかが次の課題であろう。また、合成関連分野においては、大学の合成グループが多くのメンバーのもとに多様な研究活動を行っているのにそのまま競合するのは有利でないように思われる。焦点をある程度絞り、できれば他分野研究者と互いに真剣に相手分野に入り込んでの共同研究を行うといった活動により、関連分野に本質的貢献を行い、存在感を示すことができると思われる。

流動研究部門は、現在は従来の組織から引き継がれたメンバーが多いようであり、また制度的な変化はあり得ると思われる。本センターのイニシアチブのもとに客員などの形で実質的に継続することができるのであれば、有効に用いることで上記のような方向付けを効果的に行うのに役立つであろう。

また、この種のサイエンスでは、新しい解析装置・ナノファブリケーション装置などの装置開発が先端を押し進める有力な手段となる。この点、分子研は強力な装置開発室を有しており、独自の研究手法の開発に有利な立場にある。今後の人事において、この種の装置開発指向の人材の獲得も視野に入れておくのが有効ではないかと思われる。

ナノサイエンスは、優れて学際的要素の強い学問分野であり、物質合成、新しい構造体の作成、その構造・機能の解明、といった諸要素が緊密にからんで進むものと考えられる。従って、各グループの研究活動を活発にするほか、本センター内での協力、研究所全体での協力、さらに所外との協力の全てを活発に行うことが望まれる。センター内での協力は、このようなセンターを設置する重要な理由の一つであり、自らの分野での研究を進展させるだけでなく、互いの分野に真剣に踏み込んでの刺激や協力が求められる。例えば金属ナノクラスターの触媒機能に関する研究がこの成功例となることを期待する。また、このような点に対する組織的な取組として、センター内での研究交流会を行っておられるということであり、心強く思われる。

また、分子研においては、本センターの他、分子集団研究系を始めとする諸研究系・施設・研究センターが関連した研究を行っているので、できるだけ緊密な研究体制を構築することが望まれる。この点では、山手地区と明大寺地区とかなり離れた場所にいる双方のメンバーが、半定期的にでも研究交流を行う機会を組織的に設けることが有用ではないだろうか。

さらに、本センターには、国内の関連分野における拠点としての活動が求められよう。上記のナノ支援共同利用はこの一環と考えられる。さらに、予算的に、また人的負担の面で可能であれば、関連分野の研究者を集めてのナノサイエンス・テクノロジー研究集会(国内・国際)といったものを定期的に開催することも考えられる。例えば阪大産研では、この種の研究集会シリーズを定期的に開催しておられる。このような会合で、分子研内部の関連研究者にも参加を要請し、外部研究者も招いて、独自の視点にたった会議組織が行えれば、本センター独自の「ナノサイエンス」が発信できるのではないだろうか。幸い分子研・岡崎コンファレンスセンターを含めて設備は恵まれているが、人的負担が過重にならないように注意する必要がある。すでに研究者個人では種々の機会を用いてこのような活動を行っておられるのではないかと推測するが、センターとしての組織的取組もあって良いかと思われる。

いずれにせよ、本センターは分子研の将来や、日本のナノサイエンス・ナノテクノロジーにとって大切な方向を担っており、日本の分子科学が築いてきた高度な研究水準をナノスケールサイエンスに展開することにより、所内外に大きな貢献をすることが期待される。

委員 B

(1) 分子スケールナノサイエンスセンターでの分子研の役割、寄与と位置付け

本センターは、平成14年に発足以来、新しい機能を備えたナノ構造体の開発を行っている。さらに新しい科学を展

開するとともに分子科学の研究に共通性の高い物性機器研究設備の集中管理を行い、研究所内外の利用者との共同研究を推進してきている。まだ新しい組織であり本年4月から加わったグループもあり、新鮮で生き生きとした雰囲気を感じられる。分子エレクトロニクスおよびナノ触媒の分野で重要な役割を演じていることは、本センターに属する先生方の多くの論文、学会発表をみれば明らかである。ナノサイエンスの分野は政府が21世紀の日本の科学ならびに産業の柱として推進しようとする重点分野のひとつであり、その中心拠点として本センターの役割は大きい。今後益々その重要性は大きくなると考えられ飛躍的な発展が期待される。

(2) 当該センターの国内、国外での研究分野としての重要度

21世紀はナノの時代であり、分子スケールナノサイエンスはまさに科学のフロンティアである。そのため、これに現在関わっている研究者も多く、今後この分野に参入する研究者も国の内外を問わず増加するだろう。もちろん競争は非常に激しくなる。その競争の中で先頭を走るのがこのセンターの役割であり、責任も重い。新規大型機器導入に努力を払い、その設備を中心として共同研究を積極的に進めることで国内のこの分野をリードしてほしい。

(3) 今後この分野の発展はあるか、どのような方向か

ナノサイエンスということばが使われるようになって少し時間が経過した。とにかくナノサイズのものを作ろうという時代から機能を念頭において原子・分子レベルでナノの構造体を設計していくというところに移ってきている。この方向は益々鮮明になり、光機能、電子機能、触媒機能などをもつ分子をターゲットとした研究が中心となるであろう。

(4) 分子研の当該センターが今後どのように進むべきか

ナノサイエンスセンターの研究教育職員は、様々な研究のバックグラウンドをもっておりこのバックグラウンドをもとにセンターの設置目的である「原子・分子レベルでの物質の構造および機能の解明と制御、新しい機能を備えたナノ構造体の開発ならびにその電子物性の解明を行い、これらが示す物理的・化学的性質を体系化した新しい科学を展開する」ために、各々が自由自在に発想し、研究を進めればよい。その中で共同研究がふさわしいものがあればこれを進めればよい。無理に共同研究を考える必要はなく、あくまでも各々の個性を発揮してほしい。

センター発足以来2年数ヶ月の間に推進してこられた研究はいずれもすばらしいもので、これらをそのまま延長、展開していかれることを望む。また新しいグループも加わり、互いに刺激しあいながらナノサイエンス上の課題に挑戦することで、新しい共同研究の可能性も広がるだろう。

このセンターの設置目的のもう一つの柱である「ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある設備等の集中管理・共同研究の推進」については、新規に導入された920MHz NMRが広く、効率よく利用されるよう維持管理をお願いするとともに、この機器がとりもつセンター内外の共同研究が積極的に展開されることを望む。さらに新しい機器の導入についても前向きな提案と財源の確保をお願いしたい。

(5) 分子研の共同研究機関としての現状と将来への提言

全国の研究者から注目されているのが今年度導入された大型機器920MHz核磁気共鳴装置(NMR)である。理化学研究所とあわせて全国で2台しかない装置であり、利用を望む研究者はかなり多数にのぼるであろう。さらに来年度には固体サンプル用のプローブも導入されると聞いている。液体サンプルの場合には前もって分子研ならびに他の研

究機関に設置されている500MHzあるいは600MHzのNMRで予備測定を行うことで920MHzのマシントimeを節約することができる。これに対して固体サンプルが測定可能な500MHzあるいは600MHz NMRは日本中にほとんどない。したがって固体サンプルを測定しようとすれば直接920MHz NMRを使用することになる。そのためマシントimeをかなり専有することになり効率が悪い。そこで固体サンプルの測定ができる500MHzあるいは600MHzのNMRを当該センターに導入していただくことを要望する。X線がとれないサンプルであっても多くの情報を得ることができる固体のNMRは、ナノサイエンスにとって非常に大きな武器となる。さらに一般にオープンして使用する世界でも初めての装置となる。その点からも一目も早い導入に努力していただきたい。

(6) 分子研に対する建設的批判、提言

分子研の一番の問題は学生を含めてマンパワーをいかに集めるかという点である。立派な施設、設備に対してあまりにも研究員や学生数が少なく、いかにももったいないという感じである。大学院生の授業料を免除し、かつ給与も出しさらに学生寮を作って、その給与の中で充分生活できるような割安な生活環境を提供するようなことをしてもよいと思う。

施設にだけお金をかけるのではなく、人材にもお金をかけ日本の研究のトップを集めることを考えてほしい。大学とは全く違う発想で考えてほしい。学生を集めるというのをやめて研究員をすべて雇用する理化学研究所のような形態に変えてはどうか。それも破格の高給を出してエリート集団を作るといのはどうだろうか。さきがけなどの特別な研究費をもらっている若手をその年限を切って分子研に集めて研究してもらう。あるいは逆に分子研で研究することを前提とする特別の研究予算を立てて募集してはどうだろうか。

委員C

全体像

本センターは原子・分子レベルでの物質の構造および機能の解明と制御、新しい機能を備えたナノ構造体の開発及びその電子物性の解明を行うと共に、それらの研究を効率的に推進するために物性機器、研究設備の集中管理を行い、研究所内外の研究者との緊密な連携協力の下で共同研究を推進することにより、物理的・化学的ナノサイエンスを体系化し新たな研究領域を開拓することが期待されている。

そのために各研究グループ毎の独自テーマの遂行に加えて、今年度からセンター内外での共同研究の推進にも取り組んでおり、その努力に敬意を表する。この時間問題となるのは、共同研究の萌芽を育てる原資をどう工面するか、新たなテーマにどのように限られた人材を投入するかであろう。

また、共通的な種々の機器や設備をそろえ管理提供する場合には、全国共同利用とするに魅力的な設備が肝要であると思われる。その意味で、920 MHzのNMRは固体試料に威力を発揮する最先端機器としてセンターの目玉となると期待される。マシントimeや対象試料の共同利用に対してどのような運営形態を取りうるのか効率性のしきみが重要になるであろう。さらに、NMR以外にもナノサイエンス推進には重要かつ必要な機器があると思われるが、実際、どのような財源を用いて何を導入するかの検討も行われており、ナノファブリケーション設備の導入も候補にあがるなど、センター内外の研究者にとり益々本センターの魅力が増すであろう。

今までの分子科学の枠組みと領域を超え、原子・分子レベルでのナノサイエンスを切り開き、また、新たな対象物に対して積極的な展開を目指す分子スケールナノサイエンスセンターの発足は、極めて時宜を得た重要なセンターとなるものと期待される。

センター全体について

分子科学研究所は設立以来、世界的な拠点として「分子科学」をリードして来ており、現在も、また将来にわたって科学の世界でこの位置を保ち続けるであろう。分子科学研究所が世界をリードする研究所である背景には、新しい科学を発信し続けてきたことがある。今回、評価委員会での説明を受け、分子科学研究所にとって、「ナノサイエンスセンター」の設立がどういう意味を持っているのかを考えざるを得なかった。新しい科学の発信を目的としたものなのか、或いは、世の中の流れを取り入れた、研究所内の改組を目的としているものなのか、という疑問を感じた。組織形態によってそこから生み出されるであろう科学を測ることは妥当とは思わないが、世間に充満している「ナノサイエンス」に対して、分子科学研究所ならではのアプローチを期待するのは、行き過ぎであろうか。

ナノサイエンスセンターは「ナノサイエンス研究を行う」機能と、「ナノサイエンス研究に必要かつ共通性のある設備等の集中管理・共同研究の推進」という機能を担うとされている。前者については、各グループが推進している個々の研究は十分に高いレベルにあり、科学的な価値は疑う余地もない。(各グループの個別の成果については別途ふれることにする) 発足間もない組織であることから、グループ間の共同作業の成果はまだあらわには見えてきていないが、定期的に企画されている研究交流会を通じて新しい共同研究の芽が育ってくることに期待したい。後者については、まだ整備段階にあるが、文部科学省のナノ支援プログラムにより導入されたNMR装置が現在ほぼ整備を完了しつつあり、本装置はナノセンターの中核設備として今後、ナノサイエンス研究の共同研究推進に寄与することが期待されている。本装置により、あらたな化学領域がつくられるであろうことは想像に難くない。分子科学研究所がこれまでに果たしてきた役割を考えると、独自に開発してきた計測装置を基礎として、新しい科学分野に切り込んでいった歴史を忘れてはいけない。特に、レーザー分光を中心とする計測技術のポテンシャルは、分子研の研究を特徴付けるものであろう。独自装置の開発には人と予算が必要であるが、現在のナノセンターの限られた人材のなかで、どこまで実行可能であるのか、はなはだ疑問である。

なお、ナノ支援プロジェクトのミッションとナノサイエンスセンターが担う所内外との共同研究の立場がどういう関係にあるのかはよく理解できなかった。

4-3 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

平成16年度実施の極端紫外光研究施設 (UVSOR施設) の外部評価委員は以下の3名である。菅教授と柳下教授は高度化前の平成12年度評価のメンバーでもある(「分子研リポート2000」を参照)。

菅 滋正 大阪大学教授 (固体分光 を中心に施設評価)

柳下 明 物質構造科学研究所教授 (気体分光 を中心に施設評価)

春日俊夫 物質構造科学研究所教授 (光源加速器を中心に施設評価)

事前に資料(過去の外部評価結果、それに対するこれまでの取組み、現状説明等)を各委員に送付した上で、平成16年12月8日～10日の3日間に委員1名ずつ評価のために来所していただいた。当日は、まず全体の評価方針についてUVSOR施設長(小杉信博)から説明した後、各委員が施設教授・助教授(加藤政博、繁政英治、木村真一)に対して担当業務についてのヒアリングを実施するとともに、UVSOR施設の現場視察を行い、評価結果をまとめていただいた。公表用のレポート以外に所長宛、施設長宛それぞれに、国内の施設間連携、人事政策、研究系との関係などにも触れたコンフィデンシャルなレポートを提出いただいた。さらに、平成17年2月2日に3評価委員、所長、小杉、加藤で合同評価委員会を開催し、意見交換した。評価のまとめはすべて評価委員全員に報告し、それぞれ加筆修正を依頼し全体の評価としてまとめるようにしている。以下は各委員の最終評価報告に基づき項目別に整理したものである。

外部評価結果については平成17年1月よりUVSOR施設のホームページに公開し、共同利用研究者からの意見を聴取しながら施設運営に役立てているところである。また、平成17年2月4日のUVSOR運営委員会でも運営委員間で外部評価結果について意見交換を行った。

4-3-1 平成12年度の評価以降の取り組みについて

スクラップ&ビルドや更新の結果、ビームラインの姿が良く分かるようになった。競争力のあるビームラインをさらに性能向上し、有力グループのビームタイムを通して成果を挙げることが期待できる。この4年間で利用者層の出入りがあったことがうかがえた。毎年1、2グループの出入りがある現状は望ましい状況と考えられる。建設、更新に協力してきたグループが結果的にビームタイムを採択されている現状は好ましい姿である。今後継続的な性能向上を考えると、更新に協力的な有力グループを優遇する形があっても良いものと思われる。いたずらに高エネルギー側への進出を図るよりUVSORの特長を生かして低エネルギー分光に重点を置く戦略は妥当である。テラヘルツ光利用研究や40 eV以下の光電子分光などで今後の競争力が期待できる。

光源系については、新たに教授ポストが置かれ業務委託も1名配置されたので、研究環境は著しく改善された。高く評価する。測定器系についても、大胆なビームラインの再配置をし、6本のビームラインを廃棄した。施設の英断に敬意を表する。施設ビームラインは9本(所内ラインBL8B2の施設利用化後)、ビームライン・スタッフは9名(来年度の補充を含めて)なので、ビームライン・スタッフの研究環境は大幅に改善された。但し、現在、光源関連でしか業務委託(1名)が行われていないので、今後はビームライン関連にも1名配置すべきであろう。当面は所内運用される予定のアンジュレータ・ビームラインBL3Uが高度化の際に建設された。ビームライン分光器の性能はほぼ設計性能の満たすものであり、評価できる。本ビームラインでの研究計画も、世界レベルの研究成果を目指すものである。研究成果を期待している。

光源系職員数が着実に増えてきていることは高く評価できる。特に従来設けられていなかった教授ポストを獲得で

きたことは、長期的視点で光源加速器の運転維持・将来計画立案に責任を持ってあたることが可能となったという点で、全国共同利用施設にふさわしい体制が確立されつつあるという印象を受けるものである。また助教授と適切な役割分担をすることにより、光源開発研究もより一層活発に行えることが期待できる。ただし、現在中堅の加速器研究者の人材難も事実である。助教授ポストの柔軟な運用、あるいは若手加速器研究者の育成も必要であろう。技術職員については、現在2名とのことであるが、光源加速器の運転維持管理のみならず冷却水設備などの保守管理、放射線安全管理などの業務も遂行しているようであり、技術職員の増員もしくは業務委託の拡充が望まれる。

業務委託については、Photon FactoryやSPring-8など、全国共同利用を推進している大型施設では大規模に導入しており、UVSORでも導入されるようになったことは大変に好ましい。現在は施設全体で1名ということであるが、予算措置を継続することは言うまでもなく、今後更に人数を増やしていくことが強く望まれる。技術職員との役割分担についても他の大型施設の例を見ても全く問題のないことは明らかであり、むしろ技術職員の専門性の向上をもたらすものであると考えられる。

高度化改造や光源開発について、少人数であるにもかかわらず、有意義なプロジェクトを活発に遂行してきたことは光源グループのアクティビティの高さを示すものである。しかしながら一方では、少数精鋭主義は長期間にわたる地道な研究を必要とする加速器の開発研究には必ずしも適していない面もある。また、限られた人数で加速器のすべての分野をカバーすることは困難であるので、他機関との共同研究が重要である。加速器研究部門の充実、加速器研究が主体とはいえない分子科学研究所でどのように折り合いをつけるかが課題であろう。また、加速器研究者が研究活動に専念できる体制を構築することも必要である。

4-3-2 光源加速器関連設備について

①光源加速器

平成14年度予算で実現された高度化改造で、光源加速器の基本性能が格段に向上し、建設後20年が経過し老朽化の懸念されていた加速器コンポーネントの多くが更新されたことは、非常に高く評価できる。2005年春に予定されているRF空洞の更新は、同様な観点から重要である。高度化された加速器の性能をより活かすためにも、現在空いている3箇所直線部へ早急にアンジュレータを導入し、また、ビームラインを建設することが望まれる。

しかしながら、依然として一部には20年以上が経過している装置もあり、施設の安定な運転のためには、これら装置類の改良や更新を今後も継続していくことが強く望まれる。多くの装置類は従来の保守・維持費用の範囲で更新を継続していけるものと思われる。今後も従来どおりの予算措置を継続していくことが必要である。ただし、シンクロトロン電磁石電源装置は大型であり、更新には特別の予算措置が必要と思われるが、建設後20年以上が経過し、重故障の場合には長期の運転停止の可能性もあるので緊急性は高いと考えられる。現シンクロトロンのエネルギーは600 MeVと、蓄積リングの運用エネルギー750 MeVより低い。蓄積リングでの加速を避け、さらにトップアップを可能にするためにも750 MeV以上までエネルギーの増強を行うべきであろう。なお、現在の入射に要する時間は短いので、シンクロトロンの繰り返し周波数を下げて電磁石電源の電圧を抑えれば、出力電力を現在のまま、あるいは低減することも可能であろう。

②付帯設備

冷却水、空調、受電設備などの付帯設備も老朽化が進んでいるはずであり、今後も継続して保守管理を行い、必要に応じて更新も行っていくべきである。これらの設備は設備課の管理下にあるが、加速器装置と一体のものと見做すべきである。重故障が発生した場合には施設の運営に大きな影響を与える可能性があり、また、これら付帯設備の性能が光源性能に影響を与える可能性もある。光源グループと設備課は常に連絡を取り合い、設備の状況を把握し、性能維持あるいは性能向上に努める必要がある。

UVSORの建物は老朽化が進んでおり、大規模な改修はともかくも、必要に応じて適切に手を入れていくことが望まれる。建物の外装、内装、エレベータ、トイレ、共同利用者控え室など、適切に改修を進め、全国共同利用施設として恥ずかしくないレベルを保っていくべきである。UVSOR よりも2年ほど建設の早い高エネルギー加速器研究機構 Photon Factory では、最近、建物の内装、付属設備などの改修が行われている。

職員数も増え、海外からの来訪研究員も多いと聞いているが、現在の建物で十分な数の居室や実験室を確保するのは難しいものと思われる。所内で適切な配置転換を行い、隣接する建物など、距離的に近いところに十分な数の居室、実験室が確保されるべきである。

4-3-3 施設利用ラインについて

前回の評価の提言に従って大胆な更新が行われてきた。その成果を見るにはまだ時間不足の感があり、発表論文の形になっているものは多くは無い。今後目に見える形での成果が続々出て来るものと期待している。あえて言えば更新されたビームラインについてもさらに性能向上を行える要素が多々あるのでさらなる投資を行うことで一流の成果を継続的にあげられるビームラインに発展できる可能性の芽がたくさんある。

BL6B, BL5U以外の施設利用のビームラインについては、それなりの役割を果たしているし、それなりの研究成果も出ているので、基本的には現状維持で良いであろう。但し、主に固体の軟X線分光に利用されているBL1A（高い軟X線領域）とBL8B1（中軟X線領域）の内、BL8B1は今後の運営を考える時期になって来たのではなかろうか。

以下に個々のビームラインに関する評価結果を示す。

①赤外領域のビームライン

BL6B（赤外、遠赤外、テラヘルツ）

高度化が行われた赤外～テラヘルツ領域のこのビームラインは世界最高強度のものであり出色である。施設の英断に敬意を表したい。

低エネルギー1 meVまでカバーできるTHz分光は物性科学として広範な利用が期待できる。ハードウェアに強い施設スタッフを擁しているのであるから、このビームラインでの飛躍的な研究発展を期待する。

UVSORの特徴が活かされたビームラインである。成果も上がっている。研究内容レベルも高い。限られた分野ではあ

るが、今のままで一流の成果が上げられるビームラインである。さらに手を加えれば、広い分野で一流の成果が上げられるビームラインにもできる。そのため、もっと予算をつけ、もっと整備して増強すべき。グループあたり長いビームタイムを与えて一回分の実験で論文をまとめられるようにという方針は支持できる。マジックミラー導入で性能が飛躍的に向上したので、今後はSPring-8とは相補的なTHz領域に重点をシフトした研究を強力に推進すべきである。導入されている装置の性能を最大限に発揮することでユニークな研究が多数出ることが期待できる（たとえば磁気光学効果の変調測定など）。

②真空紫外領域のビームライン

BL1B（固体瀬谷）

研究内容は普通だが、それなりの成果が上がっている。汎用ビームラインであるのでコンスタントに利用されている現状で良い。その中で成果を上げるテーマが時々出てくるという形で良い。利用者の責任で実験を遂行する事が望まれる。

BL7B（固体直入射）

それなりの成果が上がっている。利用度はこのままでよいであろう。維持にはあまり予算はいらないと思われ、現状で成果が上げられるはず。基礎データをとるための汎用ビームラインとしての存在価値は大きいので装置の性能維持については施設者側で責任を負う事が望まれる。ビームタイム中の支援は殆ど不要で、利用者の責任で実験を遂行する事が望まれる。つまり十分なビームタイムを与えてユーザーが習熟できるレベルに早く到達する事が望ましい。

③真空紫外領域～低軟X線領域のビームライン

BL5U（高分解能光電子）

成果は徐々に上がっているが、まだ発表論文の形のものは少ない。研究内容は高くなる可能性が大である。手を加えれば一流の成果が上げられるビームラインである。利用度が高く、もっと整備して増強すべき。主に光電子分光実験に利用されている。このリングと光源と電子エネルギー分析器の組み合わせから期待できる成果は極めて大きい。しかし光分光器の性能がそれらに比べて見劣りする。低エネルギーでは光子数が少なく、高エネルギーではエネルギー分解能が世界標準と比べると見劣りする。分光器の更新によって低エネルギー（< 100 eV）での光電子分光に威力を発揮できるビームラインとして国際競争力を持つことが期待できる。

BL5Uでまだ実現されていないアンジュレータ・ギャップと分光器の波長駆動の同期スキャンは、早急に実現すべきである。エンドステーションの光電子分光実験装置は、良く整備されていて性能も世界レベルである。しかし、光分光器の性能が悪いため、光電子スペクトルの分解能は世界レベルから大きく引き離されている。高度化されたエンドステーションの実験装置の性能と高度化前のままのビームライン分光器の性能がミスマッチである。対応を早急に考える必要がある。予算の関係でビームライン更新を早急に行うことが出来ない場合は、現在、1グループしか使っていない所内ビームライン BL2B に移設して研究を展開することを検討すべきではなかろうか。

BL5Uの光電子分光については分光器を現代の技術の先端を蓄積したものに更新することで国際競争力に富むビームラインになることが確実である。現在は光電子分光汎用ビームラインとしてユーザーの拡大を図るフェーズと考えて良

いが、さらに次のステップを平行して計画することが望まれる。つまり UVSOR-II と高輝度アンジュレータ、高性能分光器、高性能光電子分光器の組み合わせで 100 eV 以下の領域で世界をリードできる研究が可能であり、これを UVSOR で推進する意義は大きい。

④低～中軟 X 線領域のビームライン

BL5B (PGM 斜入射分光器)

機器校正専用ビームラインとして、その役割を果たしている。放射光施設としてはこのようなサービスも重要な役割である。利用率は 80% 以上あるので、このまま運営して行けば良い。成果も出ている。あまり予算はいらない。

⑤中軟 X 線領域のビームライン

BL8B1 (SGM 斜入射分光器)

気体専用のビームラインから、NEXAFS 専用に転換されたが、固体のユーザー数は限られていて、利用率が低い (50% 以下)。分光器の性能もかなり悪いので、将来的にはビームラインを更新して、新たな研究プロジェクトを展開する必要がある。

⑥軟 X 線結晶分光領域のビームライン

BL1A (二結晶分光器)

XAFS が測定出来る標準的なビームラインである。研究内容は普通。利用率は 80% 以上であるので、利用度を無理に上げる必要はない。予算をあまりかけずに、現状を維持していくだけで良いであろう。

⑦白色光利用のビームライン

BL8A

分光器が設置されていない、軟 X 線照射専用のビームラインである。利用率はあまり高くない (40 ~ 70%) ようであるが、成果は出ている。このようなビームラインを施設利用として使えるようにしておく必要度はある。あまり維持に予算はいらないであろう。

4-3-4 光源開発研究について

蓄積リング自由電子レーザーについては、発振波長が光共振器用ミラーの性能によって制限されることから、可視・紫外域に限られており、通常型レーザーと競合するために、世界的にも研究は下火になってきている。今後この研究をどのように展開していくべきか、見直すべき時期に来ていることは間違いない。UVSOR の自由電子レーザーは、加速器の安定性が高く、また、ここ数年実用化へ向けた開発研究を進めた結果、極めて安定に高出力のレーザー発振が実現できる状況にある。このため当面は、レーザー発振機構の基礎的な研究、あるいは、自由電子レーザーと放射光の完全同期を活かした応用実験を継続しつつ、2 年程度を目処に今後の研究の展開について方針を固めるのが適切であると考えられる。外部レーザーを利用した光源開発は今後の展開のひとつの方向であり、今後更に検討を深めつつ外部資金の獲得に努めるべきである。

テラヘルツ領域のコヒーレント放射光を我が国の蓄積リングで初めて検出に成功したことは極めて高く評価できる。

UVSORでは世界に先駆けて赤外線領域の放射光利用を展開してきたことはよく知られており、現在も活発に赤外線利用が行われていることから、実用化を意識しつつこの研究を継続するのが適当である。

以上は UVSOR 光源グループの世界に誇るべき研究成果である。今後とも、このような研究が活発に行われる環境（研究費やマシンスタディ用のマシンタイム確保）を保つべきである。加速器は手段であり目的ではない。加速器研究の成果は利用されてはじめて意味のあるものとなる。新しく開発された光源技術により得られた“光（電磁波）”の応用のために、利用側とも密接に協力して研究を遂行すべきである。このために、外部資金の獲得に努力することも必要であろう。また、外部の研究者との連携、博士研究員の獲得などにより研究体制を一層充実することが望ましい。

4-3-5 今後の強化策、将来計画について

①ビームライン利用研究

直入射領域の光電子分光ラインの強化（現 BL7U のアンジュレータと主 RF 空洞の移設によって BL7U を長直線部化して、現 BL5U の成果を発展させる）とテラヘルツ顕微分光 (BL6B) のプロジェクト案の説明を受けた。両者とも UVSOR の特徴を生かしたプロジェクトであり、早急に進めるべきものと思う。但し、前者についてはどのようなアンジュレータを選択するのか（例えば、長尺アンジュレータである必要はないのではないか）、分光器のどのようなマウントを選択するのか等、技術的検討が充分にはなされていない。これらの検討を早急に進める必要がある。UVSOR では、いまだかつて設計性能を満足する直入射分光器が建設されたことが無い。このことを重く受け止めていただきたい。最近、世界レベルの斜入射分光器が BL4B と BL3U に建設され、性能を発揮している。必要に応じて他施設との連携を進めながら、UVSOR のような小型リングが最も得意とするはずの真空紫外光（極端紫外光）領域で世界に誇れる直入射分光器を建設してほしい。

以前は UVSOR の特徴になっていたはずのシングルバンチ運転の要求が、最近、あまりない事は、意外であった。現在、いろいろな反応の実時間観測は、放射光の分野でも主流になりつつある。UVSOR でもシングルバンチ運転の積極的な利用を検討した方が良い。ただし、小型施設であるがゆえにシングルバンチと言えどもパルス間隔が 176 nsec と短く、しかも、寿命を延ばすためにパルス幅が 1 nsec 近くまで広がっているのも、今となっては国内他施設の方がパルス利用実験に適しているのかも知れない（主 RF 空洞の増強により寿命が延びるのでパルス幅を若干、狭くできるが、100 psec を切るような話にはならない）。今後は、国内他施設に先駆けて、バンチスライシングにより発生させたフェムト秒パルスを利用するような新しい展開も必要であろう。

施設スタッフができるだけ広く他の共同利用放射光施設利用を体験しよりよき共同利用のあり方を肌で体験することが望ましい。国内の施設に限らず、国外の施設でも 2－3 週間の共同利用を 2－3 年に一度体験できるような方策を検討することが望ましい。

スタッフが研究できる時間と論文を書く時間の確保は施設の評価を高めるためには必要条件であるので、スタッフ酷使にならないような配慮が施設強化の必要条件と言える。

②光源加速器

将来計画としてトップアップ運転の実現を最優先すべきと思う。自由電子レーザー FEL の短波長化・高出力化のR&Dを進めつつ、その利用研究も同時に行っていく必要がある。これに関連して、現在、光源グループによって行われようとしている極短パルスの発生・高次高調波の発生など、次期光源計画に繋がるR&Dは積極的に進めていただきたい。研究所内のレーザー開発研究者との共同研究を進めるようにすると良い。これらのR&Dの研究成果を踏まえて、世界に例のない斬新な将来計画を立案していただきたい。急ぐ必要はないが、常に心がけていなければならないのが将来計画である。4～5年かけて、光源・利用・レーザー開発の三者で新しい光源について十分に議論を重ね、最終的にオリジナルな光源案にまで煮詰めるのが良いであろう。大変に大きなテーマなので、他施設との連携も視野に入れたほうが良い。

既存の加速器 UVSOR-II に関しては、挿入光源の充実が最優先課題と思われる。利用可能な直線部への早期の挿入光源の導入が強く望まれ、必要な予算措置を取るべきである。トップアップ運転は、平均の蓄積電流を増加することだけではなく、加速器本体の真空路やビームラインあるいは放射光を照射する試料に対する熱負荷が一定となることから、放射光源の趨勢となっているので、近い将来実現すべきである。そのためにもすでにのべたようなシンクロトロン電磁石電源の更新が不可欠である。また、必要に応じて24時間運転が行えるような条件整備を行うべきである。

当面、まずはUVSOR-IIの性能向上を図ることが最優先である。特にライフタイム向上とトップアップ入射には早期に取り組んで欲しい。24時間運転については正と負の効果（影響）を総合的に理解して判断することが望ましい。新光源計画はこれらにめどが立ってから取り組む課題と思われる。

新光源計画については、敷地、人員、他の大規模計画などとの整合性に配慮しつつ、およそ10年後の建設開始を目標に計画を練っていくのが適当と思われる。現在の敷地、人員の規模でできることは限られており、他の機関との連携も考慮すべきであると思われる。

4-4 計算科学研究センター

1977年4月に設置された分子科学研究所・電子計算機センターは、2000年4月より分子科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算科学を含めた岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センターに改組され、2004年4月からの法人化にともない自然科学研究機構・岡崎共通研究施設・計算科学研究センターへ改組されて今日に至っている。この間、一貫して計算科学分野の学術研究発展の先導的な役割はもとより、全国共同利用センターの中心拠点としての役割をなしてきている。外部評価点検項目資料として、

(1) センターの概要

- (a) 自然科学研究機構組織図
- (b) 沿革および歴代センター長
- (c) 構成員
- (d) 計算科学研究センター運営委員会

(2) 共同利用

- (a) 共同利用の運営方針
- (b) 機器構成とキュー構成
- (c) プログラムリブラリー一覧
- (d) システム利用状況
- (e) 成果論文数
- (f) 分子科学分野への貢献
- (g) スーパーコンピュータワークショップ
- (h) 定例会議
- (i) スタッフ主催の研究会

(3) 計算分子科学研究系

- (a) 計算分子科学研究系の新設
- (b) 巨大計算に基づいた分子・物質シミュレーションナショナルセンターの形成

(4) NAREGI（超高速コンピュータ網形成）ナノサイエンス実証研究プロジェクト

(5) ネットワーク等その他の活動

の5章からなる冊子を作成して、これと過去3年間のセンターレポートを外部評価委員の平尾公彦教授（東京大学工学系研究科）と樋渡保秋教授（金沢大学大学院自然科学研究科）に事前に送付して、2004年12月24日の朝9時から計算科学研究センター会議室で各項目の補足と説明を行って外部評価のインタビューを受けると同時にセンターの施設を見て頂いた。センター側からは、中村宏樹（分子研所長）、永瀬 茂（センター長）、岡崎進（センター教授）、森田明弘（センター助教授）、水谷文保（センター技術職員）、矢崎稔子（センター技術支援員）の6名が出席した。

4-5-1 外部評価インタビュー

以下のような意見や課題が提案されて討論が交わされた。

- ・スパコン、汎用コン更新時には電力キャパシティを考慮に入れることが重要。導入後パンクしないように。
- ・更新が5～6年ごととなっているが、5年経つと技術も古くなってくるため新しい更新方法を考えるべき。例えば5年後の目標を高いところに定め、そこへ向かって2～3年ごとに部分的に更新をする多段階更新という方法もある。

- ・10年ほど前から安価で高性能なコンピュータが普及し、研究室でも大規模な計算が可能になった。それに伴い単にハード的なサービスだけを行うような大型計算機センターは存続の意義を問われている。計算科学研究センターは研究を含むソフト面でのサービスをさらに充実し、分子科学のナショナルセンターとしてリーダーシップを取っていくべきである。
- ・計算科学研究センターは分子科学研究の拠点として必要である。そのため、さらに特徴あるセンターとして発展させていくべきである。
- ・岡崎3研究所では分子科学だけでなくバイオやナノなど様々な分野の研究が行われており、他のセンターにはない特徴が打ち出せる。また分子科学の研究手法も多様化しているので題材は豊富にあり、様々な大規模計算に利用できる。
- ・共同利用のサービスも大事だが、国内の計算科学分野研究のリーダーとして魅力ある提言をする。
- ・ハードだけでなく、ソフト面でもネットワークを構築する。ヒューマンネットワーク、即ち「人が集まる」こと。特に今後はアジアの研究者へシステムを開放してはどうか。分子研で学んだ人が母国へ帰ってからシステムが利用できることが重要。具体的には共同研究を重視し、セキュリティの確保にも配慮すべきである。
- ・今年度からの大規模計算用のキュー改善は結構なことである。センターではさらに通常の研究室ではできないような大型計算を目指すべきである。
- ・重要であるにもかかわらず、大規模な計算を伴う研究が思うように増えてはいない。大型ジョブを使うように地道に呼びかけることが重要。
- ・当センターの短中期の明確な目標、方針を打ち出し、魅力あるキャッチフレーズを発信していく。
- ・コミュニティのサポートを得ることが必要。研究会等でユーザの声を集め、センター利用の研究成果とともにセンター存続に役立てる。
- ・計算科学は将来が見えていない楽しみな分野。従来の学問とは異なる価値観や統合性があり、新しいものを生み出す力がある。しかし、計算科学を教える機関が少ないため分子研が教育プログラムを打ち出し、若い研究者の育成を目指す。
- ・集中講義などの教育プログラムは単発では意味がない。継続して定期的に行うことで分子科学の将来について若い研究者を交えた話し合いの場となる。若い人に夢を与えること重要。
- ・上記のような新しい事業を展開するために、人員増も含めて組織の充実を図ることが望ましい。
- ・大学と異なり大学院生という戦力が不足している分子研では人員の確保にも工夫が必要。研究、技術、事務はそれぞれ責任を持った形で運営することが望ましい。事務系のトップがセンター長を務めることもありえる。

我が国唯一の分子科学計算のための全国共同利用センターとして大きな貢献をなしてきているが、新しい特徴を打ち出して、分子科学を基盤とする国内の計算科学の裾野を広げて、国際的に先導的な研究の発信拠点としてのさらなる強化と進展が強調された。このためには、共同利用のためのハードウェアとソフトウェアの充実したサービスばかりでなく、計算科学研究のナショナルセンターとしてリーダーシップを取っていくことが求められた。また、計算科学研究分野の若い研究者や大学院生の育成のための教育の重要性が提言された。これらを実行するために、センターの人材の確保と補強の必要性が指摘された。

4-5-2 外部評価委員の報告

委員A

分子科学研究所は創立以来、わが国における分子科学のレベルを引き上げるとともに、分子科学における世界の最

先端の研究拠点としての役割を担ってきた。同様に分子科学研究所の計算機センターは最新の計算機を分子科学の研究者に提供することにより、わが国における計算化学、シミュレーション研究に多大の貢献をしてきた。特に創立後の10年間は、大学における計算機事情が悪かったせいもあり、当計算機センターの果たした役割は大きい。当時、日本中の多くの分子科学研究者が分子科学研究所や計算機センターに集った。計算機を利用する目的で分子科学研究所を訪れた研究者や大学院生は互いに交流を深め、研究面で活発な議論を展開した。こうした交流から共同研究に発展した例も少なくない。計算機センターは、結果として、競争的な環境で研究者の連携の場を提供してきたといつてよい。同時にわが国の計算化学あるいはシミュレーション科学のレベルを一気に世界的レベルまで引き上げた。計算機センターのミッションは創立以来30年近く経った現在も変わることがない。世界のトップクラスの研究レベルを維持するとともに、わが国の分子科学研究者に最新の計算機環境を提供している。

しかし計算機をとりまく状況は創立当初とは大きく変わっている。ネットワーク環境が大幅に改善されたこと、廉価な計算機が普及することで大学や研究室の計算機能力が大幅に充実したことにより、研究者は分子科学研究所の計算機センターを訪れることはなくなった。もっぱらネットワークを介して分子科学研究所の計算機を利用するか、あるいは研究室の自前の計算機を利用するようになってきた。かつては多くの研究者で賑わっていた計算機センターの2階にある計算機利用者控え室も現在は閑散としている。コンピュータネットワークの発展が逆にヒューマンネットワークを弱めるという皮肉な結果を招くようになってきている。こうした現象は分子科学研究所の計算機センターばかりではない。全国共同利用の大学の計算機センターでも同じような状況にある。利用者数が激減し、その存立自体が議論の対象になろうとしている。おそらく大学の計算機センターや国立研究所の計算機センターは早晚、統廃合されるであろう。大学の計算機センターは図書館機能を備えた情報基盤センターの色彩を濃くするであろうし、研究所の計算機センターは分野別のナショナルセンターとして選別されるであろう。

計算科学研究センターはどうあるべきか？ これまでわが国の分子科学の発展に果たしてきた役割を考えるならば、分子科学におけるナショナルセンターとして一層の発展が望まれている。そのためには分子科学の研究者、学会のこれまで以上のサポートが何より必要である。同時に計算科学研究センターは利用者の要望に応えるべく努力すべきである。最新の計算機パワー、研究室レベルの能力とは1桁あるいは2桁以上高いパワーを備え、長時間jobや超パラレルjobを可能にし、計算化学、シミュレーション分野のチャンピオンデータがいつもこの計算機センターから生まれるような環境を実現せねばならない。ハード面ばかりではなく、ソフト面での充実も一層、重要となる。それがナショナルセンターたる所以である。利用者はそれに応え、時間に耐えうる成果を出させねばならない。両者の緊張感ある連携がナショナルセンターとしての計算科学研究センターの地位を確立することになる。現在の計算科学研究センターは少数の教員と職員の献身的な努力で維持されている。ナショナルセンターを目指すのであれば、計算科学研究センターの人的パワーを抜本的に補強する必要がある。

望むべくはかつてのように多くの人が出入りする計算科学研究センターにしていだきたい。これは分子科学研究所の課題でもある。研究所は人がすべてである。傑出した人材を揃え、優れた研究成果で世界のリーダーシップをとることが必須条件である。それによつてはじめて全国の分子科学者や若い大学院生が研究所に魅力を感じ、研究所に足しげく通うようになる。全国規模のプロジェクトの実施やシンポジウム開催、夏の学校など若手研究者や大学院生の育成プログラムを実施し、分子科学のセンターとしての役割を果たさねばならない。

現在いろいろな方面で急激な国際化が進んでいる。分子科学研究所はわが国だけでなく、世界の研究者にとっても魅力ある研究環境を実現するためにさまざまな取り組みを行ってきた。同じことは計算科学研究センターにもいえる。そろそろ計算機パワーを国外、特にアジア地域の研究者に開放することを考える時期ではないかと思う。実施に移そ

うとするとセキュリティ問題をはじめ難しい問題があることは承知している。しかしぜひ実現していただきたい。

委員 B

分子科学研究所は我が国唯一の分子科学に関する研究所である。従って、その社会的および学問的責任は極めて重い。その意味で分子科学研究所は我が国の分子科学をリードする役目を必然背負っていると言わざるを得ない。その中で計算科学研究センターをどのような位置づけにすべきか自ずから決まる部分が多い。すなわち、分子科学研究を支える研究センターとしての役割は極めて大きなものがある。ハードの提供としての計算センターから脱皮し、ハードおよびソフトの両面から計算科学研究を発展させる大きなインフラ的な存在となることが避けられないと考える。インフラとは単に“もの”だけをさすのではない。計算科学研究が学際的であり、かつ計算に必要な種々の技術を必要とすることが明白であることから、これらをサポートあるいはリードできる人材の確保こそ望まれる。とはいえ、我が国には計算科学を目的とした他の類似の研究所、大学（研究室）もあることを考えれば、分子科学研究所および計算科学研究センターの特長を明確にすることなくして明るい将来の展望が得られないとも考える。これらの部分的には矛盾する観点を全てクリアすることは難しいかも知れないが、計算科学研究センターとして重要であるとする幾つかの点について個別的に述べたい。

（１）分子科学は計算科学の発展なくしてありえない

分子科学はあらゆる物質科学の基礎となるものであるが、計算科学は物理、化学、生物学などを横断することが可能な（唯一の）科学であること、また異なるスケールをも横断して科学する手法としても極めて有用なものである。今後もこのような計算科学の特長は失われそうもない。このような意味で分子科学研究所に計算科学の研究者が相当数の規模で必要であるとする。さらに、計算科学研究所に隣接する他の研究所群（バイオ、ナノなど）の協力を前提に考えれば、計算科学を必要とする考えが更にアップすることは疑いない。このような地理的な特長とそれらの学問の関連の大きさを最大の武器として国家的な観点にたち、全国規模の計算科学研究（所またはセンター）を発想することに賛意を表す。そのために如何なる理論武装しなければならないかが問題であるが……。

（２）計算科学は実験科学の側面を有する

計算科学はコンピュータを実験装置とした実験科学でもある。このことは以下のことを意味する。まず、最先端のコンピュータ（実験装置）群が不可欠である。このコンピュータ群には高速演算可能な計算機もあれば、並列計算を得意とする計算機もあるが、解析を得意とするコンピュータ、動画像を行う端末装置も含まれる。もちろん、ソフト面の支援も重要である。これらの装置は実験装置と同じく、賞味期限があり、最先端の実験装置としては長くて５年程度であろう。従って最先端の計算機環境を保持し続けるには相当規模のお金が必要である。計算科学研究センターの重要な役割の一つに、これらの研究環境を維持し、全国共同利用のサービスを一部行うこともあることを忘れてはならない。多くの大学の研究室で大型の計算を行うことは現在でも困難である。さらに高価な計算ソフトをはじめ動画像装置などを研究室毎に用意することは不効率でもある。最先端の装置を導入・維持し、その使用法に関するコンサルタント的なサービスをも行うことが可能な全国的な機関がどうしても必要である。

（３）計算科学の教育は大学のカリキュラムに少ない

計算科学を専門とする学科は例外を除いて皆無に等しい。計算科学の教育は既存の学科の中のごく一部のカリキュ

ラムとして行われているところはあるが、コンピュータシミュレーションを必要とする幅広い層に役にたつには質量ともに程遠いものである。現在のコンピュータシミュレーションではMO（分子軌道）、MD（分子動力学）、MC（モンテカルロ）を組み合わせた方法が主流となりつつあることから、MOを中心とした計算化学とか、第一原理計算 and/ or 物理モデルといった狭い内容では実際の研究との距離が大きく出てしまいかねない。このことを一部改善するためにも計算科学研究センターが全国の大学院生や若手研究者を対象とした計算科学のカリキュラムを積極的に行うことを提案したい。大学の授業にないものを定期的に（たとえば夏とか冬）行えば受講者にもまた主催者側にも相当の効果（意味は異なるが）があるように考えるが如何だろうか。蛇足ながら、この授業の担当者となるのは必ずしも計算科学センターのスタッフである必要はない。全国に関連する専門家のボランティアを基本とすることがよい。

以上の観点からみても、現行の計算科学研究センターの評価はおおむね良好と判断したい。共同利用サービスの充実、全国共同研究（NAREGI）の推進、研究活動のいずれにおいても良好と判断できる。また計算分子科学研究系の新設により研究活動に積極的な姿勢は評価できる。将来構想としてのシュミレーションナショナルセンター構想をより具体化し、全国に先駆けて使命を果たすことの責任を期待したい。

4-5 運営顧問等による点検評価

4-5-1 Graham R. Fleming 外国人運営顧問

March 10, 2005

Professor Hiroki Nakamura
Director General
Institute for Molecular Science
Myodaiji, Okazaki 444-8585
Japan

Dear Hiroki,

I write in connection with my second visit as Foreign Councillor for IMS on January 11 and 12, 2005.

In addition to hearing of the research plans of a number of individual scientists, I also discussed with a senior group of IMS faculty the current state and future plans in two areas: photo-molecular science and nuclear magnetic resonance spectroscopy. I will concentrate my comments in this letter on these two topics.

As you know, we discussed, during my 2004 visit, that the laser center at IMS needed to be rejuvenated and refocused. I was very impressed with the care with which the new plan had been thought through and with the progress made in the space of one year. The goal of re-establishing molecular photoscience as a central discipline in IMS is one I strongly support. The development of new instruments and the collaboration with UVSOR and with groups outside IMS are important steps. Very exciting was the new joint project with RIKEN. This builds on some great strengths of IMS and is very likely to lead to important new science and a real intellectual center for photoscience at IMS—an area that IMS has historically been a major contributor to on the international stage. A really cohesive group of active and high quality scientists has come together, and I look forward to hearing of the progress made in areas such as imaging, high precision coherent control, quantum computing, *etc.*

The second area is a radically new area for IMS—the application of ultra high field (920 MHz) nmr to complex molecules, including proteins. The spectrometer itself is exceedingly impressive, and, as far as I am aware, the ability to do solid state nmr at this field is unique and should be exploited to the maximum. I also believe, particularly in the case of solid state spectroscopy, that the strong connection between theory and experiment will be needed to ensure that the most innovative experiments that perhaps can't be carried out at lower field, are carried out. I also strongly encourage the formation of an advisory board to review proposals for outside use of this extraordinary machine.

This is a very important new direction for IMS science, and there are two very important issues to address to make sure the opportunity is fully realized. First, maintenance funding for liquid helium, *etc.* is urgently needed. Second, a strong case can be

made for provision of an intermediate field machine (500–600 MHz) to make sure that the time on the 920 MHz machine is properly utilized. Finally, IMS should consider expanding its research staff in this crucial and exciting area.

As always, I was impressed by the science program at IMS, and I hope you find these brief comments useful in your planning.

Yours sincerely,



Graham R. Fleming

Deputy Director

Lawrence Berkeley National Laboratory

Director (Berkeley), California Institute for Quantitative
Biomedical Research, UCB, UCSF, UCSC

Melvin Calvin Distinguished Professor of Chemistry
University of California, Berkeley

4-5-2 土屋莊次運営顧問 分子科学研究所への一提言

分子科学研究所（以下分子研）の創設以来4半世紀余を分子科学の研究者としてその影響を強く受けながら見続けて来た者として、分子研のあり方について思うところを率直に述べる。分子研は分子科学の研究を推進する中核としての大学共同利用機関である。ここで、共同利用とは、大学で設置不可の研究設備を広く大学に供するという意味ではない。もちろん、UVSORやスーパーコンピュータなど共同利用は存在するが、分子研に期待される主要な任務は、分子科学と関連分野において大学の研究グループを先導する役割を果たすこと、また、大学との人事交流を含む研究交流によって、この分野の研究を活性化することである。分子研は、その責任を果たすために、これまでの努力をさらに進展させるよう期待されている。

1. 組織

分子研は分子科学とその関連分野の研究を先導できるような人材を採用し、国際的にもトップクラスの研究環境を構築してきた。現在の人事制度は、おおむね分子研の目標を達成するために機能してきた。創設以来の研究系・部門の組織は、個人研究を基礎として自由な発想で新しい学問分野を開拓する目標に対応しているのに対して、山手地区に新設された研究センターは特定プロジェクトを掲げる研究組織のように見える。後者のプロジェクト研究については、もっとも適した弾力的な組織編成が望ましいのではないかと考えられる。

法人化によって、従来の部門制の構成も大胆に見直すことができよう。分子研では、講座制をとる大学に比べて助教授がもっとも創造力の高い年齢において自立した研究グループを持てるために、独自の成果を挙げる実績が示されている。助教授の教授への昇任禁止はプラスに作用している面があるが、助教授が学問の流れを創成して、関連する研究グループのリーダーとなるような時間的余裕を与えられないことも事実である。分子研は大学その他の機関に極めて優れた人材を供給している反面、研究の継続性を失うことにもなる。教授の役割は、当該分野のリーダーシップ

をもつような業績を挙げ、かつ、人材を育てること、主幹・センター長などの管理責任を果たすことであるが、教授・助教授から成る部門制度が分子研の将来にとってふさわしいものであるかどうか検討されることを希望する。所長のリーダーシップの下で、研究組織を弾力的に運用できる道を開くことは、検討事項の一つであろう。その場合、研究実績・研究計画の評価を厳格に行うための所長の諮問機関が必要となろう。

助手の任期制と助手・助教授の昇任禁止の故に、分子研は大学・研究機関に多くの人材を供給する役割を果たしてきた。しかし、分子研で培った創造力を転出先において発揮できなければ、この分野の学問水準の向上につながらない。分子研は、大学との間の相互交流の努力を通して、大学とともに高度な問題意識の下での研究環境を保つことに寄与することを期待したい。一方、大学側においてもオープンな人事を行い、研究の活性化のために妥協のない選択をされるよう希望したい。分子研の存立基盤は大学にあるわけで、大学側でも分子研についてそのような認識をもって行動することが望まれる。

2. 研究交流

分子研は岡崎という地方都市に位置する関係からか、極端にいうと、メンバー全員が寝食を共にするという例えが可能なほど、メンバー相互の交流が密となる。単に研究上の交流だけでなく、生活に根ざした全人的な交流が可能なのではないかと察しられる。サイエンスは芸術のような人間活動の所産であるわけで、そのような相互理解は非常に意義深いことと考える。大都会の大学や研究所では得ることのできない環境である。しかし、近年、山手地区にセンターが設立され、分子研のメンバーが分断されて、交流が妨げられる結果、分子研メンバーの一体感が失われているのではないかと不安に思っている。創造性のあるサイエンスの拠点を維持する上から、何らかの工夫を考えて欲しい。

分子研の創設時は、分子分光学と量子力学が車の両輪ようになって、分子の新世界を探検する時代であったが、現在は、方法論・研究対象ともに多様化している。分子研の国際的にも誇ることでできる特徴の一つが理論グループの存在である。質量ともにユニークな力をもつ理論グループとの協力によって、新しい学問分野を拓く潮流を創り出すことができるのではないかと期待している。もちろん、物質開発やレーザー開発など共同研究の組み合わせの選択肢は、他にもいろいろあり得る。そのようなことが可能なのが分子研であって、大学では困難な研究がここでは実現できる。分子研メンバーは、分子研の特徴を活かして、相互の厳しい批判と討論を通して、創造性を獲得して頂きたい。

3. 財務

研究機関にとって、もっとも大切なのは人事と財務であろう。後者について、筆者は詳しい情報をもたないので、責任あるコメントはできないが、法人化後も従来と変わらない予算配分を期待したい。ただ、文科省の所属であったときより、より自立性が求められるものと思う。分子研の主要な研究目標の一つである「分子素子」には関心をもつ企業が存在するであろう。その他にもレーザー開発、物質開発などにも同様なケースがあり得る。特許の獲得や企業との接点を探るための組織を考慮して然るべきと考える。もっとも、これは機構全体の問題であるかも知れない。

一方、個々のメンバーが科研費やJSTなどの競争的資金の導入に積極的になるのは当然のことであろう。その点では、分子研は極めて有利な立場にあるが、特別推進や基盤S、JST戦略などの大きな資金を獲得するためには、数研究グループが連携する必要がある。それによって、大学では不可能な新鮮なプロジェクトが生まれる可能性がある。また、分子研は、分子科学の分野を先導するという責任から大学の研究グループと組んで特定研究のようなプロジェクトを立ち上げる基盤となるべきである。分子研研究会（岡崎コンファレンスの復活も望まれる）はそれらの組織のために重要な役割を果たしてきたし、今後もそれは変わらない。

最後に申したい分子研への希望は、メンバー全員が世界中探してもないような素晴らしい環境に自分は居るのだという自覚と責任をもってサイエンスを楽しんで頂くことである。

以上、単なる思いつきであって、現実的でない提案もあると思うが、分子研への期待感から出たものとして許して戴ければ幸いである。

4-5-3 V. Osherov 外国人客員教授 (2004.9 ~ 2005.1)

原文

Professor Hiroki Nakamura
Director General,
Institute for Molecular Science
Miodaiji, Okazaki 444-8585
Japan

November 26, 2004

Dear Professor Hiroki Nakamura,

During the last ten years I have visited the Institute for Molecular Sciences several times. It is a proper time to make up the reasonably complete representation about the scientific researches, the IMS functioning as the whole and the changes of the last years. In the letter I would like to read off my opinion for these points.

At the first, I confirm the IMS advanced character of the scientific researches, which is more established with the time. In my field of activity many scientific results found by the IMS collaborators during the last years have the truly fundamental character. In fact to nowadays the IMS has become the world leader in the scientific researches of the many important molecular processes.

For the last years the level of the scientific communication inside the IMS has increased notably. The many seminar reports and lectures originate the new researches and lead to the creating of the informal groups working under common problems.

The IMS service staff is working very neatly. The necessary technical and informative help has become more operative and more complete.

Making no pretence of my IMS experience entirety, I would like to suggest the expansion of the international collaboration by the formation at the IMS the international groups for the extra complicated scientific problems study for the period two-three years.

I think also the invited professors can contribute to the student process by the lecture courses in the special problems. On-line access to the scientific journals should be extended.

Sincerely,

Professor



V. Osherov

過去10年の間に、私は分子研に数回滞在しました。分子研の学術研究上の成果や運営、及び、過去数年における変化について総括的まとめを申し上げるのに良い時期かと思います。この手紙でこれらの点についての私の感想を申し上げます。

先ず何よりも、分子研の学術研究上の発展には大変優れたものがあり、それが時と共に確実なものとなっていることを確信します。私が専門とする分野においては、協力研究者達によって今までに達成された成果は真に基本的なものであります。事実、今や分子研は、多くの重要な分子過程に関する研究において世界のリーダーとなっています。

分子研内における学術研究上の交流も盛んになっています。多くのセミナーや講義によって新しい研究活動が誘起されると共に、共通の課題に関するインフォーマルな協力研究がなされる様になって来ています。

分子研の事務の方々も大変手際よく働いておられます。必要な技術面及び情報面での支援も効率的で行き届いたものとなっています。

私の分子研における経験から、正直な考えとして次の様なことを提案したいと思います：より複雑な新しい学術的課題について国際的研究グループを分子研に形成して、2－3年の期間国際的共同研究を実施する。

また、外国人客員教授は夫々の専門分野に関する講義を行い教育課程に貢献できると思います。それから、学術雑誌へのオンラインサービスをもっと拡充されることを勧めます。

敬具