

## 8. 研究施設の現状と将来計画

共同利用設備を充実させ、大学等の共同利用研究者の研究支援を行うことは大学共同利用機関の主要な役目のひとつである。1975年の研究所発足当初から装置開発室と機器センターを設置し、1976年に化学試料室、1977年に極低温センターを設置した。さらに1979年には電子計算機センターに大型計算機を導入し、1983年から極端紫外光実験施設（UVSOR施設）で放射光源装置が運転を開始した。これらの施設では単に設備を設置するだけでなく、共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員との密な連携が必須である。

教員の流動性が高い分子科学研究所では、着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。また、各研究グループサイズが小さいことも補う必要があり、このような観点でも施設を充実させることが重要である。また、分子研転出後もこれらの施設を利用することで研究のアクティビティを維持することが可能である。研究者が開発した優れた装置が転出後も、共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように、研究所にとって施設の充実、研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり、施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために施設の技術職員の技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。技術職員が研究所外に出かけその高い技術力で研究支援するなどの技術交流も重要である。

現在、極端紫外光研究施設（UVSOR施設）、計算科学研究センター（組織的には岡崎共通研究施設のひとつ）が大型設備を有し、計画的に高度化、更新を行うことで世界的にトップクラスの共同利用を実施している。国内外の超大型の放射光施設やスーパーコンピュータ拠点との連携を図りつつ、差別化・役割分担を行い、機動性を活かした特徴ある共同利用が進んでいる。機器センター（2007年に旧機器センター、旧極低温センター、旧化学試料室の機能を再構築して設置）は本来の共同利用支援業務を行う一方で、全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、特定分野の重点的な強化、大学等の研究を支えるシステム作りを行ってきた。また、装置開発室は高度な特殊装置・コンポーネント開発にその高い技術力を活かすべく、研究所外からの依頼に対応することで共同利用施設としての役目を果たしている。

分子研では、共同利用をより活性化し、大学の研究活動に貢献する施策として、2018年に新しい人事交流制度を開始した。これは、かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度を元に、現在の人事制度と我が国が置かれている状況とに対応した新たな取り組みである。具体的には、以下の2つの制度を通じて、分子科学分野のトップレベル研究と、研究者層の厚みを増強するための施策を実施している。特別研究部門では、(1) 2023年4月より、分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者である東京大学の藤田 誠卓越教授をクロスアポイントメントで分子科学研究所卓越教授として招聘し、研究に専念できる環境を提供する。(2) 2022年度は、分子科学分野において産学連携を進める研究を行っている中村 彰准教授（静岡大学学術院農学領域准教授）が特別研究部門にクロスアポイントメント教員として着任した。

（渡辺芳人）

## 8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

### 8-1-1 はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 39 年が経過した。その間、2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化、直線部増強 4→8 か所）、2012 年度の第二期高度化（TOP-UP 運転、挿入光源追加、エミッタンス 27→17 nm rad）のように、新規光源開発と先端計測の専門家のコラボレーションにより、UVSOR では 2 度の光源加速器高度化に成功した。1 GeV 以下の低エネルギー放射光施設としては、回折限界光源に迫る世界最高性能を達成し（電子ビーム低エミッタンス）、真空紫外光から軟 X 線領域をカバーする国際競争力をもつ放射光施設として運用している。国際研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の整備が不可欠であるが、UVSOR-III として 10 年目を迎え、全 14 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し、主として材料科学、光化学、環境エネルギー分野の先端の実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした、独自性の高い特徴的な研究開発が行われており、新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用した放射光コヒーレンスの科学も推進している。その他の標準共同利用ビームライン（8 基）においても、国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており、材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。高度化で生まれ変わった現在の UVSOR-III は、別の見方をすれば国内で最も若い放射光施設であり、国際的にみても特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では希少な第三世代放射光施設で、今後の国際連携の発展が期待されている。また中型放射光施設として建設中の次世代放射光施設 NanoTerasu と稼働中の大型放射光施設 SPring-8 とともに国際的な先端放射光施設としての研究主導が求められる。

先端研究の活動力の維持と同時に、今後の放射光利用において先端分析を利活用できるユーザーを育成することや、コミュニティ全般強化へ向けた組織間連携や、未活用分野への支援による研究領域の拡張が重要であり、特に歴史的に放射光利用が普及していない化学・バイオ系への分野展開が国際的な命題である。こうした潜在的放射光利用者となりうる当該分野を長年にわたり支えてきた分子科学研究所への期待は高く、岡崎三機関として基礎生物学研究所、生理学研究所との連携を深めることが重要で、これからの UVSOR が目指すべき方向性と捉えて検討を進めている。さらに 30 余年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と、共同利用環境の継続的支援を視野に入れると、次期施設の建設計画（UVSOR-IV：仮）を算段する時期にあり、2018 年度より検討を開始し、日本学会会議へのビジョン提案やロードマップ申請へと準備を進めている。将来計画の経緯は過去レポート 2018～2021 もご参照いただきたい。2022 年度はシンポジウム（第五回検討会：施設間連携）を開催し、UVSOR 利用者懇談会と次期施設の目指すべき形態についての概要がまとまった。概要は、本施設規模（小型リング型放射光施設）の光源加速器技術と性能は、UVSOR-III にて実証されたように既に成熟期にあり概ね極限化されている。そこで現状のリング型光源加速器性能を基本骨格とし、マルチビームやマルチモーダル計測など、より挑戦的な光計測の手法開拓を目指す。そして、光源として放射光のみならずレーザー光源（自由電子レーザーや卓上小型レーザー）を多彩に活用できる実験設備を提供することで、計測を通じて多くの分野を融合し、未踏の学術を広く開拓する「分子機能・材料物性計測拠点」としての先端光源施設と位置付けた。また今後の技術的成熟に応じて、高出力小型レーザー光を新規に入射加速器として用いる計画も検討した。この技術は相補的に VUV 波長帯における自由電子レーザーの併用など、時間・空間軸で極限化されたコヒーレント光源を利用した未踏の新規計測による学術開拓の場としての展開も視野に入る。前者の融合拠点には、爆発的にコミュニティ拡大に繋がるような放射光利用実験のロールモデルが不可欠であり、分子研の各センターとも連携した多面的な支援による自由度の高い「高度研究支援環境パッケージ」を提供するための組織設計が重要で、現組織規模を倍程度に大きくした「極限光科学イノベーションセンター（仮）」の組織改編を検討している。特にバ

イオ系の実験手順では、放射光を利用した実験の前後の評価や試料調製環境の充実が不可欠である。一方、後者の学術開拓は、高出力かつ安定なレーザー光源技術の進展のみならず、入射加速器への応用のための更なる技術開発が求められ、国内外の多くの専門家との協力体制が必要である。こうした以上の提案を日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」の策定に向けた「学術の中長期研究戦略」施設計画の提案に対し、UVSOR 将来計画をベースにした提案「複雑系・不均一系の分子ダイナミクスに挑む量子光科学拠点の構築」を提出した。その後、グランドビジョン「量子ビームを用いた極限世界の解明」にグルーピングされる予定である。その後も議論が進められているが、各種プロジェクトへの申請に向けた議論が進められる中で、バイオ系を中心とした未活用分野への研究展開が検討され、岡崎三機関間連携の方向性が議論された。2023 年度からのバイオ系ユーザーの支援を目指した光計測機能強化を目的に掲げ、文部科学省のロードマップ 2023 へ向けた申請準備を開始している。現 UVSOR-III は次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務であるが、同時に、次期施設へ繋ぐための軟 X 線や真空紫外線を用いたバイオ系の斬新な研究成果の発信を狙い、着実な需要開拓を目指したい。また、光源グループによる先端的量子ビーム実験環境・設備の継続的な深化も重要で、低エネルギー帯施設における国際的な発信力を強化したい。

## 8-1-2 光源加速器の現状と将来計画

現在の光源加速器については、従来の 15～20 年の設備更新サイクルを鑑みると、2030 年付近で大規模な更新が想定され、特に建設当初 1983 年来、未更新の基本設備への対応が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の運転停止をさげ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端紫外放射光源を安定供給し続けることで、多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきているが、過去の履歴から計画的に更新可能な老朽設備（電磁コイル、シンクロコンデンサ、ストレージコンデンサ、クライストロン、シンクロ偏向ダクト真空ベローズの一部）は、今後 10 年間を目安に所長裁量経費によりその約 6 割について更新完了させることを決定（2019 年度）し、順次進めている。2022 年度は電力料金の高騰問題があり節電対策を検討し、昨年度比で同月毎 2~10% の使用量削減に成功した。電気料の圧縮は一定程度の実行ができたが、予算使途対策としては費用対効果は小さく、抜本的な解決策とはいえない状況である。次年度に向けて、空調設備をインバーター空冷型への変更を検討している。いずれも水冷型で、現 7 台の耐年経過による更新時期が間近である。現状は水冷型空調機であるため on/off のスイッチングにおける設備膨張率の影響があり、蓄積リング内における数 10 マイクロメートル程度のビーム軌道の空間変動に効いてくる。ビーム軌道補正により対処しているが、更新により恒温環境になれば高精度実験へ向けたより高水準の調整が可能と考えている。

一方、開発研究の視点で新規光源探査や量子ビーム開発とその利用にかかる研究は、今や UVSOR の独創性の代名詞とも呼べるもので、多彩な学術利用あるいは産業利用の展開が期待されている。こうした研究は、大型施設では通常の放射光ユーザーのための定常運転への影響があるため困難であるが、小型施設ならではのメリットとして、光源パラメータ操作の自由度が高いことや、週末実験などで定期的な実験環境が与えられていることがあげられる。2020 年度に、平准教授が着任し、パルスガンマ線発生と陽電子消滅によるビーム利用研究を推進している。前述のように特殊運転が必要な実験は、ユーザー利用の無い週末あるいは特定の専用運転週をユーザー利用週の間を設定して運営してきた。今後の需要バランスを鑑みて、ガンマ線利用実験が通常のビームタイムで実施できるように、2022 年春に蓄積リングの電子バンチ軌道を新たに設計し、新軌道で定常運転することに成功した。その他、ここ 1-2 年は、加藤特任教授（クロアポ）らによるタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干渉実験等も行われているが、通常の放射光利用と大きくパラメータが異なるために、他ユーザーの影響がない週末に限定して実施している。アカデ

ミア全般で人材難が深刻になりつつあるが、助教2名の転出等により加速器関連のスタッフ不足に陥っている。共同研究者であるパワーユーザーに兼任職を依頼することで人的補填とし、特殊運転業務を運用している。安定な加速器運転は全ての放射光利用研究に関わるため、中長期的な持続性担保のために早急にスタッフ補強のための人事を進めたい。

### 8-1-3 ビームラインと観測系利用状況

ビームライン実験設備については、国際的な10年程度の先端開発研究サイクルに後れを取らぬように、各ビームラインの利用状況と国際動向を踏まえた設備の順次高度化が必要で、分子研予算と外部研究費等により開発研究を継続している。現在、ビームラインは14基が稼働しており、海外からの第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン6基を中心に実験設備の重点整備を進めている。特に真空紫外分光、光電子分光、軟X線吸収分光は物性・機能研究の点で世界的競争力がある。開発が終了したビームラインからユーザー利用が開始されているが、今後は国際利用率を増加させる方針である。

軟X線BL6Uでは、2020年から立ち上げ中の光電子運動量顕微鏡の調整を進めつつ、デモンストレーション実験を協力研究により推進している。2022年度に二次元スピン検出ユニットを導入し、スピン分解機能を付加した同顕微鏡装置の最終設備開発が始まった。さらに、低エネルギーVUVのBL7Uの光源をブランチ化し、同顕微鏡に導入する機構を立ち上げ中である。一方、同BL7Uでは、光電子アナライザーの電子捕集レンズ部をディフレクタ機能の追加により更新し、高効率角度分解光電子計測装置への改良に成功した。BL5Uではスピンマニピュレータ機能の導入により、高効率スピン分解光電子計測装置への改良を行いレンズパラメータの調整を進めている。またいずれも電子構造の大規模な多次元計測の効率化のために、計測自動システムの構築を進めている。

また汎用設備であるバンディングラインにおいても、国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており、貴重な材料物性評価の成果が発信され続けている。バンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て、アンジュレータ光源の先端ビームラインとのバランスを取りつつ運用を継続していく。2022年度から、絶縁性試料や易光損傷試料系における需要を鑑み、BL4Bにおける有機用角度分解光電子分光エンドステーションによる実験支援を開始した。代わりに既BL2Bにおける光電子分光システムの利用支援は次年度は停止する。将来的には空きスペースを活用し、オペランド化学状態計測ビームラインの拡張を計画している。なお、結果的にBL4Bは複数の実験設備が併設されることで利用コミュニティが多岐にわたり、磁気円二色性(XMCD)実験や、その他X線吸収分光実験の需要と共に申請競争下に置かれることとなった。審査体制を見直し、半期毎にこれら3分野の割り当て実験週数を策定し、それぞれの枠内で配分審査を実施することとした。

一方で、小規模施設の運営面の課題として、ビームラインスタッフの増強と技術の伝承があげられる。近年教員の転出や技術職員の定年退職などが相次いでおり、UVSORは組織規模に比して極めて少人数で運営している。UVSORでは、火曜日から金曜日日中の48時間(12時間×4日間)に加え、木曜夜間の12時間にも運転を実施し36時間連続したトップアップ運転を実現している(合計60時間/週)。ただし夜間のマシングループの人員を恒常的に配置する余裕がないため「木曜夜間の12時間中にトラブルがあっても補償しない」という運用方針のもと供給を行っている。技術職員の負担軽減のため、2021年1月から教員の深夜勤務、準夜勤務を開始した。また週末運転やスタディ運転では、所外のパワーユーザーに兼任職として支援を依頼している。グループ助教の空きポスト人事も平行しているが、スタッフの余力が不十分な状態は解消されておらず、転出等による突発的な業務エフォートの変化に対応することが困難であり、引き続きUVSOR運営スタッフとして適任者が見つければ、採用枠を確保しスタッフとして迎えたい。運営面では後述のように、課題審査システムを抜本的に見直し、スタッフ業務の軽減をはかっている。

#### 8-1-4 中長期計画（次期施設計画、課題審査システム再構築）

2018年度より、UVSOR-IIIの後継となる次期小型放射光施設の建設に関する検討が進められている。2023年度は40周年事業に合わせ、各実験手法を軸として次期施設コンセプトデザインレポートをまとめる予定である。歴史を振り返ると、光科学は光源技術の深化と共に多様な分野へ発展してきたが、まだ多くの未活用分野が残る。特に近年の化学・バイオ系分野の需要の高まりに対応できていない。かつてUVSORでもそうであったように、複雑系の計測は萌芽的に試みられてきたが、当時の技術背景もあって成功例が十分とは言えない。今後、新たな学術開拓を目指すためには、これまでの易損傷物質への計測技術ノウハウを元にした、放射光施設の支援体制の抜本的な変革が求められる。成熟した各種光源の最適化・安定化を軸に、時代背景に即した使い易いインフラ環境と高度な研究支援体制による光科学の一般化を実現し、岡崎三機関の研究土壌を生かした新たな融合生命分子科学拠点を構築する計画である。個人研究から協調的研究活動の時代へ適合するための融合型ファシリティと組織体制改革が効果的で、光源技術の集約と組織規模の拡大により支援体制を刷新する。新センターは現状の倍程度である60余名規模の支援体制を想定している。また、歴史的にUVSORの強みである新たな量子ビーム開発技術を元にした先端光科学による新規基盤学術の開拓によるブランド化も有効であるため、一般化と合わせた二面展開による中核研究基盤を構築する。

大小様々な検討会を積み重ねてきているが、11月に行われた第五回次期施設建設検討会においては、NanoTerasuとあいちSRセンターとの連携について議論した。あいちSRの産業利用に特化した利用コンセプトと支援システムは極めて特徴的で、利用率の6割強を民間企業が担う稼働実績は、国際的にみて極めて独自であり、同様の目標を掲げる欧州施設のロールモデルとなっているほどである。放射光大国として10か所のリング型施設をもつ我が国の強みが発揮されている点、つまり施設の役割分担が効果的に機能している事例ともいえる。中部地区の放射光施設としては、産学利用の役割分担を意識し、有効な連携関係を継続していくことが望ましいだろう。例えば産業利用でよりアドバンストな実験が求められる時には、UVSORで発展課題を実施するなど、こうした近隣施設間を橋渡しするような利用支援も有効と思われる。NanoTerasuではコアリションメンバーシステムで、同様の民間企業に対する支援環境問題を打破する計画であるが、運転開始からその動向を注視したい。我が国における各施設の将来計画が散見される中、大学共同利用機関の役割やミッションを明確にし、次期施設の詳細について更なる検討を進めていきたい。

一方で、2023年度の申請課題からwebシステムの完全英語対応と、新たな審査体制システムを導入した。次期施設建設の実現へ向けた国際競争力強化のために既存の審査システムの再構築を行うものである。コンセプトは、利用の国際化によって高インパクト成果の件数増加を期待しつつ、未利用分野等のユーザー拡張を目論み、新規参入を拒まない共存スタイルにする。また短期インパクトは低くとも着実な基礎学術的課題と恒常的な成果発信力は施設の特徴付けとなるもので、課題審査で評価することとした。また、小型施設の特徴的な運営の柔軟性は維持し、適宜自由度をもって短期中期的な施設意向が反映できるように設定した。課題審査は前期後期の2回であり、審査項目の内容を一部見直した（web公開情報）。さらに、新たに一段階の審査過程を追加し、複数名の外部審査委員を含む分野別審査体制を初段階に導入した。採択までのプロセスは、3段階（第1次：分野別審査小委員会、第2次：課題採択小委員会、第3次：施設運営委員会）の審査によって進める。第1次では各課題の学術レベルを絶対評価で数値化。第2次は中期計画に基づいた施設ミッション評点と技術評点による配分日数を決めるための合議審査とし、相対評価5段階の査定と採択週数案を決定する。これを第3次で合議し承認する流れとした。これまでは分野別審査に相当するプロセスが無く、今後の分野の細分化・国際化の傾向や競争率の増加に対して煩雑であり運用上の懸念があった（競争率の高い一部のビームラインについては、これまでも第1次に相当する追加審査を実施していた）。今後は審査システム構築によるスタッフの業務負担の軽減が期待される。

本報告は、UVSOR 施設運営委員会（2018 年度より年 2 回）、UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会（2018 年 10 月以降逐次）、UVSOR 利用者懇談会（2018 年度より年 1 回）、国際諮問委員会（2019 年 12 月）、文部科学省各課との意見交換、における意見交換を元に改訂してきたものである（過去リポート参照）。また継続して外国人運営顧問により意見聴取も行われている（分子研リポート 2016 から 2021 参照）。

## 8-2 機器センター

機器センターは、先端機器の開発・維持・管理・運用、汎用的な物性・分析・分光機器の維持・管理・運用、所員ならびに所外の協力研究・施設利用者への技術支援を主な業務としている。先端機器開発に関しては、研究所内外の共同利用者と協力して、特色ある測定装置の開発とその共同利用を行っている。また、汎用的な化学分析機器、構造解析機器、物性測定機器、分光計測機器、および液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置等の多様な機器の維持・管理を行い、全国の共同利用者が分子科学研究を推進するための研究支援を担っている。一方、大学連携研究設備ネットワーク（設備 NW）の幹事機関として、機器センター所有の多くの機器を設備ネットワークに登録・公開し、この事業の運営を主導し事務局を担当している。また、2021年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラ（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関、2022年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として機器共用・民間利用拠点を務めることとなっている。

2022年度の機器センターの人員は以下のものである。センター長は2018年度から横山利彦が務め、分析チームリーダー・中村敏和（2019～）、合成チームリーダー・鈴木敏泰（2019～）、主任研究員・湊丈俊（2020～）の3名が先端的な共同利用を推進している。この3名は、先端的・開発的な共同利用（協力研究並びに施設利用）の推進に加え、俯瞰的視野に立った機器センターの運営、設備の維持・管理・開発・更新を行い、さらには、大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は、高山敬史技師、藤原基靖主任技術員、上田正主任技術員、岡野芳則技術員、賣市幹大技術員、浅田瑞枝技術員、宮島瑞樹技術員、長尾春代技術員（2023年2月に特任専門員から配置換）の8名が在籍し、ユニット長は繁政英治技術推進部長が兼任する体制となっている。また、技術系特任専門員1名（伊木志成子）、技術支援員1名（藤川清江）、事務支援員1名（兵藤由美子）が配置されている。これに加えて、設備 NW と ARIM の2事業において、運営マネージャー4名〔石山修、中本圭一、太田康仁（2022年5月～）、賀来美恵（2022年5月～）〕、事務支援員4名（船木弓子、内田真理子（育休中）、石川あずさ（2022年11月まで）、栗田佳子（2022年4月～））が配置されている。

研究所全体として大規模装置を効率的に運用する必要性の高まりを受けて、機器センターは比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理している。2013年度には、2012年度ナノプラットフォーム補正予算により、マイクロストラクチャー製作装置（マスクレス露光装置、3次元光学プロファイラーシステム、クリーンブース）、低真空分析走査電子顕微鏡、機能性材料バンド構造顕微分析システム（紫外光電子分光）、X線溶液散乱装置が導入され、マイクロストラクチャー製作装置は装置開発室が管理し、それ以外の3機器は担当教員のもと機器センターが維持・管理・運用し、既に多くの利用がある。2017年度には、他では利用しにくく外部利用頻度の高い極低温・微結晶単結晶X線回折の検出器の更新、マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI-TOF）質量分析計の新規導入、示差走査熱量計（DSC）、熱重量計（TGA）の新規導入などを行い、2018年度は、光励起状態の時間分解高磁場パルス電子スピン共鳴測定を可能にするための大強度ナノ秒レーザー・OPOシステムを新規導入した。2019年度には、オペランド多目的粉末・薄膜X線回折装置が導入され、さらには2019年度末に最先端の高速原子間力顕微鏡2機が導入された。さらに、競争資金で購入された汎用的な機器の共有・共同利用機器化が始まり、高性能二重収束質量分析計（所内共通機器、魚住教授より）、ESI-TOF型質量分析装置（所内共通機器、藤田卓越教授より）、電界放出形透過電子顕微鏡（共同利用機器、魚住教授より）が登録されている。2020年度は、老朽化した可視・紫外円二色性分散計の設備更新を行い、かつ、新型コロナウイルス感染症対策の2020年度第2次補正予算により400 MHz、600 MHz溶液核磁気共鳴の液体ヘリウム再凝縮器を付加することができた。また、ARIM事業2020年度補正予算によりデータ連携・遠隔操作

機能付電子スピン共鳴装置、2021年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計（SQUID）が導入され、さらには、2022年度概算要求によりヘリウム液化機の更新（2024年度納入予定）、ARIM事業2022年度補正予算による単結晶X線構造解析と有機自動合成システムの導入、所内予算による600MHz溶液NMRの新規導入（いずれも2023年度末納入予定）と名工大からの電子プローブマイクロアナリシス譲渡が進んでいる（2023年夏頃始動予定）。一方、これまで機器センター（ナノプラットフォーム）で運用されてきた800MHzクライオプローブNMRは2022年度より生命創成探究センターEXCELLSに移管されて運用されることとなった。

所外委員5名を含む機器センター運営委員会では、協力研究・施設利用の審査を行うほか、共同利用の在り方やセンターの将来計画について、所内外の意見を集約しつつ方向性を定めている。利用状況として、最近では年間200件程度の所外利用があり、共同利用機関としての責務は十分に果たしている。なお、大学共同利用機関法人評価において、所外運営委員を半数以上とすることが求められ、2022年度から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは設備NW、ARIM事業を推進しつつ、大学利用共同機関法人として大学等の研究者への直接的な研究強化貢献のみならず、大学等への組織的な機能強化貢献にも積極的・具体的に寄与すべきであろう。

国家全体の厳しい財務状況を考慮すると、汎用機器の配置や利用を明確な戦略のもとに進めることが不可欠となるのは言をまたない。実際、現在所有の多くの機器の老朽化が進んでいる。所内外の要望と需要を検討し、重点化の方向性と導入優先順位を議論し、概算要求のみならず外部資金を積極的に獲得することに努めた結果、電子スピン共鳴、超伝導量子干渉型磁束計、単結晶X線構造解析、高磁場核磁気共鳴、ヘリウム液化機などの更新が行える状況である。今後さらに中長期的にどのような機器ラインアップを維持するかの検討については、次の3つのタイプに階層化することを想定する。

- 1) 比較的多数のグループ（特に研究所内）が研究を遂行していく上で不可欠な共通基盤の機器。これらの維持は、特に人事流動の活発な分子研において、各グループが類似の装置をそれぞれ新たに用意する必要がない環境作りの面で最重要である。一方、使用頻度や維持経費の点で負担が大きいと判断されたものは見直しの対象とし、所内特定グループや他機関へも含めた移設などにより有効に利用してもらうことも検討する。
- 2) 当機器センターとしての特色ある測定機器。汎用機器をベースとしつつ改良を加えることによってオリジナル性の高いシステムを開発し、それを共同利用に供する取り組みを強化する。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」を柱とした分野強化を進める。その際、技術職員が積極的に関与して技術力を高めることが重要であり、主任研究員制度の適用も視野に含める。所外の研究者の要請・提案を取り込みつつ連携して進めるとともに、所内研究者の積極的な関与も求める。当センター内のみならず、UVSORをはじめとする所内センター等と共同して取り組むことも効果的である。所内技術職員の連携協力が技術を支えるのに不可欠であるが、コミュニティ全体から提案を求める体制づくりも必要となろう。
- 3) 国際的な水準での先端的機器。分子科学の発展・深化を強力に推進する研究拠点としての分子研の役割を体現する施設として、UVSORや計算科学研究センターと同様に、機器センターも機能する必要がある。高磁場NMR装置やESR装置は、国際的な競争力を有する先端的機器群であり、研究所全体として明確に位置付けを行い、利用・運営体制を整備することによって、このミッションに対応すべきである。国外からの利用にも対応するため、技術職員には国際性が求められる。2)と同様に、所外コミュニティからの要請・提案と、所内研究者の積極的関与が不可欠である。特に、新規ユーザーの開拓は、分子科学の新領域形成へと繋がると期待されるものであり、これまで分子研との繋がりがあまり深くはなかった研究者層・学協会との積極的な連携を模索することにも取り組む。先端的機器は不断の性能更新が宿命であるが、全ての面でトップたることは不可能であるので、意識して差別化を行い、分子研ならではの機器集合体を構成することに留意する。



2021年度から ARIM 事業が始動し、分子科学研究所は「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関と運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関としてマテリアル DX プラットフォーム形成に関与することとなった。このプログラムの主たる目的は、マテリアルデータベースのデータ収集・蓄積、共用プラットフォーム・データプラットフォーム構築、AI 等を用いたデータベース利活用などであり、マテリアルの構造・物性計測における測定自動化・遠隔化、マテリアル創成における合成自動化・AI 解析等によるハイスループット化も推進していく。DX は省庁を跨いだ大規模な国家プロジェクトであり、機器センターもその一翼を担う組織として積極的にデータ収集・蓄積さらには特徴ある解析アプリの提供等による利活用を推進していきたい。

### 8-3 装置開発室

装置開発室は、分子科学分野の研究者と協力し最先端の研究に必要となる装置や技術を開発することと、日常の実験研究において必要となる装置や部品類の設計・製作に迅速に対応する、という二つの役割を担っている。製作依頼件数は年間400件超に及ぶ。新しい装置の開発では技術職員が研究者と密接に連携し、また、日常の実験研究で必要となる工作依頼などについては、機械加工技能を持つ技術支援員が中心となり、対応している。

2021年度より新たに有償利用制度を設けることで、分子研外部からの製作・開発依頼受付を持続可能なシステムとして運用開始し、海外からの依頼も含めて対応できる体制を整えつつある。また従来からある施設利用については、他の施設と同様の形で継続している。

装置開発室は大きく機械工作を担当するメカトロニクスセクションと電子回路工作を担当するエレクトロニクスセクションに分かれている。メカトロニクスセクションでは従来の機械加工技術の超精密化に向けた取り組みに加え、近年では、リソグラフィなど非機械加工による超微細加工技術の習得に取り組んでいる。エレクトロニクスセクションでは、高速化や多機能化が進む電子回路の需要にこたえるために、プログラマブル論理回路素子を用いたカスタムICの開発等に取り組んでいる。これに加えて、3Dプリンタ、CAMやシミュレーションなどのデジタルエンジニアリングの導入を進めている。

装置開発室の設備については、創設から40年が経過し、老朽化、性能不足、精度低下などが進み、設備の更新は急務となっている。2013年度には、ナノテクノロジープラットフォーム事業の一環として、マイクロストラクチャー製作・評価のための先進設備を導入することができた。また、2019年度には5軸加工機と電子ビームリソグラフィ装置の導入を行った。2020年度は、附属3棟の改修により、工作环境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。今後も、装置開発室の将来計画・将来像の検討を進めながら、その方向性を強く意識しつつ、日常の実験研究を支えるための基盤的設備、先端技術習得のための先進設備、双方の更新・導入を進める。また、他機関との連携や、他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

## 8-4 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2022年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用等について記す。

2023年2月現在の共同利用サービスを行っている計算機システムの概要を示す。本システムは、2017年10月から稼働していた旧「高性能分子シミュレータ」を2023年2月に更新した「高性能分子シミュレータ」である。本シミュレータでは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論などの共同利用の多様な計算要求に応えうるための汎用性があるばかりでなく、ユーザーサイドのPCクラスタでは不可能な大規模計算を実行できる性能を有する。

高性能分子シミュレータは、主としてHPE製のApolloシリーズで構成される834ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは全て同一CPU(AMD E7763)、同一OS(Rocky Linux 8.7)を有し、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能6.68 Pflopsで総メモリ容量224 TBである。主力の演算サーバはType Cと呼ぶもので、2.45 GHzのクロック周波数をもつ128コア、256 GBメモリ構成の804台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半はType Cで実行される。Type Fはメモリを1 TBに強化した14台であり、他はType Cと同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type Gは1ノードあたり8 GPUを有する16台であり、筐体が違うものの他はType Cと同一である。インターコネクタはInfiniBandアーキテクチャを採用し、全台数を100 Gb/sで接続しており、大規模な分子動力学計算などノードをまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。これらクラスタ演算サーバは14.8 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。

ハードウェアに加え、利用者が分子科学の計算をすぐに始められるようにソフトウェアについても整備を行っている。量子化学分野においては、Gaussian, GAMESS, Molpro, TURBOMOLE、分子動力学分野では、Lammps, GROMACS, Amberなどがインストールされている。これらを使った計算は全体の1/3強を占めている。

共同利用に関しては、2022年度は296研究グループにより、総数1,238名(2023年2月現在)におよぶ利用者がこれらのシステムを日常的に利用している。近年、共同利用における利用者数が増加傾向にあり、このことは計算科学研究センターが分子科学分野、物性科学分野、生物物理分野において極めて重要な役割を担っており、特色のある計算機資源とソフトウェアを提供していることを示している。また最近、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

計算科学研究センターは、国家基幹技術の一つとして位置づけられているスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとも連携を行っている。これら2つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し、各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業(SCCMS)」を運営しており、2022年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部(10%以下)を提供・協力している。さらに、ハード・ソフトでの協力以外にも、分野振興および人材育成に関して、計算科学研究センター研究施設のワークショップ「複雑電子状態の理論・計算科学」と2つのスクール「第12回量子化学スクール」と「第16回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—」を開催した。また、

東北大学金属材料研究所，東京大学物性研究所，大阪大学ナノサイエンスデザインセンターと協力し，我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し，世界最高水準の成果創出と，シミュレーション技術，材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため，計算物質科学協議会を設立・運営し，分野振興を行っている。

## 2022 年度 システム構成

### 高性能分子シミュレータシステム 6.68 PFlops

クラスタ演算サーバ Type C	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：102,912 コア（128 コア× 804 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：4,034 TFlops（5,017.6 GFlops × 804 ノード）
	総メモリ容量：206 TB（256 GB × 804 ノード）
クラスタ演算サーバ Type F（メモリ強化）	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：1,792 コア（128 コア× 14 ノード） 2.45 GHz
	総理論性能：70 TFlops（5,017.6 GFlops × 14 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
クラスタ演算サーバ Type G（演算性能強化）	
	型番：HPE Apollo6500 Gen10 Plus
	OS：Linux
	コア数：2,048 コア（128 コア× 16 ノード） 2.45 GHz
	GPU：NVIDIA A100 NVLink
	総理論性能：80 TFlops（5,017.6 GFlops × 16 ノード） + 2,496 TFlops（19.5 TFlops × 128 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
外部磁気ディスク装置	
	型番：HPE ClusterStor E1000
	総ディスク容量：14.8 PB
インターコネクト装置	
	型番：NVIDIA Mellanox InfiniBand Switch
フロントエンドサーバ	
	型番：HPE ProLiant DL385 Gen10 Plus v2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1 TB（256 GB × 4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：HPE ProLiant DL360 Gen10 Plus
	OS：Linux
	総メモリ容量：1.1 TB（192 GB × 6 ノード）

## 8-5 生命創成探究センター

生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は、自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために、岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して2018年4月に設置された機構直轄の組織である。本センターでは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて、生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに、蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き、さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の設計原理を探究する。この目的のもとに、国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

2022年度を迎えるにあたり、ExCELLS創設から4年間の基盤整備期において整えた研究体制をさらに発展させていくために、新たに先端共創プラットフォーム及び連携強化プラットフォームを始動した。この2つのプラットフォームにより、国内外の大学・研究機関との共同利用・共同研究を一層強化するとともに、産業界との共創の推進も目指している。

先端共創プラットフォームでは、センターに所属する教員と外部の研究機関が一体となって研究チームを構成し、設定された研究課題に共創的に取り組むExCELLSプロジェクト研究を実施する。その第一弾として、2022年9月から「物質-生命の境界探査」プロジェクトを始動した。本プロジェクト研究では、ExCELLSの研究者が中心となって進める8つのサブチームと、外部の大学の研究者から提案された研究課題を進める4つのサブチームとが互いに共創しながら、生命機能を維持するために必要となる、本質的あるいは最小の機構や原理を解き明かすために、極限環境に生きる生物、ウイルス等における生物間相互作用や環境応答に関する分子複合体の形態・機能・動態を観測し、物質-生命の境界の体系的理解を目指す研究を実施している。

連携強化プラットフォームでは、国内外の大学・研究機関との組織間のネットワークの強化を図り、連携構築を戦略的に推進している。糖鎖生命科学ユニットでは、共同利用・共同研究拠点である「糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点（J-GlycoNet）」の活動を東海国立大学機構糖鎖生命コア研究所及び創価大学糖鎖生命システム融合研究所と連携して進めている。さらに、このネットワーク型拠点を基盤として、文部科学省 大規模学術フロンティア促進事業「ヒューマングライコームプロジェクト」の本格始動に向けての準備を進めている。この活動を強化する目的で、創成研究領域に糖鎖構造機能解析グループを新規に立ち上げた。一方、先端創薬ユニットでは、文部科学省・先端研究基盤共用促進事業（先端研究設備プラットフォームプログラム）NMRプラットフォームの活動を分子科学研究所より引き継ぐとともに、日本医療研究開発機構 生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）の活動を開始し、名古屋市立大学の創薬基盤科学技術開発研究拠点とも連携して、先端的な創薬基盤技術等の創出を目指す活動に取り組んでいる。

これらの連携活動を支え、共同利用・共同研究拠点やMOU締結先研究機関等との連携の強化を図るため、研究連携推進室を改組して研究戦略室を新たに設置した。

2022年度も前年度に引き続き、本センター以外の研究機関に所属する複数の研究者が研究グループを構成したうえで、新規な研究手法・測定手法の開発等を通じて分野横断的な研究を推進する連携研究グループの活動、並びに機構外の研究者がセンター内の複数のグループとともに異分野融合研究に取り組むExCELLS課題研究（一般・シーズ発掘）を実施した。また、2023年2月には「細胞のまるごとモデリング」を目指す連携研究グループ細胞シミュレーション

研究グループを新規に立ち上げた。

一方、極限環境生命探査室では深海、地下、極地、大気圏外などにおける生命体の活動を探査・解析することを目指して生命の始原形態と環境適応戦略を理解する研究を実施する。海洋研究開発機構と連携した深海・地下生命研究グループ、慶應義塾大学先端生命科学研究所と連携した極限環境耐性研究グループと極限環境生命分子研究グループ、物質-生命境界領域研究グループが活動している。2022年度は、超高解像度クライオ電子顕微鏡及び800MHz溶液NMR装置を活用した共同利用研究を開始した。

異分野融合研究を推進するためのセミナーや研究会も活発に行っており、海外の研究者との学際的交流を企図したシンポジウムも開催している。分野横断型の研究集会（ExCELLSシンポジウム）や若手が主体的に企画運営する研究集会（ExCELLS若手交流リトリート）をオンライン開催し、海外の研究者との研究交流を図った。また、学術交流協定を締結しているアカデミアシニカ（台湾）の研究者との共同利用研究を実施した。デンマーク政府が支援するInternational Network Programに基づき、Aarhus UniversityのInterdisciplinary Nanoscience Center（iNANO）から2名の研究者を迎え、分子研とExCELLSの共催でiNANO-IMS-ExCELLS Interdisciplinary Nanoscience Joint Meetingを開催した。デンマークと日本の学術交流の発展に向けて、iNANOと分子研・ExCELLSの研究活動紹介と今後の共創活動に関する意見交換を行った。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授が副センター長をつとめるとともに金属生命科学研究グループを主宰し、加藤晃一教授が研究戦略室長をつとめるとともに生命分子動秩序創発研究グループと極限環境生命分子研究グループ、奥村久土准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループ、古賀信康教授が生命分子創成研究グループをそれぞれ主宰している。