

7-2 光分子科学研究領域

国内評価委員会開催日：平成 19 年 8 月 8 日（水）

委員 太田信廣（北海道大学電子科学研究所 教授）
春日俊夫（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授）
高橋 隆（東北大学大学院理学研究科 教授）
大島康裕（分子科学研究所 教授）
大森賢治（分子科学研究所 教授）
岡本裕巳（分子科学研究所 教授）
加藤政博（分子科学研究所 教授）
小杉信博（分子科学研究所 教授）

国外評価委員面接日：平成 19 年 10 月 15 日～17 日

委員 Alfred Laubereau（Professor, Technische Universität München）

7-2-1 点検評価国内委員会の報告

国内委員による評価は、面接により、以下の研究グループの研究活動に関して行なった。

光分子科学第一研究部門 岡本グループ、大島グループ
光分子科学第二研究部門 大森グループ
光分子科学第三研究部門 小杉グループ、見附グループ、菱川グループ
分子制御レーザー開発研究センター 平等グループ
極端紫外光研究施設 加藤グループ、木村グループ、繁政グループ

(1) 全体討論

所内委員 F H：（組織の再編と領域の新設について概要説明）

所内委員 F：このような組織再編に関して、所外の立場からのご意見やアドバイスがあれば伺いたい。

外部委員 B：UVSOR のメンバーが施設と領域の両方に入っているのはどのような趣旨か。

所内委員 F H：施設のメンバーは二重国籍のような形とし、施設外のメンバーも施設を自分の問題と考えることを目論んでいる。

外部委員 C：そのような形にしたことにより具体的に新たな協力体制はできたのか。

所内委員 H：具体的には今後の課題と考えている。レーザーセンター等で検討中である。自由電子レーザー等の将来構想もあり、UVSOR 教授がレーザーセンターを併任している。

外部委員 A：領域内の各グループの方向性のバランスが取れている感じがする。各種波長，時間領域の分光，空間分解分光，高強度光等。一方で，グループの独立性に固執せず，数グループで一つのことにとりかかるようなことを考えてもよいのではないか。

所内委員 E：エクストリームフォトンクス事業はそれに近い考え方で進めている。レーザーセンターでは共同利用の負担が減り，研究上 3 本の柱（光源開発，超高速・量子制御，空間分解観測）を進めるような方向で考えている。

外部委員 A：昨今では理論との共同研究も大切になっているが，これはどうなっているか。

所内委員 E：一部の研究グループでは理論のグループとの共同研究を開始している。

外部委員 A：大学等では、特任等の枠組みを利用して、グループ内に異なるバックグラウンドを持つメンバーを入れるようなことも行われつつある。いずれにしても、バランスはよく取れた構成だと思う。

外部委員 C：施設のメンバーが領域に入ったことで、施設の研究者が自分の研究を進めるにあたっての環境にも配慮されているか？

所内委員 H：UVSOR の研究者は、自分専用のビームラインを作る、施設のビームラインを用いて自分の課題を進める等のことを行っている。以前に比べてサービスの負担は減っている。

外部委員 C：サービス中心でなく、自らの研究でアクティビティを是非上げてほしい。

外部委員 B：分子研内では UVSOR は大きな組織だが、その中で大きな装置を維持するグループ、使うグループの切り分けをどの程度しているか。

所内委員 H：現在では全グループについて、自分のグループのアクティビティを上げることを優先している。人事を進めるときには研究面を重視して採用する。

外部委員 B：技術職員に維持管理を任せる等の方法で、各グループがより研究アクティビティを挙げる環境を作ることはいかないか。技術職員への高給与が前提となるかもしれないが。

所内委員 H：通常のビームラインではそれに近くなっている。研究者は維持と老朽化対策よりも、将来を見据えた開発を優先して行い、維持については技術職員にかなり任されている面が大きい。それが結果的に UVSOR の性能を時代に合わせて維持することになる。

外部委員 A：大学では技術職員が大幅に削減されているが、分子研ではその点はどうか。

所内委員 H：研究技官が減っている。施設は現在までのところ、減らさずに来ている。

所内委員 F：施設の技術職員が大きく削減になれば、分子研の存在意義の根幹にも関わってくる。

外部委員 A：施設の技術職員の確保は守ってほしい。退職後の再雇用、技術継承等はどうなっているか。

所内委員 H：技術課長になってからの退職の場合は、既に現場を離れており、再雇用は困難になる。今後、必ずしも技術課長からの退職のケースだけではなくるので、再雇用を考える必要はあるだろう。

外部委員 A：研究グループの人数が 5 名前後で、大学と比べて人数が少ないが。

(所内委員)：本当は是非とも増やしたい。

外部委員 C：総研大の学生数はどの程度か。

所内委員 F：定員としては 1 学年 12 名程度。

所内委員 H：平均でその程度だが、実際に分子研 2 専攻への志望については合成系が多く、光分子科学領域への志望学生は比較的少ない。受託学生等が増えればよいのだが。

外部委員 A：公費を人件費に使える自由度が必要では。研究者の質と数は重要なので、予算に関する自由裁量があるのであれば、必要に応じて増やせるようにするのがよい。

所内委員 F：現在大学附置研に関して見直しの圧力があり、その先には分子研を含む共同利用機関にもその圧力がかかる可能性が十分ある。そのときに、共同利用機関としての機能をうまく果たしているかどうかの重要になるが、その側面に関する分子研の評価をお尋ねしたい。

外部委員 A：例えば今年度開始した化学系ネットワークを考えると、大型装置の共同利用等は、大学の教員（特に准教授や助教）が独立性を保っていくには必須である。小さいグループになると、大きな装置をグループ単位で持ったり維持することは困難になる。今後グループの細分化が加速することは十分ありうる。分子研はその役割においても重要である。

所内委員 F：聞くところでは、現状では化学系ネットワークの大学間の利用が少ない点が問題で、改善の必要があるとのこと。現場でのこの事業に対する必要度はどうか。

外部委員 A：現場で、まだ「あそこに行けばあの装置が使える」という意識がまだ十分にない。周知が進んで一般的になれば、相互利用も頻繁になるのではないか。アイデアのある研究者は積極的に利用するはず。

所内委員 H：大学の一部の研究者は大きな予算を持っていて、そのような事業を必要としなくなっているが、一方で予算削減が厳しく、このような事業に対する要求が高まっているようにも感じる。

外部委員 C：自分も分子研の共同利用の枠組みは利用させてもらっている。共同利用は重要な側面として機能していると思う。しかし分子研のレベルを保つためには、それだけでよいはずはなく、しっかりした研究者をおいておかないと、大学との競争にも勝てなくなってくる。共同利用と独自研究の両方が必要である。

外部委員 A：その意味では、学生が少ないというのは困難な状況。

所内委員 F：大学と連携大学院を組むという動きが分子研内でも一部で検討されている。

外部委員 C：最近の学生は研究設備等の面を結構よく見ており、それで志望先を考えている。分子研では設備が充実しているが、学生の志望の状況はどうか？

所内委員 F：学生の志望は多くなく、集めるのが大変である。博士後期への入学金等も問題である。

外部委員 B：入学金は、何とかして免除すべきである。

外部委員 A：大学では COE 等の予算があり、学生に対するケアが手厚くなってきている。そのような手段を使って、学生の引止めに必死である。大学の中でさえ大変な状況である。

(2) 国内委員の意見書

委員 A

I. 研究領域の評価

光分子科学研究領域に所属する岡本、大森、大島、菱川、平等、松本氏らの各グループは、何れもレーザーが関与した研究を進めているが、そのレベルは総じて極めて高いと評価できる。

(1) 分子研の役割、寄与と位置付け

分子科学研究所の役割は、分子科学の研究分野において世界をリードし、世界にその成果を発信し、社会への学術的および文化的貢献を果たすことにあると思われる。分子科学の大きな柱として、電子構造や分子構造に関する研究、種々の反応ダイナミクスとその機構解明に関する研究、分子集合体により形成される機能物性研究が考えられており、さらに最近では生命現象の分子論的解明も対象となっている。これらは勿論、お互いに強い相関をもっている。今回の評価対象グループは、分子科学の中でも光、特にレーザーが関与した研究を行っている。岡本氏らのレーザー光を用いた独自の二光子励起蛍光イメージング分光計測法の開発による金ナノロッドの研究はナノ粒子の電子構造に関する研究であり、大森、大島、菱川の各グループの研究は、生成する電子状態、振動状態の制御、さらには反応ダイナミクスの制御をレーザー光により行うものである。平等グループは光源としてセラミックを用いた固体レーザーの開発を進めている。松本グループは触媒反応等も密接に関係する表面吸着種の電子構造や反応ダイナミクスをレーザー

光を用いた分光法の開発により進めてきた。このように研究の方向性は、主にレーザー光を用いた構造と反応ダイナミクスの解明およびその制御を目指しており、いずれも世界をリードする成果につながっている。

(2) 各研究分野の研究内容と各研究グループに対する個別評価

岡本氏らは、近接場二光子励起分光・イメージング測定により金ナノロッドの励起状態の波動関数の形状を顕微分光学手法で初めて直接明瞭に可視化することに成功し、関係する一連の研究を精力的に行っている。金の二光子励起発光を用いた研究を最近よくみかけますが、その先鞭をきった研究といえる。また金属微粒子の集合体では、光照射により微粒子間の空隙に強い光電場が発生し、それが表面増強ラマン散乱の主な起源になると理論的に考えられていたが、二光子励起発光イメージング法を適用し、回折限界以下の空間分解能で光電場を可視化することに成功し、実験的にその妥当性を明らかにしている。これらの研究は非常に高く評価されるべきである。今後、これらの研究がどのように進展するのかに多いに注目したい。

大森氏らは、二つの分子波束の量子干渉をコントロールできることをお互いの位相がアト秒時間スケール以内でロックされている対のフェムト秒パルスを使って波束を発生させ、別のフェムト秒パルスにより時間発展を観測することにより明らかにしている。量子波束の衝突と干渉がリアルタイムで観測されたのは、非常に優れた業績である。量子干渉の時間発展がロックされたレーザーパルス間の相対位相の関数として変化することを示し、このことを利用して分子の波動関数に含まれる振幅と位相の両方の情報を読み出せることを示している。小さな気相分子を用いての研究は確実に進展しており、今後の固体試料への発展を多いに期待したい。

大島氏らは、振動や回転に関する量子波束や状態分布を操作する方法論を、高輝度かつコヒーレンスを有する光との相互作用を活用することに開発している。具体的には、光電場と分子との相互作用を利用することにより、回転状態分布を特定の準位に集中させ、その量子波束を特定できることを示した。またメチル基内部回転の量子波束運動の実時間観測にも成功するとともに、量子波束の緩和過程への振動・回転相互作用の効果を実験的に示している。高分解分光法による分子構造の精密決定に関するこれまでの深い知識を基にした、独自の方向性が感じられ、着実に進展していることが伺える。

菱川氏らは、極短パルス強レーザー照射時のクーロン爆発過程およびその他の分子ダイナミクスに関する研究を行っている。例えば、コインシデンス運動量イメージング法により、分子座標系の配向とフラグメントの運動量の相関をクーロン爆発事象毎に計測し、電子および核のダイナミクスがレーザーの偏光方向に応じて変化すること、すなわち電子をどの方向に揺さぶるかで分子構造を制御できることを示した。必要に応じてサブ10フェムト秒のパルスレーザーの作製等も兼ねながら進めているので、研究には時間がかかるが、その方向性および進展が確実に見てとれる。

平等氏らは先鞭をつけたマイクロチップレーザー、セラミックレーザーの開発を精力的に行っている。透明なポリクリスタル状のセラミックを用いることにより、単結晶を用いた固体レーザーに比して、多くの製作面での利点があり、最近ではフェムト秒の非常に高速のものや、非常に小型のマイクロチップを用いた高出力のCWレーザー等を開発することで産業界との連携も深めながらその研究を積極的に進めている。「マイクロ固体フォトンクス」を提唱し、レーザー光の高輝度化を実現すると共に、新たな波長変換素子の開発により紫外光から可視光、近赤外光、中赤外光から遠赤外光のテラヘルツ波領域までを手のひらサイズ光源でカバーすることにすでに成功しており、これら開発している光源は、今後幅広い応用が期待される。

松本氏らはキャラクタライズされた固体表面に原子や分子が吸着された系での超高束ダイナミクスを、フェムト秒パルスを照射することにより調べている。例えば、固体表面でのコヒーレントな核運動を時間分解SHGにより観測するとともに、振動コヒーレンスがコントロールできることを示している。固体表面での反応ダイナミクスへの研究

は非常にユニークであり、この研究分野をリードしている松本教授の転任は分子研にとっては大変残念ではあるが、今後いろんな面での共同研究を期待したい。

(3) この分野の国内、国外での研究分野としての重要度

光分子科学研究といった場合、これまでは光と物質（分子）の相互作用を摂動としてとらえ、種々の分光法を用いて物質の性質を調べる研究が主であった。かかる研究は現在も物質科学や生物科学研究において分析手段として常套的に用いられている。最近、回折限界を超えた分光手法の開発により、無侵襲かつ分子レベルで物を観るための研究が活発に行われている。この点で、岡本氏らの近接場二光子励起蛍光イメージング法による波動関数の可視化は重要な貢献と考えられる。さらに最近の技術革新により、数フェムト秒の時間幅で位相制御された光や非常に高出力のパルス光といった極限的な光を取り出すことができたようになった技術的革新により、従来になかった新たな研究領域が開発されつつある。光は単なる摂動ではなく、積極的に光で分子の状態を制御し、さらには反応を制御しようというものである。これに関しては、国内外の多くの理論研究が先行している感があるが、レーザー技術の進歩により、実験的な検証が行われるようになってきたといえる。大森、大島、菱川の各氏が果敢に取り組んでいる領域である。分子の量子制御や反応制御が光で自由自在にできるようになれば、光と分子を利用した量子情報通信、光量子コンピューターが可能とする説もある。そのための具体的な道筋が見えているとはとても思えないが、かかる可能性にも注目しておく必要がある。また光分子科学研究には光の存在は不可欠であり、平等氏らが推進しているような種々のレーザーの開発は大変重要である。

(4) この分野の発展はあるか、どの方向か

光分子科学研究領域を分子と光の相互作用を調べる研究分野と定義するのであれば、物質科学や生命科学の発展のためにもこの分野の発展を期待せずにはいられない。新たな実験手法をたえず考えながら、光技術の発展により得られる新たな光と分子の相互作用を調べることが必要である。その結果として高空間分解能、高時間分解能の新分光法が得られるのであれば、それは確実に他の研究領域の研究に有用となるであろうことは、最近の生物科学の発展が種々の光イメージング測定の発展に密接に結びついていることから明らかである。また光で反応を自由自在に制御できるようになると期待したい。興味や研究の対象を深く掘り下げていくことは勿論重要であるが、興味の対象を広く持つことも重要である。一見異なる領域間の共同研究は大変重要であり、現在行っている研究が他の分野とどのような関係にあるかを広くアンテナを広げておくことが研究の新たな展開に結びつくように思われる。

(5) 分子研の当該研究領域は今後どのように進むべきか

高空間分解、高速時間分解分光に基づいて、気相、固体（表面）の各層を対象とする研究者が構造と反応を主として研究を行っている。お互いの研究は非常に関連すると思われるにもかかわらず、所内での共同研究はほとんど行われていないのは残念である。表面や固体ナノ量子を扱う研究者もいるが、気相分子を対象としている方が多いという印象をもつ。気相以外に、凝集系を独自の視点から扱う研究者の存在も望ましいように思われる。この研究領域には、X線から、紫外、可視、赤外の広い波長領域にわたり、しかも連続光から超短パルス光の異なる時間幅を有する光を扱っている研究者が所属しており、また、レーザー開発に携わっている研究者も所属していることを考えると、この領域内で一つのプロジェクトを立ち上げて一緒に同じ問題に取り組むことが可能ではないか。学生数が少ないということもあり、各グループの人数は決して多いというわけではないので、グループ間の連携を是非検討して欲しい。そしてプロジェクトに必要であれば、外部の方も組み込むようなシステムを考えてはどうだろうか。将来的には大きな国際プロジェクトへと発展する可能性を視野にいれてはどうだろうか。その際に基本となるのは、各グループ独自の研究手法および実験手法である。周波数分解分光および時間分解分光を得意とする研究者と多種多彩であり、この

点では分子研の過去の良き伝統を受け継いでおり、これらの特徴を活かしたプロジェクトが考えられるように思われる。さらに分子研には、多くの理論研究者がおられることから、実験グループと理論グループの所内共同研究をもっと押し進めることも必要ではないか。

II. 分子研全体に対する意見

「大学共同利用機関としての分子研の存在意義と将来への展望」

分子研で行っている研究を中心としたプロジェクトを編成し、他の組織の方々を巻き込んでの共同研究をたえず行っている状況が理想的と考える。ただ、分子研のみならず多くの大学や研究所においても最新の大型設備が整備されている現状においては、研究設備も含めて分子研だけが突出しているとはいいいにくい。しかし、大学教員を含む多くの研究者は、一部の研究者を除けば一般にいわれているほど研究資金は潤沢ではなく、慢性的な研究費不足に悩まされているのが実状ではないだろうか。そのようなことを考えた場合、たとえば分子研が中心に行っているように、装置に関してのネットワークを構築し、それを利用することによりアイデアがあれば研究を進めることが可能なようにシステムを構築することが分子科学研究の基盤を拡げるためにも重要ではないだろうか。

ただし、このようなシステムを構築し運用することが、最先端の研究を行っている分子研の研究者の雑用を増やし、足を引っ張ることになってはこまるので、共通機器の整備だけではなく、依頼測定も可能なように測定に携わる人員を増やすことはできないであろうか。現在分子研の共同研究に関わっておられる方はある程度に限られており、まだ全国の大学が利用している、とはいえないような気がしており、お互いの共同研究がしやすいような環境造りがまだ必要なのではないかと考えている。また、国際的な観点から、たとえば分子研をアジアネットワークの中心として、5～10年任期の外国人教授のポストを造るのも一つの考えではないか。

委員 B

分子研光科学研究領域に関する評価（極短紫外光研究施設光源分野）

1) 光源性能向上について

直線部の四極電磁石の配置を変更し、エミッタンスを従来 160nm.rad から 27nm.rad まで大幅に向上させると共に、挿入光源用の直線部を確保した。比較的低いエネルギーで高輝度の電子ストレージリングの場合、電子ビーム寿命の制約が問題となる。これを解決すべくトップアップ入射実現のための計画を着実に遂行している。計画の一環であるブラスターシンクロトロンエネルギー増強はすでに終了した。この様に、第2世代のシンクロトロン放射光源であった UVSOR を、短期間の改造で第3世代光源と同等の性能にまで高めるのに成功したことは大いに評価できる。これらの光源自体の改造と共に、多様な挿入光源の整備を行っていることは大いに評価できる。

2) 光源加速器を用いた研究について

放射光源グループの研究活動に関して特記すべきことは、光源性能を着実に向上させる努力のみならず、光源加速器を用いた特徴ある研究を遂行していることである。自由電子レーザーの研究、レーザーライニング法の開発、コヒーレント放射、テラヘルツ光発生の研究などである。これらの研究水準は世界に抜きでたレベルにあり、外国研究機関との共同研究が活発になされている。また、これらの研究成果を即放射光利用研究者が共有できている。すなわち、これらの研究成果として得られた特徴ある放射光を用いた利用研究が行われている。これらの研究活動は大いに賞賛されるべきものである。

3) 将来の展望、他機関との共同研究

光源グループは光源性能をより向上させるべく、エミッタンスのより一層の低減（15nm.rad）、挿入光源のための直

線部を確保すべく、新しいリングの設計を行っている。さらに同グループは、国外を含む多くの大学、研究機関との共同研究を遂行していることは評価出来る。

4) 提言

これらの研究活動は、少数の優秀な光源研究者により遂行されていることは賞賛に値する。しかしながら、放射光源を含む加速器の研究は広大な学問分野の集大成により成り立っている。この観点から、広範囲な研究分野をカバーすべく加速器研究者を確保・拡充することは重要であろう。また加速器研究者の育成は、優秀な光源を有し、特徴ある研究を遂行している研究施設の責務であろう。他大学との共同のもとに学生、大学院生の教育に積極的に関与し、多くの加速器研究者の養成を行っているが、より一層の努力をお願いしたい。

委員 C

光分子科学研究領域には、主にレーザーを使用するグループと放射光を使用するグループがある。レーザーを用いた研究グループでは、まさに state-of-art とも言うべき緻密で高精度の光分子科学研究が強力に推進されている。各研究グループの研究ピークは非常に高く、どれをとっても世界の第一線に伍している。ただ惜しむらくは、各研究グループ間の協力の成果がはっきりとした形では見えていない。ピークを保ちつつその間の谷を埋めることで大きな山を作れることを期待したい。

放射光を利用する研究グループは、比較的少人数の構成でありながら、性能を飛躍的に向上させることに成功した UVSOR-II を用いて世界最先端の研究を推進している。以下に個別に意見を述べる。

小杉グループ

比較的単純な構造を持つ原子分子の高分解能内殻励起スペクトルの実験および理論的研究を精力的に推進しており、世界のこの研究分野をリードする研究グループである。とりわけ、内殻励起状態において振電相互作用や Rydberg - 価電子混合などポテンシャルエネルギー曲面の詳細な知見が得られることを明確に示した最近の対称性分離内殻励起分光法の研究成果は、国際会議の基調講演や招待講演に取り上げられるなど、世界的に高く評価されている。また、理研・阪大グループと共同で行った「DNA の共鳴光電子分光」は、生体物質に光電子分光を適用してその伝導機構を探るというオリジナリティの高いユニークな研究であり、今後の研究発展の一つの方向を示すものと言えよう。

見附グループ

フラーレン C₆₀ の真空紫外線から軟 X 線領域の光による光励起電離解離過程の非常に詳細な精度の高い実験的研究を行っており、当該研究領域において注目を集めている。今後、本研究を通して蓄積してきた高い実験技術や解析法の、より広範な分子系への適用発展が強く望まれる。

繁政グループ

分子の内殻励起における多電子過程とその崩壊ダイナミクスの研究と、そのための新しい計測法や計測装置の開発を行っており、本研究領域における世界のフロントランナーである。とりわけ、窒素分子の 1s 電離しきい値近傍で中性準安定解離種が効率的に生成することを見出した最近の研究は、光電子の再捕獲を示唆するものとして大きな注目を集めている。さらに KEK-PF と共同で開発した新型磁気ポトル電子エネルギー分析器は、高い捕獲効率と高効率の多電子同時計測を可能とするもので、本装置を用いた今後の研究の進展に期待したい。

木村グループ

赤外および光電子分光を用いて、f 電子系を中心とした強相関化合物の物性発現機構と電子構造の関係を研究して

いる。放射光を用いた多重極限下での赤外分光研究のパイオニア的存在であり、豊富な経験と実績を有している。とりわけ最近行われた CeSb の低温・高圧・高磁場下での測定で、擬ギャップの存在を初めて実験的に見出した成果は、長年の問題を解決するものとして大きな注目を集めている。また、本グループが中心となって建設を進めてきた超高分解能光電子ビームラインは、低光エネルギー領域に的を絞って固体バルクの電子構造を直接観測しようというものであり、現在の光電子分光研究の目指す方向に合致しており、今後の大きな進展が期待できる。

7-2-2 国外委員の評価

原文

Director-General Hiroki Nakamura

Institute for Molecular Science

Okazaki, Japan

Report

of my visit of the Institute for Molecular Science (IMS), October 15–17, 2007

During my visit of the IMS on October 15 to 17, 2007 the opportunity was given to me to meet the leading scientists of the Department of Photo-molecular Science including the Laser Research Center for Molecular Science and of the UVSOR facility. I had intensive open discussions of the current scientific work with inspiring displays of scientific ideas and analyses of the present frontiers of research. The present report is focused onto this Department and all subsequent statements refer to the Department and not necessarily to the IMS in general. The informal interviews of the group leaders provided information about future developments and of possible shortcomings due to the limitations of available funds. I also visited several labs and the UVSOR facility giving me direct insight in the experimental investigations and the developed experimental techniques. The level of sophistication of the acquired and self-built instrumentation is impressive and is highly competitive to the equipment and facilities in other world-wide leading research institutions in the field.

Professor Hiromi Okamoto investigates collective electronic excitations of nano-structured air:metal interfaces by the help of scanning near-field spectroscopy, which is a field of particularly great interest. The experimental techniques involve one- and two-photon induced luminescence, surface-enhanced Raman scattering and different approaches of near-field transmission measurements providing state-of-the-art images of nanoplatelets, -rods and other structures with a spatial resolution of 100–50 nm. Most important, a time resolution of 100 fs was implemented in the interface spectroscopy using ultrashort laser pulses. The inventive combination of local, temporal and spectral information provides a deeper understanding of the observed features, *e.g.* of longitudinal plasmon resonances of gold nanorods. The work has been also extended to molecular nanowires observing longitudinal propagation of the optical excitations.

Professor Yasuhiro Ohshima has been developing methods for the optical manipulation of quantum state distributions. Current activities are focused on nuclear motions, *i.e.* rotational and low-frequency vibrational wave packets relevant for chemical processes. Both ultrashort laser pulses and laser sources with high spectral resolution are used to study molecules at low temperatures in the

supersonic expansion including molecular clusters. The investigations pave the way for a fully state-resolved measurement of reaction dynamics. To this end, new techniques have been developed. An example is excitation pulse sequences representing significant progress for the manipulation of quantum state distributions.

A remarkable achievement are the measurements of phase-controlled interferences of vibrational wave-packets of Professor Kenji Ohmori, investigating small molecules in the supersonic expansion. Using highly reproducible femtosecond laser pulses attosecond time resolution is obtained using a special, amazingly stable Michelson interferometer that generates the phase-controlled linear superposition of two excitation pulses. It is demonstrated that the phase information of the pulse pair is transferred to the vibronic excitation of the molecules *e.g.* I₂ yielding both the amplitude and phase information of the wave function of the molecular ensemble. In addition the population distribution of vibrational eigenstates is measured with narrow-band ns-pulses. The results of this work allow novel quantum computational applications, *e.g.* the development of logical quantum gates.

Coherent control is also the key word for the work of Professor Akiyoshi Hishikawa, studying atoms and molecules with high-intensity sub-10-fs laser pulses in the range of 10¹⁵ W/cm². Under such conditions the external laser field is comparable with the internal Coulomb field of the molecules leading to new phenomena. An example is the Coulomb explosion of hydrogen sulfide, the dynamics of which was studied by coincidence momentum imaging of the fragment ions. The results were interpreted in terms of charge-transfer states that control the structural deformation. It was shown that the explosion process can be manipulated by the help of the polarization of the laser pulse. For other molecules the same imaging technique provided evidence for transient hydrogen migration that competes with the dissociation process. The generation of attosecond pulses via high-harmonic generation in neon is in progress implementing even higher temporal resolution in these investigations.

Considerable progress was achieved in the field of diode-pumped lasers by Professor Takunori Taira, who demonstrated novel laser systems with high cw output power exceeding 300 W. The properties of the developed microchip solid state lasers and nonlinear frequency conversion schemes are striking and will attract considerable technological interest. The impact on the fundamental research of the IMS is not obvious.

It is an important function of the IMS to make advanced instrumentation available for guest scientists, in particular beam lines of the UVSOR facility. Under the direction by Professor Nobuhiro Kosugi and in collaboration with Professor Masahiro Katoh important progress has been achieved. Installing bending-magnet and undulator beamlines the upgrading of the system to UVSOR-II was completed with reliable operation for beam energies of 750 MeV. Options for a further increase of emittance and photon energies in the soft X-ray region are pursued at the present, demonstrating the special expertise of Professor Katoh. An example is the free-electron laser of UVSOR-II, the short-wavelength limit of which has been shifted below 200 nm, with a pulse duration of 10 ps and a maximum output power of 1 W. Using the laser bunch slicing technique with a synchronized femtosecond Ti:Sa laser, intense THz pulses are now available in the 1 ps range.

The research of Professor Kosugi is at the fore-front of inner-shell excitations dynamics of molecules in the vacuum UV that were studied by resonant photoelectron spectroscopy and soft X-ray emission spectroscopy. The wide range of interests includes VUV and X-ray spectroscopy of free molecules, molecular clusters and solids.

Another IMS group using the UVSOR system is the one of professor Koichiro Mitsuke who has an impressive record of publications on photoionization and photofragmentation phenomena. His most recent work that is concentrated on the multiple ionization of C₆₀ and C₇₀ and the photoabsorption of metallofullerenes in the soft X-ray region will receive great interest of the scientific community.

He has developed a new design of a ZEKE photoelectron spectrometer that utilizes the UVSOR storage ring.

An important application of the UVSOR machine in the infrared is devoted to strongly correlated electron systems investigated by Professor Shin-ichi Kimura. The electronic structure of bulk metallic glasses and multi-element amorphous alloys was obtained by synchrotron light photoemission spectroscopy and compared with theoretical simulations advancing the understanding of the glass forming ability of these compounds. The results are significant.

Professor Eiji Shigemasa also benefits from the UVSOR facility in his investigations of molecular inner-shell processes of gas-phase molecules in the soft X-ray region. Topics are multi-electron processes induced by single photon absorption that reveal the properties of multiply excited states (including decay dynamics) and the dissociation dynamics of core-excited molecules. In this context an innovative momentum imaging spectrometer for anions was developed. Examples are double photoionization of Ne, Xe atoms and N₂ molecules, photo-fragmentation of CF₄ and electron correlation in the Auger decay of noble gases. Very detailed, quantitative results were obtained in these studies.

In summary I can say that the scope of scientific interest is wide spread and addresses the key areas of fundamental research in molecular science. The expertise of the scientists is excellent. The scientific output as confirmed by the numerous publications in the leading international journals is significant, in spite of short comings to be addressed below.

Comments

One general impression is that the research groups in the institute are not very large, especially the number of graduate students and post-docs is rather small. Although the limited size may allow for a larger number of different activities, under-critical size limits the progress of the scientific work. In fact, comparing the structure of the groups with other places in Europe and North America the shortage of graduate students and post-docs is evident. It is proposed to attract more graduate students to the institute, intensifying in this way also the collaboration with universities. The effort required for the training of students is paid back by the contribution of young coworkers to the research. Most important, the acquired expertise may be furtherly used in subsequent post-doc activities. In other words the availability of highly gifted post-doc researchers is notably favored by a reasonable PhD-program.

The obvious explanation for the present lack of graduate students and post-docs in the Department of Photo-Molecular Science obviously is the lack of funds for these purposes. The Department should make an effort to enlarge funds available for stipends and scholarships as well as for current expenses required for the intensified experimental activities. In addition, the personal support of the individuals has to improved, i.e. the size of the stipends that seems unattractive for students from abroad. I understand that the IMS is involved in collaborative programs in this respect, but I seriously doubt that the financial frame of these programs compares with the actual requirements.

Another point in the personal structure is the limited size of the technical staff both of the Department and of the UVSOR facility. Compared to the situation for related research at Max Planck Institutes and German universities there is a notable difference and the size of the technical staff appears to me as non-optimal. I propose to re-consider the number of technicians that directly contribute to the experimental investigations. Again, this includes a financial problem since additional resources would be required for a larger technical staff.

The funds available for instrumentation at the IMS appear unsatisfactory. The present situation at the IMS obviously reflects the result of a world-wide trend that until recently politics supported projects in technology and applied research rather than fundamental science. Since molecular science is rapidly developing the relation between basic research and applications is rather close and a sound balance between the different directions of research and development has to be regained. This was recognized in the meantime and the mentioned trend stopped in several industrial countries. An example here is Germany where substantial additional funds have been made available for selected institutions towards basic research. To my understanding similar plans are being discussed in Japan and positive decisions in this respect are urgently needed to maintain first rank research. I wish to emphasize that the IMS with the Department of Photo-Molecular Science should participate notably in such an improved funding.

Garching, December 19th, 2007

A. Laubereau

訳文

分子科学研究所 中村宏樹 所長 殿
日本，岡崎市

分子科学研究所（IMS）訪問にかかる報告書，2007年10月15 - 17日

私が2007年10月15日から17日に分子研を訪問した際，レーザーセンターとUVSORを含む光分子科学研究領域の研究グループリーダーたちと会うことができました。進行中の研究に関して突っ込んだ率直な議論を行ないましたが，それらは研究の最前線における科学的なアイデアと解析の着想に満ちたものでした。この報告書はこの領域（光分子科学研究領域）に関する事に絞っており，以下の記述は必ずしも分子研全体に係ることではないことをお断りしておきます。グループリーダーとのインフォーマルな面談を通じて，将来の発展の可能性や資金不足のために十分でない点等に関する事も知ることができました。UVSORの幾つかの研究室も回り，実験研究と開発された実験技術に関して直接知ることができました。購入された装置や自作装置群は洗練されたもので，そのレベルに感銘を受けました。これらはこの分野における他の先導的な研究施設の装置と比較しても世界的に高い競争力を持つものです。

岡本裕巳教授は，走査型近接場分光を用いて金属ナノ構造：空気界面における電子の集団励起を研究しており，極めて興味深い研究分野であると言えます。用いられている実験法は一光子及び二光子励起発光，表面増強ラマン散乱，及び異なった手法として近接場透過測定で，これらを用いてナノプレート，ナノロッド，その他の構造体について，空間分解能100-50 nmの最先端のイメージングを可能としています。特に重要なのは，超短レーザーパルスを用いて100 fsの時間分解能で界面の分光に成功したことです。局所的，時間的，分光学的情報の独創的なコンビネーションによって，金ナノロッドの縦プラズモン共鳴などの特徴的な観察結果に対して深い理解を可能としています。またこの研究法は分子ナノワイヤの光学励起の伝搬の観測にも適用しています。

大島康裕教授は量子状態の分布を光学的に操作するための方法論を開発しています。現在，分子の回転や化学過程に関与する低振動数核波束運動等，原子核の運動に焦点を当てた研究活動を行っています。超短パルスレーザーと高

スペクトル分解レーザー光源の双方を使い、超音速噴流中の低温分子や分子クラスターを研究しています。この研究は反応ダイナミクスの完全な状態選別測定への道筋を付けるものです。それを実現するための新たな技術開発も行なわれています。量子状態の分布操作についての重要な進展を提示したパルスシーケンスの開発はその一例です。

大森賢治教授は超音速噴流中の小分子で、振動波束の位相を制御した干渉を観測するという、目覚ましい成果をあげています。再現性の高いフェムト秒レーザーパルスを用い、独特な驚くべき安定性をもつマイケルソン干渉計で、二つの励起パルスの位相制御された線形重ね合わせを実現し、アト秒時間分解を可能としています。パルス対の位相情報が I_2 分子等に転写でき、分子集団の波動関数の振幅及び位相情報を与えることが可能であることを示しています。更に、振動固有状態の分布を狭帯域ナノ秒パルスで測定しています。この研究の成果は量子論理ゲートの開発等、新たな量子計算への応用を可能とするものです。

コヒーレント制御は菱川明栄准教授の研究キーワードでもあり、彼らは 10^{15} W/cm²領域のサブ10フェムト秒高強度レーザーパルスを用いて原子・分子の研究を行っています。このような環境下では、外部レーザー電場は分子内のクーロン電場と同程度となり、新たな現象を引き起こします。例えば、彼らは硫化水素のクーロン爆発の動的過程がフラグメントイオンの運動量コインシデンスイメージング法により研究しています。その実験結果は、電荷移動状態が構造変形を決定するとして解釈しています。爆発過程がレーザーパルスの偏光によって制御可能であることも示されました。他の分子についても同じイメージング法を適用し、水素原子の移動が解離と競合することを示すことを突き止めています。ネオン中の高次高調波発生によるアト秒パルス発生の研究が進行中で、それはこれらの研究に更に高い時間分解能を与えるものです。

平等拓範准教授のダイオード励起レーザーの分野での成果は注目すべきもので、新たなレーザーシステムで300 Wを超える高出力cw発振を立証しました。開発されたマイクロチップ固体レーザーや非線形波長変換の方法は目覚ましいもので、技術的にも大きな興味を引くものとなるでしょう。分子研における基礎研究へのインパクトについては未知数です。

分子研、とりわけUVSORのビームラインでは、外来の研究者が利用できる高度な装置群を制作することが、重要な機能の一つです。小杉信博教授の指揮下、また加藤政博教授の協力により、重要な進展がなされています。偏向磁石やアンジュレータービームラインの設置により、システムのUVSOR-IIへのアップグレードが完了し、750 MeVのビームエネルギーで信頼性の高い運転が可能となっています。現在更に、加藤教授の高度で専門的な技術を活かした、エミッタンスや軟X線領域の光エネルギーの改善に向けた努力がなされています。例えばUVSOR-IIの自由電子レーザーでは、10 psのパルス幅で、短波長の限界は200 nm以下に及び、最大出力は1 Wに達しています。フェムト秒チタンサファイアレーザーと同期したレーザーバンチスライス技術により、現在、強いテラヘルツパルスが1 psの領域で得られるようになってきました。

小杉教授の研究は、真空紫外域の共鳴光電子分光や軟X線発光分光を用いた、分子の内殻励起ダイナミクスの最前線に位置づけられるものです。その興味は多岐にわたり、自由分子、分子クラスター、固体等を含む系について、VUVやX線の分光を行なっています。

UVSORを利用している今一つの分子研のグループである見附孝一郎准教授のグループでは、光イオン化と光フラグメンテーション現象に関する印象深い論文を出しています。彼は最近では、軟X線領域における C_{60} と C_{70} 分子の光イオン化と金属内包フラーレンの光吸収に集中しており、この仕事は研究コミュニティの大きな興味を引くと思われます。彼はUVSOR蓄積リングを用いたZEKE光電子分光の新装置設計・開発も行なっています。

木村真一准教授による強相関係の研究において、UVSOR 装置の赤外域での重要な応用が行なわれています。バルクの金属ガラスや多成分アモルファス合金の電子構造が、放射光による発光分光によって得られ、理論シミュレーションとの比較により、これらの化合物のガラス生成能に関する理解を深めました。この成果は意義のあるものです。

繁政英治准教授も、UVSOR 施設を利用して、気相分子の軟 X 線領域における内殻過程の研究を行っています。1 光子吸収で誘起される多電子過程を用いた、多電子励起の性質（緩和のダイナミクスを含む）の研究や、内殻励起分子の解離ダイナミクスの研究をテーマとしています。この目的のために、革新的な陰イオンの運動量イメージング分光装置を開発しています。例えば、Ne 原子や Xe 原子、 N_2 分子の二重光イオン化、 CF_4 分子の光フラグメンテーション、また希ガスのオージェ緩和における電子相関の研究等がなされています。これらの研究では非常に詳細で定量的な結果が得られています。

結論として、研究対象の範囲は多岐にわたり、また分子科学における基礎研究の重要な分野に取り組んでいると言えます。研究者の各専門領域における研究レベルは非常に優れています。下記に述べるような問題点はあるものの、サイエンティフィックな成果の高さは、国際的な一流の論文誌に多数論文が公表されていることから裏付けられています。

コメント

印象として、研究所内の各研究グループはあまり大きくなく、特に大学院生や博士研究員の数はかなり少ないと感じます。限られたサイズであることによって多くの異なる研究活動が可能になるという面はありますが、限界以下のサイズでは科学研究の進展を制限してしまいます。実際に、ヨーロッパや北アメリカの他の機関のグループ構成に比べて、大学院生や博士研究員の不足は明らかです。より多くの大学院生を研究所に引きつけることが望まれます。それによって大学との協力も強固になるでしょう。学生の養成に必要な取り組みによって、若手共同研究者の研究への寄与という見返りが得られます。そして特に重要なのは、彼らが獲得した専門知識が更にそれ以降の博士研究員としての活動に役立つということです。言い換えると、高い能力を持つ博士研究員の供給には適切な博士課程プログラムが強く望まれるということです。

現在光分子科学研究領域に大学院生や博士研究員が不足しているのは、明らかにそのための資金が足りないからでしょう。当該研究領域では、実験研究を強化して行くのに必要な資金を得ることに加えて、給与や奨学金のための資金を拡大することへの努力が必要です。加えて、各個人への待遇の改善、具体的には外国人留学生にとって魅力に欠ける現在の給与を改善する必要があります。これに係る研究協力プログラムに分子研が関わっていることは知っていますが、その財源が実際に必要な額に見合っているとはとても思えません。

人員構成に関して今一つの問題点は、研究領域と UVSOR 施設の両方で、技術スタッフの人数が限られていることです。関連研究領域のマックスプランク研究所やドイツ国内の大学に比較すると、技術スタッフの人数には大きな差があり、私にはこれが適正規模であるようには思えません。私は、実験研究に直接関わることでできる技術職員の人数を見直すことを提案致します。これもまた、技術スタッフの数を増やすことには費用が必要で、財政的な問題が含まれることになります。

分子研の研究設備構築のための資金は十分とは言えないように見受けます。この分子研の現状は、政府が最近に至るまで、基礎研究よりも技術や応用研究に関するプロジェクトを支援して来たという、世界的な傾向を反映したものでしょう。分子科学は急速に発展して来ており、基礎研究と応用の間は相当近づいています。研究と開発の方向性の違いの、適正なバランスを回復することが必要です。幾つかの先進工業国では、このことが認識されるようになり、上述の世界的傾向は終息しています。例えばドイツでは、いくつかの研究機関で、基礎研究のための付加的な資金が相当額得られるようになって来ています。私の理解するところでは、日本でも同様な計画が議論されていると聞きますが、一流の研究水準を維持するには、この点での積極的な決定が早急になされる必要があります。私は分子研と光分子科学研究領域が、とりわけそのような資金強化に参画すべきであるということを、強調したいと思います。

2007年12月19日, Garching にて

A. Laubereau