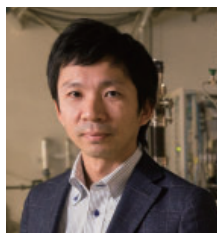


極端紫外光研究施設 (UVSOR)



解良 聡

極端紫外光研究施設 施設長



スタッフとシンクロトロン室にて

1983年の運転開始から40年以上が経過しましたが、2003年度の第一期高度化、2012年度の第二期高度化により、赤外線、真空紫外線から軟X線およびガンマ線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されています。特に真空紫外光域では国際的にみても希少な第三世代放射光施設で、多様なニーズに応えるために今後も持続的な発展を目指します。研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の更新が不可欠ですが、全13基のうち6基の先端計測ビームライン設備が成熟し、主に、材料科学、光化学、環境エネルギー分野の先端的成果の収穫期に入りました。またUVSOR-IIIの高い光源性能と柔軟性／俊敏性の運営自由度の特徴を活かした、独自性の高い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コヒーレント放射光科学も推進しています。その他の標準的共同利用ビームラインにおいても、国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで波長連続可変な分光システム等が稼働しており、材料開発研究にて貴重な成果が発信されています。

小型施設UVSORは、中型施設NanoTerasuと大型施設SPRING-8の相補的な運用を行う先端放射光施設であり、あらゆる研究の多様性を担保する放射光コミュニティの総合力は、国際的にみた我が国の優位性です。各施設における光源の波長帯域の相補性だけでな

く、施設ミッションとしてゼロをイチにする学術開拓、研究の厚みを創る学術から社会実装までのニーズとシーズの相関や、その研究時間スケールの違いによる相補性を意図した運営も重要な因子です。SPRING-8の次期計画によって役割分担はより明確になり、今後は赤外光域を利用するユーザーをUVSORで受け入れることになっています。

これまで積み重ね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ると、次期施設の建設計画(UVSOR-IV)を策定する時期にあり、2018年度より具体的な検討を進めています。現状の先端研究アクティビティを維持しつつ、持続的に先端分光を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の連携、未利用ユーザーへのAI支援技術によるニーズ拡張への対応が重要で、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す。次期計画では、小型放射光を軸としつつも、あらゆる光源(高輝度放射光、自由電子レーザー、高次高調波レーザー等)を多彩に活用できる実験設備を一元集約し、AI技術を積極的に導入しつつ、ニーズに沿ったテーラーメイドな研究環境を整備します。大学共同利用機関として長期的に支援する先端施設と位置付け、成熟した各種光源技術を有機的に組み込んだ国際的に見ても稀有な、唯一無二の研究空間の創出を目指す予定です。

光科学は、放射光施設の歴史的な背景からも明らかのように、あらゆる分野における利便性と拡張性を持ち合わせています。自由度の高い研究を推進するために、適切な規模の設備・人員を配置した光拠点センターが軸となり「高度研究支援環境パッケージ」として異分野融合の横串役となります。未開拓の分野にも「光」をあて、長期的視点で広範な学術の裾野を広げ続ける使命を担いたいと思います。特にバイオ系(生物学、農学、薬学、生命科学等)の実験手順では、放射光を利用実験の前後の評価や、試料調製環境の充実が不可欠で、作業時間と空間配置を意図した総合的な研究スペースの設計が極めて重要となります。新たな分野を巻き込むことで、自ずと新たな若い力が「光」として注がれます。さらに新たなニーズの刺激を経て開発される新手法は、既存の化学/材料分野へ還元され、新たな循環システムが稼働すると期待します。岡崎三機関の基礎生物学研究所、生理学研究所の研究グループとの共同研究により、原理検証実験を通じた萌芽的研究を開始しています。またPF、HiSOR、東大物性研との放射光学術機関連携を強化し、長期的視点での啓発活動も進めています。分子研の牽引力とともに、自らが光りつつその道程を灯しましょう。

次期計画のコンセプト概要の詳細

<https://www.uvsor.ims.ac.jp/uvSOR4/>



機器センター



横山 利彦

機器センター センター長



分子科学研究所がめでたく創設50周年を迎えたことについて、まずは大変うれしく思います。私は2007年4月に当時の分子スケールナノサイエンスセンター長を拝命し（～2012年度末）、続いて、2014年9月から現在まで（2016、2017年度除く）、機器センター長を務め、微力ながら分子研の重要なミッションの共同利用支援について従事してまいりました。ここでは、機器センターを中心とした共通機器共同利用のこれまでと今後について、私見を交えながら述べたく思います。

機器センターは分子研創設の1975年に設置されており、1977年には所内液体He供給と極低温分子物性研究の目的で極低温センターが立ち上げられ、創設当初から分子研の研究と共同利用に貢献してきました。1997年に分子物質開発研究センター、2002年に分子スケールナノサイエンスセンター、2007年には再び機器センターと名称を変えながらも共通機器の維持・管理・共同利用対応を担っています。厳密なことを言うと、2002年以前は直接的な外部施設利用を行っておらず、外部利用者は所員と協力研究を行いながらセンターを利用する形態をとっており、UVSORや計算センターのような施設利用はありませんでした（所員との共同研究が原則）。

2002年のナノセンター設置時に直接的な施設利用の受入が始まり、大部分の共通設備は現在に至るまで施設利用可能機器として公開されています。2002年の施設利用開始は、文科

省ナノテクノロジー総合支援プロジェクトを受託し、ナノセンターが本受託研究の運営母体を担ったことに依っています。ナノ支援（2002～2006年度）は、ナノテクノロジーネットワーク（2007～2011年度）、ナノテクノロジープラットフォーム（2012～2021年度）、マテリアル先端リサーチインフラ（ARIM, 2022～2031年度）に引き継がれ、分子研は、ナノ支援において分子合成領域中核機関、ナノネットでは中部地区代表機関、ナノプラットフォームでも分子・物質合成領域代表機関を務め、国プロジェクトの一員としても機器共用・共同利用に貢献してきたと言えます。

また、分子研は、全国国立大学等の機器共用を促進する目的で、大学連携研究設備ネットワークを主宰し、研究設備予約・課金システムの運用、技術人材育成のための講習会開催、機器整備等を支援する加速事業などを実施し、年間で200,000件を超える各大学等の共用機器予約管理を行っています。本事業は、共同利用機関法人のミッションである他大学等の機能強化貢献としても大変役に立っている不可欠な事業と言えます。

現在の機器センターあるいは分子研全体の最大の問題点は、他大学や研究機関でも状況は同じでしょうが、共通機器更新が予算的になかなか行えないことにあります。以前は補正予算等によって設備更新がある程度行えていましたが、最近では極めて厳しい状況が長年続き、設備の

老朽化や廃止が止まりません。この対策として、ARIMなどの国プロで措置される予算による設備更新、あるいは個人の外部競争資金で購入された機器を課題終了後に共通機器に転用するなどの方策がとられています。機器センターにとって、ARIMなどの国プロは継続的な先端設備導入のために不可欠の財源となっているのが現状です。さらに、最近の物価高騰が追い打ちをかけていることも看過できません。特にHeは10年前に比べて4倍程度にも高騰しており、Heの大量消費量（毎年の消費量は名大を上回る）と機器センター経常運営費が増額できないことから、問題は極めて深刻になっています。

しかしながら、ARIMなどの国プロは、昨今の受益者負担の原則から利用料徴収が一般的となっており、分子研のような共同利用機関法人が利用料無料で施設利用を実施している形態と大きな食い違いが生じてしまっています。他の研究機関を見ても、極めて先端性の高い機器の共用を除き有償利用は残念ながら常識的となりつつあります。機器センターとしても、共通機器の施設利用の有償化（消耗品実費等の徴収）を考えていく必要のある時期に差し掛かっており、今後は所として一般的な考え方を検討していく必要があるでしょう。

機器センターの最先端共通機器を用いた共同利用研究は、所員の高い専門スキルに支えられ、極めて高い研究成果が挙がっています。機器センターの規模を縮小することなく分子科学研究が今後も発展していくことを切に望みます。

装置開発室



山本 浩史

装置開発室 室長



装置開発室は、1975年4月22日の創設以来、分子研の研究活動を技術面から支えてきました。研究所の発足時から継続して存続している唯一の組織であり、まさに分子研の技術基盤の中核を担ってきた存在です。本稿では、装置開発室のこれまでの主な活動と成果、そして今後の展望について紹介します。

装置開発室は、分子科学研究に不可欠な装置を所内で開発・製作することを目的に発足しました。当初は、機械工作、電子回路設計、ガラス工作部門の三部門から構成されていました。発足以来、市販の実験装置だけでは応用の自由度や性能に限られる中、研究者のアイデアを具現化するために、柔軟で高度な技術支援体制を提供し続けています。装置開発室は研究者と技術職員が密に連携するスタイルを創出し、研究の立案段階から試作、改良に至るまでのサイクルをスムーズに進める体制を構築しました。この「現場で試行錯誤できる環境」は、他の研究機関では得がたい強みとして、現在に至るまで継続しています。

現在ではガラス工作部門を廃止し、以下の4つの領域で研究者の多様なニーズに対応する多機能な技術集団として活動しています。

「機械加工」真空装置やサンプル固定治具など、様々な金属加工により精密部品を製作

「電子回路工作」アナログ／デジタル／高圧／無線回路、FPGA／マイコン制御の開発

「リソグラフィ・微細加工」フォトリソや電子ビーム描画によるマイクロ構造の製作

「デジタルエンジニアリング」3Dプリンタや磁場／熱／歪み等のシミュレーション

2016年からは明確なミッションとして、「研究者にとって一番身近な技術者集団となる」という目標を掲げ、装置開発室の役割を再定義しました。このミッションは単なるスローガンにとどまらず、日々の装置相談対応、仕様設計支援、トラブル対応の迅速化、そして新規技術導入の柔軟性に現れています。また、4つのビジョン・バリューとして

- ・自然科学に興味を持ち、科学的考え方と発想を身につけ、分子科学研究所の発展につながる次世代技術に挑戦します。(挑戦)

- ・研究機器の設計製作および関連する技術分野において、室員一人ひとりが主体的な心構えを持ち高度な技術力を身につけます。(学ぶ)

- ・研究者と協働する意識を持ちディスカッションを重ね、要望に近づく装置づくりを目指し、所内の先駆的な研究を支援します。(貢献)

- ・所外の大学・研究機関からの設計製作依頼に応え、自然科学に関する技術ネットワークを拡充し、分子科学研究に役立つ技術ノウハウを集約するハブとしての役割を担います。(リーダーシップ)を掲げています。

装置開発室はこれまで、分子研にお

ける数々の先導的研究を装置・技術面から支えてきました。その支援実績は、基礎研究から応用研究に至るまで多岐にわたり、坂田グループの酸化チタン光触媒、高谷グループのBINAP合成、西グループのMCND合成、平等グループのマイクロチップレーザー開発、大森グループの量子コンピュータ関連装置など、多くの研究を道具の面から支援してきました。

研究者が「まだ実現方法が定まっていないアイデア」を持ち込める場所であり続けること、それこそが装置開発室の真価であり、存在意義であると私たちは考えています。技術継承として設計図・加工ノウハウのデジタルアーカイブや若手技術者の育成にも力を入れてきました。今後は光学機器設計を視野に入れた「オプティックス部門」の可能性も検討していきたいと考えています。装置開発室は、分子科学研究所の創設とともに発足して以来、変え続ける研究の最前線を支える技術基盤として、その役割を一貫して担ってきました。「研究者にとって一番身近な技術者集団となる」というミッションのもと、装置開発室はこれからも変化と革新を恐れず、必要とされる技術と向き合い続けます。装置という「かたち」あるものを通じて、まだ見ぬ科学の扉をともに開いていく。その姿勢こそが、これからの50年を見据えた私たちの出発点です。本稿が、装置開発室の活動と理念を少しでも多くの方々に知っていただく契機となれば幸いです。

計算科学研究センター



江原 正博

計算科学研究センター センター長



計算科学研究センターは1977年に電子計算センターとして創設され、2027年には創立50周年を迎えます。当センターは共同利用を通じて、全国の研究者に利用され、発展して参りました。多種多様なニーズに対応できるよう、2023年にシステムを更新、ライブラリソフトを豊富に実装し、常に最新版にアップデートして利用環境を整備してきました。近年、理論・計算科学は多くの分野に浸透し、利用者は急増しており（下図）、常にジョブが計算ノードを埋めている状態が続いています。利用者による研究成果発表の実績も極めて良好であり、Nature誌、Science誌等の優れた学術誌に発表されたものをはじめとして、年間400報以上の論文発表があります。これは分野拠点の計算センターとしては全国トップレベルの実績であり、全国共同利用施設として有効に活用されていることに、利用者の皆様には心から感謝したいと思います。

スパコンの共同利用だけでなく、人材育成や分野振興もまた、センターの重要なミッションです。毎年ハイブリッドで開催し、多くの参加登録がある分子シミュレーションスクール、量子化学スクールは一流の講師陣を招へいし、理論・計算科学分野の学生から企業の研究者まで、幅広い方を対象に基礎から応用まで学べる場を提供しており、好評を博しています。また、設立当時から毎年開

催しているスーパーコンピュータワークショップは最先端の研究の交流の場となっています。

2024年度には基生研のスパコンが統合され、ゲノム関連のソフトがライブラリに実装されました。それに伴いセンターの計算機の活用を基礎生物学分野に広げる2つのトレーニングコースを実施しています。

利用される研究分野は年々広がってきています。全国共同利用者の分野は分子科学、基礎生物学、生理学、生物物理、基礎有機化学、錯体化学、材料科学、触媒化学、電気化学、薬学など多岐にわたり、今後ますます幅広い研究分野で計算科学研究センターは活用されるであろうと期待しています。

センターでは、学理を追求する研究を継続して支援していくことは言うまでもありません。一方、近年急速に発展している人工知能／機械学習（AI／ML）を活用した研究環境の整備もまた新たな課題だと認識しています。AI／MLを利用したソフトは数多く開発されていますが、ソフトの有用性を評価し、実装しております。ハード面にお

いても、ポスト富岳やHPCIの状況を精査し、当センターの役割を適切に判断して、整備する必要があります。理論・計算科学の進展は極めて速く、近未来の研究は想像を超える世界になっていることが予想されます。しかしその中で物質科学と生命科学の研究所がある岡崎地区の強みを生かし、相互に研究交流を深め、連携し、独自性と国際的競争力を高めて最先端の施設として発展し続けることが大切であると考えています。

近い将来、遠隔化・自動化・自律化が進展し、他研究施設との連携において当センターの重要性は益々高まることが期待されています。岡崎インテグレートッドスマートファシリティ構想においてその一翼を担い、全国共同利用をさらに発展させることができるよう、センターの運営を目指していきたいと思っています。

最後にセンターがここまで発展してこられたのは、センタースタッフ全員の協力のお陰でもあります。この場を借りて、感謝申し上げます。

【システム(2023年2月に更新)】
計算ノード数: **834台**(CPU: 818, GPU: 16)
総演算性能: **約7 PFlops**
ディスク容量: **約14 PB**
【ライブラリソフト】
分子科学分野: **28** 基礎生物学分野: **80**
【共同利用(2024年実績, 重複無し)】
ユーザー数: **1,737名** グループ数: **429**
【論文成果(2023年実績, 重複無し)】
論文数: **426報**(約3分の2がQ1ジャーナル)

【分子科学スクール】
・分子シミュレーション: **360-410名/年**
・量子化学: **330-480名/年**
合計**3,715名**(直近5年間)
【基礎生物学トレーニングコース】
・ゲノムインフォマティクス
・Python AIプログラミング
【スーパーコンピュータ・ワークショップ】
125-200名/年

計算科学研究センターの現状