

5 . 各種事業

大学共同利用機関である分子科学研究所は、分子科学研究推進の中核として所内外の頭脳による共同研究と設備の共同利用を積極的に推進し、周辺分野を含めたコミュニティの世界的水準での活性化を重要な役割としている。法人化後、研究所は様々な提案を行い、文部科学省、自然科学研究機構、日本学術振興会による公募に採択されて予算配分を受け、多様な事業を展開している。近年の政府財政の改革に伴い、大学に於ける研究設備の老朽化に対する手当の不十分さから、化学の分野の研究者はその研究水準の維持向上を図る上で極めて危機的な状況に曝されている。この危機に対処するために、平成19年度からの5カ年計画としてスタートした「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」事業は、全国の大学の化学系研究者の支持を受けて、全国的な設備の相互利用を可能にするインターネットによる設備利用予約と利用料金の受け渡しシステムを構築し、使用困難な設備の復活再生と新規最先端設備の重点的配置を行うものである。この事業を大学共同利用期間としての分子科学研究所が行い、全国の大学の教育研究の充実に資すると共に、我が国の化学研究のより一層の活性化に寄与する事は重要であろう。一方で、研究所の研究活動の飛躍的向上を図るという観点から、理化学研究所との連携融合事業「エクストリームフォトンクス」が、平成17年度からスタートしている。これは、物理と化学の2領域にわたるフォトンクスの問題を基礎的な量子論の応用による分子の状態制御と先端光源開発までを含めた最先端の課題として取り組むものである。自然科学研究機構が主催する「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業」では、分子科学研究所が主体的にまとめている「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」、5機関共同で進めている「イメージング・サイエンス」および「自然科学における階層と全体」プロジェクトを実施しており、それぞれ着実な成果を上げ進展に寄与している。日本学術振興会が行っている多国間交流事業「アジア研究教育拠点事業」では、研究所が提案する「物質・光・理論分子科学のフロンティア」が平成18年度より採択され、中国、韓国やタイ、マレーシア、シンガポールなど東南アジア各国の若手研究者の交流と育成、共同研究プログラムを積極的に実行している。また、大学ばかりでなく産業界の研究開発の支援を行う文部科学省の先端研究施設共用イノベーション創出事業「ナノテクノロジーネットワーク」では、昨年度より「中部地区ナノテク総合支援」プロジェクトの幹事機関として名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学とともに各種装置の共用支援を行っている。最も規模の大きな事業としては、文部科学省の「最先端・高性能スーパーコンピューターの開発利用」プロジェクトに於ける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点として、ナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を推進している。

このような、各種事業を通して大学や産業界の研究者が分子研に集い、所内の研究者との活発な情報交換と共同研究が実施されることによって、分子科学やその周辺分野の研究推進に大きく寄与するであろう。

5-1 化学系研究設備有効活用ネットワークの構築（文部科学省）

国立大学における研究設備の老朽化等による危機的な状況を改善し、我が国の研究教育の基盤崩壊を防ぐとともに、先導的研究を推進するため、化学系の教育研究組織を持つ全国の機関が結集し、全国的な連携調整の下に「老朽化した研究設備の復活再生」及び「最先端研究設備の重点的整備」を行い、これらにより整備された設備及び既存の研究設備で外部に公開可能な設備を対象として、全国・地域設備活用ネットワークを構築し、大学間の研究設備の有効活用を図ることを目的として、特別教育研究経費による「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」（平成19～23年度）がスタートした。本ネットワークには全国73の機関が参加している。19年度は調査費相当の950万円が計上されたに止まったが、この事業が正式に認められ、ネットワークの全国的な周知を図るためのホームページ（<http://chem-eqnet.ims.ac.jp>）が開設された。ここには、全国的な相互利用の試行を行うための設備リストや予約課金システムが搭載され、機器管理者とのやり取りや設備利用終了後の課金処理と自動集計が可能となっている。平成20年8月には、予約課金と設備管理を行うシステム的大幅なアップグレードが行われ、設備管理者の権限の強化やマシンタイムの5分ごとの予約設定など設備管理者及びユーザーにフレンドリーなソフトウェアに進化した。このような大規模なネットワーク相互利用システムは初めてのものであり、大学内の相互利用にも取り入れられつつある。設備のネットワーク相互利用には61機関が設備を供出し、195台の装置が運用されている。平成20年9月の登録研究室数は1161研究室であり登録利用者数は5579名に上っている。現在は、このシステムを利用した大学内の学部を越えた設備の相互利用が加速されているが、大学間の相互利用は全利用数の1割弱である。これは、特殊な設備や、学内の装置にトラブルが発生した場合、或は、学内設備のマシンタイムが一杯である場合に他大学の装置が使われていると判断される。今後、より高機能の設備やより特徴のある設備を整え、使いやすい環境への整備を図ることによって大学間相互利用の割合を増やして行く必要がある。

平成20年度予算は1億円、21年度はその1%減に止まり、多くの研究者の望みを針金でつなぐ状況となっている。今後の一層の充実に向けての努力が必要であろう。大学共同利用機関としての分子科学研究所の本活動が、財政的に厳しい状況の中、我が国の化学の教育研究活動を支える基盤の構築に寄与することは、化学系の唯一の共同利用機関としての重要な役割であろう。全国の研究者の声に支えられてこれを確立して行きたい。

5-2 連携融合事業「エクストリームフォトンクス」(文部科学省)

平成 17 年度から理化学研究所との連携融合事業として「エクストリーム・フォトンクス」を推進している。「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という3つの観点から、両研究所が相補的に協力交流することによって、レーザー光科学のより一層の進展を図ろうとするプログラムである。分子研側からは、3つの観点のそれぞれにおいて以下の課題を選定し、いずれも精力的に研究を推進してきた。

(1) 「光を造る」

「光波特性制御マイクロチップレーザーの開発」(平等)

「新複合フッ化物の真空紫外発光デバイスとしての探索と新 VUV フェムト秒光源の実現」(猿倉)

(2) 「光で観る」

「時間・空間分解分光による固体表面・ナノ構造物質表面における反応研究」(松本)

「エクストリーム近接場時間分解分光法の開発」(岡本)

「タンパク質立体構造に基づく機能性発光分子の開発と生体機能解析システム」(小澤)

(3) 「光で制御する」

「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」(大森)

「紫外強光子場による反応コヒーレントコントロール」(菱川)

「高強度極短パルス紫外光を用いた超高速光励起ダイナミクスの観測と制御」(大島)

これらの課題の成果は、既に *Science* 誌, *Physical Review Letters* 誌, *Nature Methods* 誌などの超一流の学術誌に度々発表されただけでなく、多数の新聞各紙で取り上げられ社会的にも大きな注目を集めた。また、日本学士院学術奨励賞、日本学術振興会賞、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本化学会進歩賞、日本分光学会奨励賞、光科学技術研究振興財団研究表彰など、多くの権威ある表彰の対象となってきた。また、マイクロチップレーザーの開発では、産業界との共同研究が進展した。

この他に、両研究所の研究打合せや成果報告のため、毎年2回、定期的に理研・分子研合同シンポジウムを開催している。17年度は、4月に理化学研究所にて第1回の合同研究会を開催した。この研究会では、各参加グループのリーダーがそれまでの研究成果を紹介した上で今後の研究計画を披露し、これを中心に議論を行った。これに対して、11月には「分子イメージングとスペクトロスコピーの接点」を主題とした研究会を行い、より突っ込んだ議論を進めた。18年度は、4月に理化学研究所にて第3回理研・分子研合同シンポジウムを開催した。このシンポジウムでは特に「エクストリーム波長の発生と応用」をテーマとし、テラヘルツ光やフェムト秒X線の発生と利用について議論した。さらに、11月には「コヒーレント光科学」を主題とした第4回の研究会を行い、この方面における所外の研究者にも講演を依頼し、より突っ込んだ議論を進めた。19年度は、4月に理化学研究所にて「バイオイメージング」をテーマに第5回シンポジウムを開催した。ここでは、高感度レーザー顕微鏡やテラヘルツ分光を利用した生体系のイメージングについて議論した。さらに、11月には「先端光源開発と量子科学への応用」を主題とした第6回シンポジウムを行い、高強度超短パルスレーザーを始めとする先端レーザー光源の開発と、それらを原子分子クラスターあるいは表面ダイナミクスの観察や制御へと応用した研究成果と今後の展望について議論した。20年度は、5月に理化学研究所にて「イメージング」をテーマに第7回シンポジウムを開催した。ここでは、超高速分子イメージング；生体分子イメージング；テラヘルツイメージングについて議論した。さらに、11月には「Ultrafast meets ultracold」を主題とした第8回シンポジウムを行い、超高速コヒーレント制御や極低温分子の生成、およびそれらの融合が生み

出す新しい科学に関する研究成果と将来展望について議論した。いずれのシンポジウムにおいても、両研究所内外の研究者に講演を依頼し、関連分野の先端について深い議論を行った。また、このプログラムを中心に、所内に日常的な議論の場としての光分子科学フォーラムを設け、光分子科学の進展を図っている。

5-3 分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業 自然科学研究機構)

5-3-1 概要

自然科学研究機構では、新分野創成型連携プロジェクトとして「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成事業」を行っている。これは、機構内で2月に公募され、審査によって採択課題が決められ、年度末に評価を行っている。

分子科学研究所からは、研究所が主体的にまとめている「巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成」、5機関共同で進めている「イメージング・サイエンス」および「自然科学における階層と全体」プロジェクトに多くのメンバーが参加している。またこの他に、少人数のグループ研究が走っている。「自然科学における階層と全体」では、昨年度の国際会議開催に続き、第4回シンポジウムを蒲郡のホテル竹島で開催した。実験（観測）と理論（シミュレーション）の双方から様々な発表がなされたが、統合的な課題として「ミクロとマクロを繋ぐ階層連結のシミュレーション科学」の重要性が認識され、今後これを中心とした活動の検討を進めることが合意された。

5-3-2 巨大計算新手法の開発と分子・物質シミュレーション中核拠点の形成

本プロジェクトは、方法論の開発から巨大計算にいたるまで、分子・物質の第一原理から出発した計算科学研究の中核拠点を形成し、物質科学および分子・物質を核とするナノサイエンス、バイオサイエンス等の自然科学の諸分野における世界の主導権を獲得することを目的としている。また、分子科学、核融合科学、生命科学、天文学の異なる自然科学階層に属する各分野の異なる方法論を共有・融合することにより、特に大規模複雑系を構成する分子・物質に対する計算科学研究にブレークスルーを実現し、それぞれの分野の方法論に新機軸をもたらす、学際的新分野を形成することも目指している。

2008年度、連携研究、ワークショップ、人材育成等について以下の活動を行っている。

(1) 連携研究

連携推進課題（3課題）（*責任者）

- ・巨大計算に向けた粒子シミュレーション手法の開発（岡崎*、江原、平田、永瀬、斉藤、核融合研・堀内、天文台・富阪、東大・北尾、産総研・森下）
- ・分子多量体形成と生理機能（基生研・望月*、生理研・永山、分子研・岡崎、平田、東大・北尾）
- ・物質・電磁場相互作用系のシミュレーション（分子研・信定*、米満、斉藤、核融合研・中島、東北大・森田）

連携課題（15課題）

- ・分子の励起状態と化学反応に関する理論的研究（分子研・江原）
- ・分子動力学計算に基づく凝縮系ダイナミクス（分子研・斉藤）
- ・ナノ分子の量子化学計算（分子研・永瀬）
- ・電磁場と露に相互作用した多電子ダイナミクスの解析（分子研・信定）
- ・3次元RISMによる分子認識（分子研・平田）
- ・量子化学の先進的分子モデリング手法開発と多参照電子状態の解明（分子研・柳井）
- ・量子古典結合多粒子系の非平衡集団運動制御の理論（分子研・米満）
- ・プラズマ大規模シミュレーションのための効率的並列計算手法開発（核融合研・堀内、中島）
- ・概日リズム振動の生体分子反応シミュレーション（基生研・望月）
- ・ミトコンドリアのenergetics simulation（生理研・永山）
- ・輻射輸送計算を用いた星間化学進化の研究（天文台・富阪）

- ・界面和周波発生分光の理論計算手法の開発（東北大・森田）
- ・第一原理分子動力学計算による液体及びアモルファスのポリモルフィズム（産総研・森下）
- ・生体超分子の立体構造変化と機能（東大・北尾）
- ・両親媒性分子水溶液の大規模分子動力学計算（名大・岡崎）

(2) ワークショップ

- ・第5回連携シンポジウム 2月16日
- ・分子・物質シミュレーション中核拠点セミナー 第30回～第34回
- ・討論会，学会の共催
理論化学討論会，分子シミュレーション討論会，理論化学シンポジウム

(3) 人材育成

- ・第4回分子・物質シミュレーション中核拠点形成事業人材育成講座
「分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——」 12月22日-25日

(4) 実施体制

- ・機構内11グループ 理論・計算分子科学研究領域，天文台，核融合研，生理研，基生研
- ・機構外4グループ 東北大，産総研，東大，名大

5-3-3 イメージング・サイエンス

(1) 経緯と現状

研究所の法人化に伴い5研究所を擁する自然科学研究機構が発足し，5研究所をまたぐ新研究領域創成の一つのプロジェクトとして「イメージング・サイエンス」が取り上げられることとなった。以下に，その経緯と現状について述べる。

平成16年度に機構が発足した後，研究連携室で議論がなされ，機構内連携の一つのテーマとして「イメージング・サイエンス」を立ち上げることが決定された。連携室員の中から数名の他に，各研究所からイメージングに関連する研究を行っている教授・准教授1～2名が招集され，「イメージング・サイエンス」小委員会として，公開シンポジウムその他プロジェクトの推進を担当することとなった。

平成17年8月の公開シンポジウム（後述）の後，小委員会において，本プロジェクトの具体的な推進について議論を行った。この機会に，各研究所が持つ独自のバックグラウンドを元に，それらを結集して，広い分野にわたる波及効果をもたらすような，新しいイメージング計測・解析法の萌芽を見いだすことが理想，という議論がなされた。それに向けた方策として，機構内の複数の研究所にまたがる，イメージングに関連する具体的な連携研究テーマをいくつか立てる案を連携室に提案したが，予算の問題等もあってこれは実現しなかった。

現状では，機構の特別教育研究経費「分野間連携による学際的・国際的研究拠点形成」の新分野創成型連携プロジェクトの項目として，イメージングに関連した研究所をまたがる提案が数件採択されている（「イメージング・サイエンス——超高圧位相差電子顕微鏡をベースとした光顕・電顕関連3次元イメージング——」など）。これが上述の提案に代わるものとして，「イメージング・サイエンス」に係る具体的な機構内連携研究を推進している。平成20年度には，岡崎統合バイオサイエンスセンター（生理研）の永山教授を中心に再編された小委員会が招集され，国立天文台に設置された一般市民向け立体視動画シアター「4D2U」（4-dimensional to you）を利用した，広報コンテンツ作成に関する検討が開始された。5研究機関がもつイメージングデータを元に，機構の研究成果を一般市民向けに解説する立体動画集の制作を目論んでいる。同時に，イメージングを中心とした機構内連携の新たな展開について議論を行っている。

(2) 実施された行事

このプロジェクトの具体的な最初の行事として、各研究所のイメージングに関わる興味の対象と研究ポテンシャルを、5研究所が互いに知ることを目的として、「イメージング・サイエンス」に関する公開シンポジウムを開催することとなった。

平成17年8月8日-9日に、「連携研究プロジェクト Imaging Science 第1回シンポジウム」として、公開シンポジウムが岡崎コンファレンスセンターで開催された。このシンポジウムでは、天文学、核融合科学、基礎生物学、生理学、分子科学におけるイメージング関連研究に関する、機構内外の講師による16件の講演、及び今後の分野間連携研究に関する全体討論が行われた。参加者は機構外36名、機構内148名、大学院生80名、合計264名を数えた。また、講演と全体討論の内容は、175ページのプロシーディングス（日本語）としてまとめられ、同年12月に発行された。この機会によって機構内のイメージング・サイエンス関連研究に関する研究所間の相互理解が進み、その後の機構内連携研究の推進に相当に寄与したと考えられる。

平成18年3月21日には、立花隆氏のコーディネート、自然科学研究機構主催で「自然科学の挑戦シンポジウム」が東京・大手町で開催された。これは、一般の観客を対象に、機構の研究アクティビティをアピールすることを目的として、立花氏が企画して実現したもので、当日は約600名収容の会場がほぼ満席となる一般参加者があった。このシンポジウムの中で、「21世紀はイメージング・サイエンスの時代」と称して、イメージングを主題とするパネルディスカッションが組まれた。ここにはパネラーとして「イメージング・サイエンス」小委員会委員を中心とする講師によって、5研究所全てから、各研究所で行われているイメージング関連の研究の例が紹介され、最後に講師が集まりパネルディスカッションが開かれた。このシンポジウムの記録の出版は諸々の事情で遅れていたが、平成20年度にクパプロから出版された。

平成18年12月5日-8日には、第16回国際土岐コンファレンス（核融合科学を中心とする国際研究集会）が核融合研究所主催で土岐市において開催された。この会議ではサブテーマが“Advanced Imaging and Plasma Diagnostics”とされ、プラズマ科学に限らず、天文学、生物学、原子・分子科学を含む広い分野におけるイメージング一般に関するシンポジウムとポスターセッションが企画された。分子科学研究所からも、数名が参加し、講演及びポスター発表を行った。また平成19年8月23日-24日には、「画像計測研究会2007」が核融合科学研究所一般共同研究の一環として、核融合科学研究所において開催された。平成20年11月10日-13日には、第39回生理研国際シンポジウムとして、“Frontiers of Biological Imaging—Synergy of the Advanced Techniques”が開催され、機構内のイメージングに関わる研究者も数名（分子研1名）が講演を行った。

5-3-4 自然科学における階層と全体

自然科学における5分野を包括する自然科学研究機構として、その学際領域研究の可能性を探る「階層と全体」プロジェクトがスタートして4年目を迎えた。5研究所の研究内容の理解から始まり、それぞれの専門分野における最先端の研究を理解しようという過程を経て、徐々に「自然科学における階層と全体」を考え、新分野としての可能性を探るという段階に至った。本年度は、第4回目のシンポジウムを開催し、内外の研究者14名の講演があった。

生理学研究所の重本教授は、「分子動態とシナプス形態から行動変化まで——記憶の長期定着に関わる階層と全体」という講演の中で、小脳の運動学習のメカニズムと機能不全に対する脳の他部位による補償回路の存在を指摘され、機能発現においても階層を越えた相互連結機構が存在する事を示した。望月教授は、遺伝子発現の定常状態数の上限の決定問題において、ウニの初期発生に関わる遺伝子ネットワークの解析から、重要な少数の遺伝子が抽出されることを紹介し、遺伝子の相互作用において細胞毎に異なる遺伝子活性状態が形成されることを指摘した。慶応大学の中

迫雅由教授は、個体の中の細胞活動とその素過程を担う蛋白質などの集合体間の階層連携について述べ、現在は蛋白質分子の高解像度可視化が可能となり、ミクロレベルにおける環境媒体と分子との関わりとマクロレベルにおける分子集団の離合集散との階層関係が明らかになってきた状況を紹介した。分子研の平田教授は、RISM/3D-RISMによる蛋白質中の空孔に束縛された水分子の「検出」の例に見られる「分子認識」研究が、蛋白質による選択的イオン結合、酵素反応、アクアポリン水チャンネルなどへと展開するという構想を紹介し、「生命階層」と「物質階層」の境界で本質的な役割を担う「分子認識」研究の重要性を説いた。東工大の木賀教授は、天文学的な遺伝子情報の組み合わせから偶然と必然問題を議論し、人工遺伝子暗号の構築・設計を紹介し、「生命のサブシステムを組み合わせる階層を登る」というストーリーを述べた。北大低温化学研究所の山本教授は、自然の階層性問題研究の歴史を Glashow, Anderson, 坂田昌一, エンゲルスの議論を例に紹介し、現代の科学の多様化と専門(おたく)化を指摘、全体像把握の困難というジレンマに陥った現状打破の必要性を説いた。また、ダストから惑星形成への進化過程の総合的描像の確立へのアプローチを紹介した。三重大学の阿部教授は、地震活動に於ける aftershock 即ち余震の理解が、臨界現象における長距離相関との類似性を有することを指摘し、本震とそれに付随する余震の時間発展が地震複雑ネットワーク表現によって初めて理解可能な事、この複雑系の科学において階層構造と全体との関係を捉える重要性を強調した。

2日目は、シミュレーション科学を中心とした講演が主体であった。核融合科学研究所の宇佐見教授は、階層横断現象として理解される磁気リコネクション問題を、連結階層モデルを用いて領域分割法によるインターフェース領域挿入条件を議論し、この連結階層モデルによる磁気リコネクション理解の検証と今後の展開を紹介した。国立天文台の桜井教授は、太陽コロナの発生が表面のガスの対流運動に起因するという波動説に対し、微小フレア爆発の連結集合の結果がコロナであるとする self-organized critically モデルを対比させた。これは、コロナという大きなスケールの現象が微小フレアという小さなスケールの現象との連結の解析によって理解されることを紹介した。京都大学の松岡教授は、心臓の心筋細胞収縮は血液を全身に送る重要な現象であるが、これは、複雑な蛋白相互作用によって調節される。これを、システムとしての心筋細胞制御機能を理解する為、コンピューター上に心筋細胞の機能の包括的シミュレーションを行う「Kyoto Model」を構築し、これが細胞内イオン濃度変化収縮、細胞容積調節、ミトコンドリア ATP 産生と ATPase による消費、受容体シグナル伝達系、等々の各過程を包括的に再現するものであり、心臓という大きなシステムの主要活動を理論的に再現する先進的取り扱いであることを示した。海洋研究開発機構 地球シミュレータセンターの廣瀬グループリーダーは、「摩擦動力学の連結階層シミュレーション」について雲の発生、燃焼流体、プラズマ、あるいは摩擦破壊の取り扱いにおいて、ミクロとマクロを結合するインターフェース問題が重要であり、原子間相互作用をマクロな系の連続体力学シミュレーションに反映させる方法論について議論した。一方、核融合プラズマ現象は時間的空間的な多段階のスケールにおける非線形相互作用を含む極めて複雑なシステムであるが、核融合科学研究所の Šchorič 教授は、この multiscale plasma simulation への projective integration method の導入を紹介した。この後、昼食をとりながら、個別にこのプロジェクトの今後の展開等について議論し、最後の総括的議論に備えた。午後に入って、東京大学の増田教授は、「複雑なネットワークの構造・機能」という題名で、ネットワークのデータ構造が、スケールフリー性、階層性、隣接点間の相関といった特性を有し、データが属する分野に依存しないことを指摘した後、複雑ネットワークの医学、脳科学、生物学への応用についての研究事例を紹介した。最後の講演は中央大学の松下教授による「複雑系の構造、統計、ダイナミクス」についてであった。地球環境を例とした、要素間の複雑な相互作用のみの理解からは予測出来ない多様な特性の自己組織的発現について紹介した。

最後に、本プロジェクトの今後の展開についての総括的議論が行われ、今回のシンポジウムの中で、新分野創成に繋がるテーマとして自然科学の階層を繋ぐ理論的理解の必要性とこれを前進させるための「階層連結のシミュレーション科学」が浮上して来た事が認識され、最終年度にはこの問題に絞ったシンポジウムの開催が提案された。

5-4 アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 (日本学術振興会)

21世紀はアジアの時代と言われている。分子科学においても欧米主導の時代を離れ、新たな研究拠点をアジア地域に構築し、さらにはアジア拠点と欧米ネットワークを有機的に接続することによって、世界的な研究の活性化と新しいサイエンスの出現が期待される。

日本学術振興会は、平成17年度より新たな多国間交流事業として、アジア研究教育拠点事業（以下アジアコア事業）を開始した。本事業は「我が国において先端的又は国際的に重要と認められる研究課題について、我が国とアジア諸国の研究教育拠点機関をつなぐ持続的な協力関係を確立することにより、当該分野における世界的水準の研究拠点の構築とともに次世代の中核を担う若手研究者の養成を目的として（日本学術振興会ホームページより抜粋：http://www.jsps.go.jp/j-bilat/acore/01boshu_acore.html）」実施されるものである。分子科学研究所は、「物質・光・理論分子科学のフロンティア」と題して、分子科学研究所、中国科学院化学研究所、韓国科学技術院自然科学部、台湾科学院原子分子科学研究所を4拠点研究機関とする日本、中国、韓国、台湾の東アジア主要3カ国1地域の交流を、アジアコア事業の一環として平成18年度にスタートさせた。アジアコア事業の特徴の一つとして、互いに対等な協力体制に基づく双方向交流が挙げられる。本事業においても、4拠点研究機関のそれぞれがマッチングファンドを自ら確保しており、双方向の活発な研究交流が着実に進展している。また、4拠点研究機関以外の大学や研究機関が研究交流に参加することも可能である。平成20年度までの3年間の活動の概要を以下にまとめる。

(1) 共同研究

物質分子科学においては、電子系有機分子を基盤とする機能性ナノ構造体の構築と機能開拓、先端ナノバイオエレクトロニクス、自己組織化金属錯体触媒の開発（以上、中国との共同研究）、超高磁場NMRを用いた蛋白質-ペプチド相互作用の精密解析（韓国との共同研究）、バッキーボウルの合成と物性（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

光分子科学においては、特異なナノ分子システムのナノ光学、テラヘルツ時間領域分光法を用いたジシアノビニル置換芳香族分子の分子間振動および構造（以上、中国との共同研究）、コヒーレントレーザー分光による反応ダイナミックスの解明（台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

理論分子科学においては、生体分子中における量子過程の計算機シミュレーション、ナノ構造体における光学応答理論（以上、台湾との共同研究）に関する研究が進展した。

(2) 共同セミナー

18年度は、「中国・日本グリーン化学合成シンポジウム」（中国・北京）、「第1回物質・光・理論分子科学のフロンティア冬の学校」（中国・北京）、「第1回全体会議」（日本・岡崎）が開催された。

19年度は、「中国・日本機能性分子の合成と自己組織化シンポジウム」（中国・北京）、「日中ナノバイオ若手研究者交流」（中国・北京）、「有機固体の電気伝導と光伝導に関する日中合同セミナー」（中国・北京）、「先端レーザー分光シンポジウム」（日本・神戸）、「次世代触媒創製を目指した機能物質シンポジウム」（中国・北京）、「第2回物質・光・理論分子科学のフロンティア冬の学校」（日本・岡崎）、「第2回全体会議」（韓国・デジョン）が開催された。

20年度は、「韓日生体分子科学セミナー—実験とシミュレーション」（韓国・ソウル）、「中日機能性超分子構築シンポジウム」（中国・北京）、「ナノケミカルバイオロジーアジアコアシンポジウム」（日本・岡崎）、「次世代触媒創製

を目指した機能物質シンポジウム(韓国・デジョン)、「元素の特性に基づいた分子機能に関する日中シンポジウム(中国・北京)」、「第3回物質・光・理論分子科学のフロンティア」冬の学校(台湾・台北)、「第3回全体会議」(中国・北京)が開催された。

5-5 ナノテクノロジーネットワーク事業「中部地区ナノテク総合支援」 (文部科学省)

5-5-1 概要

分子科学研究所は、名古屋大学、名古屋工業大学、豊田工業大学の愛知県内機関と連携して、文部科学省の先端研究施設共用イノベーション創出事業・ナノテクノロジーネットワークプロジェクトを受託し、中部地区ナノテク総合支援事業を展開している。中部地区にナノテクノロジー総合支援拠点を形成し、ナノ計測・分析（分子研・名工大）、超微細加工（名大・豊工大）、分子・物質合成（分子研）の3つの指定領域にわたって、超高磁場 NMR、先進電顕等の最先端機器利用、有機・生体関連分子等の設計合成評価、最先端設備技術を用いた半導体超微細加工等を総合的に支援している。特に、各要素単体の支援に留まらず、4機関の特徴を活かした連携融合支援を推進する予定である。

分子研では、分子スケールナノサイエンスセンターが母体となり、超高磁場 NMR、300kV 分析透過電子顕微鏡、時空間分解近接場光学顕微鏡、紫外磁気円二色性光電子顕微鏡などの先端機器利用や、有機・生体関連分子等の設計合成評価、大規模量子化学計算支援を実行している。今年度は協力研究 48 件、施設利用 29 件（1月26日現在）を採択し、うち協力研究 28 件、施設利用 18 件は実施した（来所予定確定分を含む）。所内利用も 40 件に上っている（1月16日現在）。

表 1 に分子科学研究所が担当する支援要素の一覧、表 2 に平成 20 年度採択課題一覧を示す。支援は、担当研究者と共に研究を進めてゆく協力研究と、装置に関する十分な知識と経験を有する研究者が随時の申し込みによって当該装置を利用する施設利用の何れかの申し込みを通して行われる。課題申請等の詳細は <http://nanoims.ims.ac.jp/> にあり、本務の共同利用と同様に、通常申請（年 2 回）と随時申請がある。申請は分子スケールナノサイエンスセンター運営委員会の下部組織であるナノネット小委員会で審査される。本務の共同利用と異なり、本事業では産業界からの申請も無償（ただし結果の公開が義務付けられる）で幅広く受け付けている。

表 1 支援装置・プログラム一覧（分子科学研究所担当分）

支援装置・プログラム	装置・プログラムの概要	支援責任者	所属
近接場分光イメージング支援（SNOM）	新規光物性、コヒーレント光制御、超高速センサー、光加工・メモリ、エネルギー情報伝達、ナノデバイス等に向けたフェムト秒時間分解近接場顕微鏡支援。空間分解能 50 nm、励起光 Ti:sapphire (780-920 nm 100 fs) または各種 CW。透過、ラマン、非線形に対応。超高速分光を兼備した世界的に類のないオリジナル機器。	岡本裕巳教授	光分子科学研究領域
波長可変ピコ秒時間分解ラマン分光支援	フォトリック有機ナノデバイスなどの物性評価のためのピコ秒時間分解波長広域連続可変ラマン分光システム。195 nm から 11 μm まで連続波長可変、4 ps、3 mJ 以上、1000 Hz。	西 信之教授	物質分子科学研究領域
高分解能透過分析電子顕微鏡支援（TEM）	ナノ粒子などの構造および電子状態解析のための電界放出型エネルギーフィルター高分解能透過電子顕微鏡。JEOLJEM-3200、粒子像分解能 0.17 nm、格子像分解能 0.10 nm。走査像観察、nm 領域の元素分析、液体窒素冷却も可能。主に施設利用に対応。	西 信之教授	物質分子科学研究領域

磁気光学表面ナノ磁性評価支援	新規磁性材料・ナノ磁性体の磁気特性観測を目的とした紫外磁気円二色性光電子顕微鏡 (UV MCD PEEM) と超伝導磁石 X 線磁気円二色性 (XMCD) 計測支援。UV MCD PEEM は当グループ発見に基づく全く独創的な機器。空間分解能 50 nm, 超高速時間分解計測にも対応予定。超伝導 XMCD は UVSOR 利用, 7 T, 2 K。他に超高真空磁気光学 Kerr 効果測定装置(0.3 T, 100 K) も提供。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡支援(SEM/ FIB)	集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡を提供。主に施設利用に対応。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
X 線光電子分光支援 (ESCA)	汎用の X 線光電子分光器 (Al, Mg- K α 線利用) を提供。施設利用として気軽に利用いただける。	横山利彦教授	物質分子科学研究領域
有機半導体デバイス・評価支援	有機半導体を用いたデバイスや有機太陽電池の作製・評価を支援。結晶析出昇華精製装置, 真空蒸着装置によるデバイス作製, 擬似太陽光源を用いた太陽電池特性評価, SPM, XPS/UPS, SEM, ミクロトーム等による有機半導体薄膜のナノ空間・電子構造の評価が可能。	平本昌宏教授	分子スケールナノサイエンスセンター
ナノバイオ素子機能形態解析支援 (生体 TEM)	有機材料・ナノバイオ素子等の形態と機能を解析するための高分解能透過電子顕微鏡 in situ 観察支援。独創的で世界的にも例のない位相差法を備えた生体関連物質に特化した透過電子顕微鏡。電子顕微鏡元素イメージング法も併用可能。	永山國昭教授	生理研
超高磁場 NMR ナノ計測支援	920MHz NMR による難結晶蛋白, 固体ナノ触媒, 有機・無機複合コンポジット, カーボンナノチューブ, 巨大天然分子などの精密構造解析支援。現状世界最高性能の 920MHz NMR。固体, 多次元, 3 重共鳴にも対応。	魚住泰広教授	生体・錯体分子科学研究領域
分子電子素子のための素子作成と電気・光特性計測支援	自己組織化を利用した 10nm 級のナノギャップ電極作成とその電気特性の計測, 点接触電流画像原子間力顕微鏡によるナノ構造体の電流特性空間分布の計測, 定フォトン照射装置を利用した素子の光特性の計測。GPC 分取システム, マグネトロンスパッター, 定フォトン照射装置, 金属顕微鏡, 極低温真空ブローパー, 点接触電流イメージング原子間力顕微鏡, 全自動分子合成装置など。	小川琢治教授	分子スケールナノサイエンスセンター
大規模量子化学計算支援	ナノ分子系の構造・電子状態・機能の研究およびこれらの設計と合成の高効率化のための高精度大規模量子化学計算シミュレーション。クラスター PC。	永瀬 茂教授	理論・計算分子科学研究領域
機能性有機ナノ材料設計支援	機能性有機ナノ材料, 金属半導体クラスター, 生体系を規範とした有機ソフトナノ分子などの合成経路探索設計。横山教授, 鈴木・永田・櫻井准教授が各専門分野の分子物質に対応。	鈴木敏泰准教授 永田 央准教授 櫻井英博准教授	分子スケールナノサイエンスセンター

5-5-2 2008 年度採択課題一覧（分子科学研究所担当分）

(1) 協力研究

課 題 名（前期）	支援装置	代 表 者
高分解能電子顕微鏡による炭素系超潤滑物質の構造の解明	TEM	愛知教育大学教育学部 三浦 浩治
ポルフィリンオリゴマーの立体構造と電子状態の解明	有機材料	愛媛大学総合科学研究支援センター 宇野 英満
静電的相互作用を用いた異種金属ナノワイヤーの電気特性	分子素子	北里大学理学部 堀 顕子
SiC(000-1) 表面分解カーボンナノチューブ生成における雰囲気ガス効果の研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
ガスソース法によるカーボンナノチューブ成長と触媒粒子状態との関係	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
刺激応答性星型ポリマーを用いた金属ナノ粒子の創製	有機材料	大阪大学大学院理学研究科 青島 貞人
ナノサイズ分子キャビティを活用した活性化学種の反応性制御	量子計算	東京工業大学大学院理工学研究科 後藤 敬
有機分子保護金属ナノクラスターの分子設計および機能発現	量子計算	近畿大学理工学部 藤原 尚
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 栗本 英治
高周期 14 続元素を骨格に有する特異な芳香族系の構築とその電子状態及び物性の解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
単層カーボンナノチューブの選択的化学反应系の構築	量子計算	東京学芸大学教育学部 前田 優
カルベン付加反応を用いた金属内包フラレンの化学修飾	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター 赤阪 健
金属内包フラレンと有機ドナー分子に基づく可逆電子移動系の構築	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター 土屋 敬広
海洋生物由来の生物活性ナノ有機分子の構造解析	NMR	北海道大学大学院薬学研究科 小林 淳一
金属ナノ微粒子配列における局在光物性とラマン散乱	SNOM	防衛大学校応用物理学科 北島 正弘
複合糖質の超高磁場 NMR 装置による構造解析	NMR	独立行政法人理化学研究所 山口 芳樹
光合成での光電変換機能をもつアンテナ系タンパク質色素複合体の組織化と機能評価	分子素子	名古屋工業大学大学院工学研究科 南後 守
リコンビナントプリオン蛋白質のアミロイド線維の構造解析	NMR	岐阜大学人獣感染防御研究センター 桑田 一夫
超高磁場 NMR を用いたラセン高分子の動的構造解析	NMR	北海道大学大学院工学研究科 平沖 敏文
空気酸化金属ナノクラスター触媒の創製と構造解析	TEM	北海道大学触媒化学研究センター 佃 達哉
半導体微粒子の合成と評価	分子素子	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃
高密度金属ナノ粒子内包ナノ材料を利用する新規高効率触媒の開発	有機材料	大阪大学大学院工学研究科 関 修平
有機薄膜太陽電池の研究	有機半導体	立命館大学理工学部 服藤 憲司
超分子集合体の透過電子顕微鏡観察	TEM	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いた自己集合体錯体の構造解析	NMR	東京大学大学院工学系研究科 佐藤 宗太
超高磁場 NMR を利用した多糖 / 高分子複合体の構造解析	NMR	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
課 題 名（後期）	支援装置	代 表 者
高密度金属ナノ粒子内包ナノ材料を利用する新規高効率触媒の開発	有機材料	大阪大学大学院工学研究科 関 修平
ポルフィリンオリゴマーの立体構造と電子状態の解明	有機材料	愛媛大学総合科学研究支援センター 宇野 英満
高周期典型元素を骨格に有する特異な電子系の構築とその電子状態及び物性の解明	量子計算	埼玉大学大学院理工学研究科 斎藤 雅一
近接場分光イメージング装置による立体規則性ポリ(3_アルキルチオフェン)ナノファイバーの顕微分光学的研究	SNOM	埼玉大学大学院理工学研究科 坂本 章
刺激応答性星型ポリマーを用いた金属ナノ微粒子の創製	有機材料	大阪大学大学院理学研究科 青島 貞人
SiC 表面の水素処理効果と表面分解カーボンナノチューブ生成への影響に関する研究	ESCA	名城大学理工学部 丸山 隆浩
カーボンナノチューブ低温成長および窒素ドーピングに関する研究	TEM	名城大学理工学部 丸山 隆浩
金属ナノ微粒子低次元配列における局在光物性と局所配列構造の相関解明	SNOM	立教大学理学部 島田 透
920MHz 超高磁場 NMR によるアミロイド ペプチドの重合開始機構の構造生物学的基盤の解明	NMR	国立長寿医療センター研究所 柳澤 勝彦
高分解能電子顕微鏡による炭素系超潤滑物質の構造の解明	TEM	愛知教育大学教育学部 三浦 浩治
920MHz 超高磁場 NMR 装置を用いたタンパク質複合体の構造解析	NMR	名古屋市立大学大学院薬学研究科 栗本 英治
超高磁場 NMR を利用した多糖 / 高分子複合体の構造解析	NMR	京都府立大学大学院生命環境科学研究科 沼田 宗典
複合糖質の超高磁場 NMR 装置による構造解析	NMR	(独)理化学研究所 山口 芳樹
有機薄膜太陽電池の研究	有機半導体	立命館大学理工学部 服藤 憲司
Si(111) 上の MnSi ナノ薄膜の磁性評価	磁気光学	九州大学総合理工学研究院 栃原 浩
高周期元素の特性を活かした新規ナノスケール分子の開発	SNOM	京都大学化学研究所 時任 宣博
半導体微粒子の合成と評価	分子素子	名古屋大学大学院工学研究科 小澤 寛晃

半導体微粒子の合成と評価	有機材料	名古屋大学大学院工学研究科	小澤 寛晃
Missing metallofullerene の抽出と構造	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター	赤阪 健
金属内包フラーレンと有機ドナー分子に基づく可逆電子移動の機構解明	量子計算	筑波大学先端学際領域研究センター	土屋 敬広
ナノサイズ分子キャビティを活用した活性化学種の反応性制御	量子計算	東京工業大学大学院理工学研究科	後藤 敬
単層カーボンナノチューブの有機溶媒への分散と電気特性の評価	量子計算	東京学芸大学教育学部	前田 優

(2) 施設利用

課 題 名 (前期)	支援装置	代 表 者
固体 NMR によるゴムの加硫機構解明, 劣化メカニズム解明	NMR	住友ゴム工業(株)研究開発本部 小林 将俊
フッ化物を用いた光学素子開発に関する研究	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 小野 晋吾
実装不良発生メカニズムの解明および対策技術の確立	SEM/FIB	ソニーイーエムシーエス(株) 浅井 正 幸田テック
様々な金属のナノ構造制御	SEM/FIB	大阪大学大学院理学研究科 小川 琢治
電気化学的プロセスにおけるフタロシアニン類縁体薄膜の表面分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	岡崎統合バイオサイエンスセンター 永山 國昭
非環状型 共役系素子を基盤とした超分子集合体の形成	SEM/FIB	立命館大学総合理工学院 前田 大光
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	テラベース(株) 新田 浩二
ゼオライト触媒の 1 次元 ²⁷ Al NMR, および ²⁷ Al MQMAS 測定	NMR	旭化成(株)基盤技術研究所 橋本 康博
光電子分光法による有機半導体デバイス表面および界面の評価	有機半導体	名古屋工業大学工学研究科 林 靖彦
有機太陽電池の作製と評価技術の習得と新有機薄膜太陽電池への展開	有機半導体	(株)クラレ新事業開発本部くらしき研究所 藤田 明士
課 題 名 (後期)	支援装置	代 表 者
固体 NMR によるゴムの加硫機構解明, 劣化メカニズム解明	NMR	住友ゴム工業(株)研究開発本部 小林 将俊
非環状型 共役系素子を基盤とした超分子集合体の形成	SEM/FIB	立命館大学総合理工学院 前田 大光
超高磁場固体 NMR によるラセン高分子の動的構造解析	NMR	北海道大学大学院工学研究科 平沖 敏文
有機太陽電池の作製と評価技術の習得と新有機薄膜太陽電池への展開	有機半導体	(株)クラレ新事業開発本部くらしき研究所 藤田 明士
金属多点ラベル化オリゴヌクレオチドおよび一本鎖修飾 DNA-カーボンナノチューブの構造解析	TEM	岡崎統合バイオサイエンスセンター 永山 國昭
Pt 細線加工と観察	SEM/FIB	テラベース(株) 伊藤 俊幸
ナノ分子機械を用いた物質変換反応の制御	NMR	東北大学多元物質科学研究所 金原 数
実装不良発生メカニズムの解明および対策技術の確立	SEM/FIB	ソニーイーエムシーエス(株) 浅井 正 幸田テック
様々な金属のナノ構造制御	SEM/FIB	大阪大学大学院理学研究科 小川 琢治
コアシェル型金属クラスターの高分解能電子顕微鏡観測	TEM	東京理科大学理学部 根岸 雄一
ゼオライト触媒の 1 次元 ²⁷ Al NMR, および ²⁷ Al MQMAS 測定	NMR	旭化成(株)基盤技術研究所 橋本 康博
固体電気化学プロセスにおける有機半導体薄膜の表面分析	ESCA	名古屋大学大学院理学研究科 吉川 浩史
磁気記録用パターン媒体の研究	SEM/FIB	名古屋大学工学研究科 加藤 剛志
超高磁場 NMR によるポリ(オリゴメチレンシクロペンタン)の立体構造解析	NMR	東京工業大学資源化学研究所 竹内 大介
酸化物材料のナノ構造化によるセンシング機能・創成に関する研究	SEM/FIB	名古屋工業大学大学院工学研究科 市川 洋
金属含有シリコンナノワイヤーの構造解析	TEM	大阪大学基礎工学研究科 畠田 博一

5-6 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

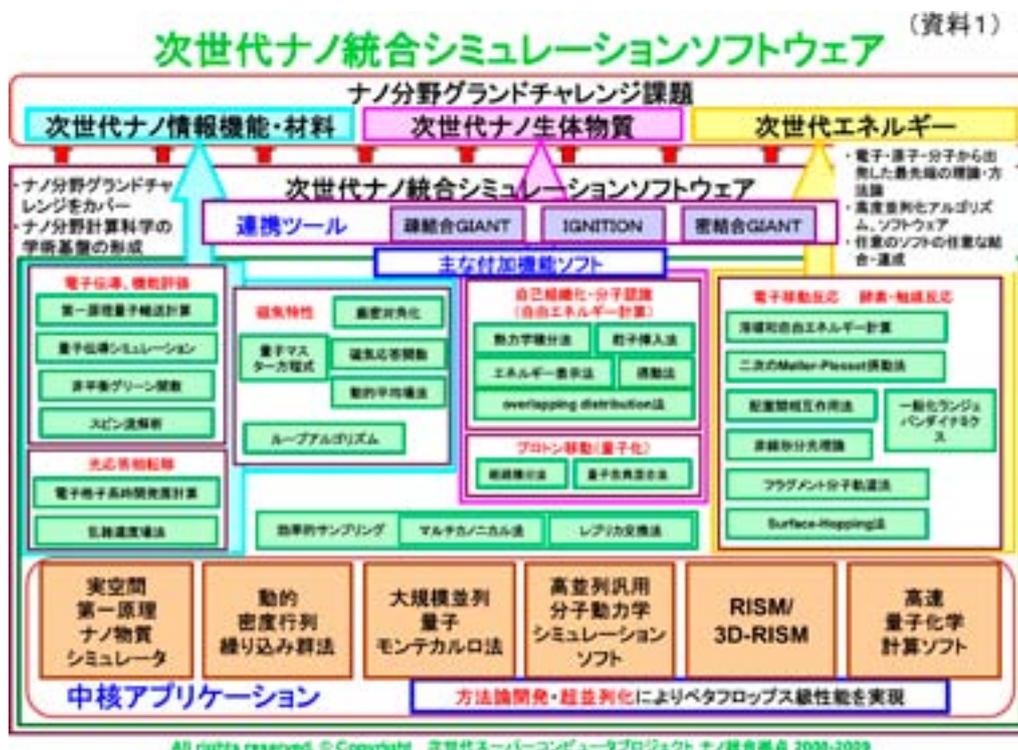
(文部科学省)

分子科学研究所は2006年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を推進している。我々は「次世代スパコン」プロジェクトの一環として、わが国の近未来の学術、産業、医療の発展に決定的なブレークスルーをもたらす可能性をもつ三つのグランドチャレンジ課題を設定し、その解決を目指して、理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。

- (1) 次世代ナノ情報機能・材料
- (2) 次世代ナノ生体物質
- (3) 次世代エネルギー

これらのグランドチャレンジ課題はいずれも従来の物理・化学の理論・方法論の「枠組み」あるいは「守備範囲」をはるかに超えた問題を含んでおり、ただ、単に計算機の性能が飛躍的に向上すれば解決するという種類の問題ではなく、物理・化学における新しい理論・方法論の創出を要求している。さらに、構築が予定されている「次世代マシン」は従来の常識をはるかに超えるノード数からなる超パラレルプロセッサであり、プログラムの高並列化を始めとする「計算機科学」上のイノベーションをも要求している。

上記の三つのグランドチャレンジ課題を解決するために「ナノ統合拠点」は必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。(資料1)



その中で、「ハードナノ」および「ソフトナノ」分野における基本的な理論・方法論に関わる6本のアプリケーションを「中核アプリ」として設定し、その「高度化」を行うとともに、それらを統合して実行するためのツール群を含

む「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の開発を進めてきた。

2008年度はプロジェクトの中間年度にあたり、文部科学省に設置された「外部評価委員会(委員長:魚崎浩平先生)」による中間評価を受けるとともに、評価委員会で指摘されたいくつかの課題を解決する取り組みを行ってきた。

中間評価の結果とその後の取り組み

外部評価委員会によるヒアリングは2008年2月と5月の2回に渡って行なわれ、グランドチャレンジ課題の設定と、中核アプリの高度化に関する取り組みなどプロジェクトの骨格部分に関しては、下記のような高い評価をいただいた。

「本プロジェクトにおいては、次世代スパコンにおける計算機能力の飛躍的向上を最大限活用し、計算科学を質的に発展させ、ナノサイエンスのルネッサンスを先導する意義深いプロジェクトである。ナノサイエンスのブレークスルーを通して我が国の国際競争力を強化する正しく時代に適切なものであり、オールジャパン体制で取り組むべき重要な課題である。このプロジェクトを契機として、実験と理論に次ぐ第三の研究の方法論としてのシミュレーションをはじめとする計算科学をしっかりと確立して行くことが強く期待される。研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。今後とも、分子科学研究所を拠点とした推進体制の下、実験研究者や産業との連携を強化するという観点から委員会体制等の一部改善を図りつつ、また若手育成に注力しながらより一層強力に推進していくことが妥当である。」

一方、プロジェクトの広報活動(「シンボリック」な課題設定など)、全日本的(All Japan)な取組みの強化について課題を指摘された。

「外部評価」報告およびその後の「ナノ統合拠点」運営委員会での議論を踏まえて、これまでの研究開発を実際の成果に結実させるために拠点に課せられた要請は次の3点にまとめられる。ひとつは「中核アプリ」を中心に主要な「付加機能ソフト」およびそれらの「連携技術」を含めて我々がこれまで開発してきたプログラムを実際に「次世代スパコン」で性能を引き出すところまで「高度化」を進めること。第二の要請はこれまで開発してきた方法論およびプログラムが実験研究や企業研究の現場で有効であることを実証すること。また、この取り組みを通じて、実験家、企業研究者を含むさらに全日本的な開発体制を構築する。第三の要請はこれまで開発したプログラムを「ナノ統合シミュレーションソフトウェア」に結実させ、できるだけ広汎に利用していただくための「枠組み」を整備していくことである。

まず、プログラムの超高並列化については、現在、「中核アプリ高度化ワーキンググループ(主査:岡崎教授)」を中心に作業を進めており、いくつかの中核アプリに関して、「ペタフロップス」級の性能が、実際に、期待できる状況になっている。この作業過程で重要な教訓が生まれている。(資料2)それはこのような可能性が物理・化学分野における計算科学者と情報科学分野の研究者(計算機科学者)との共同研究によって作り出されたことである。その具体例のひとつは、実空間密度汎関数(HP-RSDFT)であり、他のひとつは3D-RISMのプログラムである。いずれも筑波大学の計算センター(センター長:佐藤教授)との共同で進めているが、特に、3D-RISMについてはこのプログラムで多用する3D-FFTの並列化が難しいことから、プロジェクト当初、理研開発チームから「高並列化は不可能」とレッテルを貼られたプログラムであり、このプログラムの高並列化の目処が出たことは「計算科学者」と「計算機科学者」との連携が極めて有効であることを示している。この教訓を活かして、並列化が困難といわれてきたもうひとつの中核アプリである「分子軌道法」関連プログラムの高並列化(巨大行列の対角化を含む)が期待されている。

中核アプリ高度化

(資料2)

中核アプリ名	責任者	開発内容
真空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山	(1) MPIによる、実空間セル並列とノード並列の多層並列の有効性の検討と、対応プログラム開発。 (2) Open MPによるノード内スレッド間並列の有効性検討。
動的密度緩和込み群法	遠山	(1)線形応答感受率プログラムチューニング (2)その他・最適化
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂	アプリケーションの逐次処理部、ループ認識処理部の並列化効率の改善
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylas	岡崎	(1)単体性演算部のチューニング ・条件分岐の除去、・配列データの並び替え、・演算量の削減 (2)高並列化のチューニング ・通信量の削減、・3次元隣接通信の採用
RISM/3D-RISM	平田	(1)3次元FFTの2次元分割対応3D-RISMコード開発 (実装位置グループとの共同開発) (2)細部のチューニング(メモリ分散、IOの見直しなど) (3)IT2Kによる大規模スパコンでの運用テスト
高速量子化学計算ソフト	永瀬 北清	(1)データ転送量の削減 ・電子密度行列の転送量を削減するための改良 ・T2Kによる性能測定 (2)細部のチューニング
中核アプリの大規模並列化支援	佐藤	中核アプリ6本に対し、並列性および性能の詳細な解析を行い、必要に応じてモデルや数値計算アルゴリズムの改善などの支援。具体的には既存の大規模システムでプログラムを実行し、定量的な評価とアルゴリズムの検討・改善の支援を進める。なお、具体的なプログラムへの変更については担当のメーカと打ち合わせをしつつ進める。また、同時にマルチコアプロセッサの利用等の次世代スパコン利用に必要な並列化の方法についても検討する。

All rights reserved. © Copyright 次世代開発環境(IT2K)コアプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

上に述べた第二の要請は、「ナノサイエンス」分野の実験研究者および企業研究者との共同研究の推進であるが、これは本プロジェクトで開発したプログラムの有効性を実証する「実証研究」として位置づけられる。我々のプロジェクトの第一義的なミッションはナノ分野のグランドチャレンジ課題の解決に向けて理論・方法論を開発し、「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するようなプログラムを開発することにあるが、それは現在「ナノ分野」の実験研究者や生産の現場にいる企業研究者が抱えている課題と無関係ではない。むしろそれらの問題を解決する努力の過程で方法論が鍛えられ、新しい「計算科学」が生み出されてくる可能性が高まると考えられる。この面でもすでにいくつかの先駆的な取り組みが行われているが、「ナノ統合拠点」では文部科学省「ナノテクノロジー・材料開発推進室」との連携の下に、より系統的な取り組みを進めつつある。すなわち、文科省「ナノテクノロジー・材料委員会」を中心として実験研究者、企業研究者、およびナノ統合拠点で活動している計算科学者が研究テーマ毎に小規模の「連続研究会」を開催し、計算科学者と実験研究者の共同研究を育てていくという取り組みである。これは「ナノ統合拠点」で開発された計算科学の方法論が実際の実験研究や企業で有効であることを示すだけでなく、「次世代スパコン」に対する必要性和モチベーションを社会に喚起する上でも極めて重要な取り組みであると考えている。(資料3)

本プロジェクトの目的を成功裏に達成するための三つ目の要請は「ナノ統合拠点」で開発したソフトウェアを社会に還元し、アカデミズムの研究はもとより、「もの造り」や医療の現場に如何に有効に活用していくかという問題である。自明のことであるが本プロジェクトは「科研費」とは異なり、国家から委託を受けたプロジェクトである。「科研費」の場合、助成を受けた研究者は自らが提案した研究を遂行し、その成果を論文として公表することにより、その責任を果すことになる。一方、我々のプロジェクトはナノ分野の「アプリケーション」を開発することが重要なミッションのひとつであり、それを「公開」して初めてプロジェクトの目的を達成したことになる。もちろん、「プログラムの公開」といっても、それは必ずしも不特定多数のユーザーを対象にしたもの(例えば、GAUSSIANのような商業ソフト)であることを意味しない。化学や物理のバックグラウンドをもつ実験研究者や企業内の計算科学者などが

一定のトレーニングを受けて使えるレベルのプログラム「公開」を意味している。しかしながら、公開のレベルをこのように限定しても、非常に困難な問題が残されている。それは「知的財産権」や「著作権」が関わる問題である。「ナノ統合拠点」で開発しているプログラムは本プロジェクト内で開発されたものだけでなく、その多くは過去に多数の研究者（学生を含む）や大学・機関が関与したものであり、その「著作権」や「知財権」が極めて複雑な状況にある。「ナノ統合拠点」では、現在、この分野を専門に活躍されている辻巻弁護士の指導の下に、合理的な「公開」の方策を検討しているところである。

連続研究会(1/2)

(資料3-1)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
1	2008年11月 21日(金) 13:30~	東京・秋葉原コンベンションセンター	薄電子を用いた 半導体材料の評価	石橋 幸司教授(グループ長(産総研)) 上殿 朝良准教授(筑波大)
2	2008年12月 10日(水) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	光電結合-ナノクラスター (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 飯定 高幸准教授(分子研) 中嶋 清人准教授(東大)
3	2008年12月 12日(金) 10:30~	仙台・東北大学金属材料研究所	新しい概念に基づく(新)電材料とその物性	小椋八重 純氏(産研CMRG) 遠山 貴巳教授(京大基礎) 野川 誠通教授(東北大学研)
4	2008年12月 27日(土)~28日(日) 16:00~	熊本・グリーンピア南阿蘇	抗がん剤を使わない癌治療法:ハイブリッドリボソーム	平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 上野 隆一教授(筑波大)
5	2008年1月 8日(火) 13:00~	東京・東京大学本郷キャンパス	ウイルスの分子科学	岡崎 道教授(名大) 北尾 彰郎准教授(東大) 野本 明秀教授(東大) 青坂 文雄准教授(京工大)
6	2008年1月 29日(木) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	超分子、分子素子、分子発光・バイオマス (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 中野 謙教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 江原 正博教授(分子研)
7	2008年1月 29日(木) 9:00~	東京・東京女子医科大学阿田町キャンパス	DOOナノキャリアー (脂質膜、タンパク質複合体、高分子ミセルを中心として)	岡崎 道教授(名大) 松林 伸幸准教授(京大)
8	2008年1月 30日(金) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学	山下 晃一教授(東大) 中井 浩巳教授(早大) 中野 豊由教授(京大)

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

連続研究会(2/2)

(資料3-2)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
9	2008年2月 10日(火) 13:30~	京都・ホテル法華クラブ京都	膜、ミセル (ソフト凝縮系の分子科学)	松林 伸幸准教授(京大) 岡崎 道教授(名大)
10	2008年2月 16日(月) 13:00~ 17日(火)	岡崎・自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	タンパク質機能(イオンチャネル)	平田 文男教授(分子研) 老本 成昭教授(福井大)
11	2008年3月 9日(月) 13:30~	北海道大学・理学部6号館低層棟1階 6-103室	燃料電池 -物性科学WGとの合同開催	高橋 志明氏(豊田中研) 平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 山下 晃一教授(東大)
12	2008年3月 13日(金) 13:20~ 14日(土)	三重・湯の山「希望荘」2F会議室・稲 倉車	エタノール製造、 バイオマス(酵素反応)	平田 文男教授(分子研) 高田 修一准教授(三重大)
13	2008年3月 18日(水) 10:30~	東京・キャンパスイノベーションセン ター東京 3F 309教室	TDOFT: 光応答計算の基礎、応用と展開	矢野 一浩教授(筑波大) 青森 康成氏(住友化学)
14	2008年3月 30日(月)	東京・東京医科歯科大学 共同研究 棟2階セミナールーム	タンパク質機能(フォールディング)	岡本 祐幸教授(名大) 平田 文男教授(分子研)
	(調整中)		表面ナノ構造の自己形成	実行 真司教授(東大) 小森 文夫教授(物性研)
	(調整中)		ナノ構造体の電気伝導	小林 伸幸准教授(筑波大) 広瀬 賢二氏(MEC)

問合せ先 米沢東夫 0564-55-7464

<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

5-7 最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム (文部科学省)

文部科学省は、平成 20 年度より新たな拠点形成事業として、「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」(以下、光拠点事業)を開始した。本事業は「ナノテクノロジー・材料、ライフサイエンス等の重点科学技術分野を先導し、イノベーション創出に不可欠なキーテクノロジーである光科学技術の中で、特に、今後求められる新たな発想による最先端の光源や計測手法等の研究開発を進めると同時に、このような最先端の研究開発の実施やその利用を行い得る若手人材等の育成を図ることを目的として(文科省ホームページより抜粋：http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808.htm)」実施される。具体的には、光科学や光技術開発を推進する複数の研究機関が相補的に連結されたネットワーク研究拠点を構築し、この拠点を中心にして(1)光源・計測法の開発;(2)若手人材育成;(3)ユーザー研究者の開拓・養成を3本柱とする事業を展開する。

この光拠点事業の公募に対して、分子科学研究所は、大阪大学、京都大学、独立行政法人日本原子力研究開発機構とともに、「融合光新創生ネットワーク」と題したネットワーク拠点を申請し、採択された(http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/20/07/08072808/003.htm)。今後、この拠点を舞台に、世界の光科学を牽引する多くの素晴らしい研究成果や人材が生み出されるものと期待される。なお、この他にもう1件、東京大学、理化学研究所、電気通信大学、慶応義塾大学、東京工業大学によって構成される「先端光量子アライアンス」と題されたネットワーク拠点が採択されており、これら二つの異なる拠点間の交流による新たな展開も楽しみである。

今年度の分子科学研究所における活動内容を以下にまとめる。

(1) 光源要素技術の開発

マイクロドメイン制御に基づく超小型高輝度高品位レーザーの開発、およびこれを励起源とする極短パルス光源の要素技術開発に着手した。サブ mJ 級の数サイクル 2.1 ミクロン光の発生を目指し、これに必要な大口径・高アスペクト比を備えた非線形光学デバイス、特に PPMgLN の基礎検討を行った。

(2) 供用技術の開発

超高精度量子制御技術では、分子内の振動波束干渉の時空間模様をピコメートル精度で多彩にデザインする技術を確立した。また、分子の回転運動を実験室系で右回りあるいは左回りに選択制御することに成功した。さらに、サブ 10 フェムト秒幅の極短高強度レーザーパルスによる芳香族分子の段階的なクーロン爆発の様子を明らかにした。時空間分解顕微分光では、20 フェムト秒の時間分解能を実現する為の基礎技術を開発した。また、本ネットワークにおける供用研究の推進に寄与する各種研究会の開催については、「擬似位相整合非線形光学波長変換の現状と展望」をテーマにした研究会を、平成 20 年 11 月 20 日に分子科学研究所にて開催した。

(3) 人材育成体制の強化

他の参加機関との議論を通じて、次年度以降の教員や学生の具体的な交流方法を検討した。

5-8 光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発

「量子ビーム基盤技術開発プログラム」(文部科学省)

量子ビーム技術は、ビーム発生・制御技術の高度化に伴って近年大きく発展してきており、基礎から応用に至るまでの幅広い分野で活用されてきている。量子ビームの研究開発を戦略的・積極的に推進するとともに、次世代の量子ビーム技術を担う若手研究者の育成を図ることを目的として、今年度より「量子ビーム基盤技術開発プログラム」が開始された。本事業では、基盤技術としての量子ビーム技術の発展と普及に資するべく、汎用性・革新性と応用性が広い研究テーマについて、ネットワーク研究体制を構築しながら研究開発を行うことを目的としている。

本研究所からは、極端紫外光研究施設を利用した「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」という課題名で提案を行い、採択された。本研究所を中核とし、名古屋大学、京都大学の参画を得て、5年計画で実施する。UVSOR-II 電子蓄積リングの改造、ビームラインの建設などを含む計画であり、レーザーを用いることで特色あるシンクロトロン光を作り出し、その利用法の開拓を行おうとしている。

5-9 若手研究者交流支援事業～東アジア首脳会議参加国からの招へい～ (日本学術振興会)

5-9-1 全体趣旨

本事業は、安倍晋三内閣が第2回東アジア首脳会議(2007)の時に提唱した、EAS参加国から今後5年間、毎年6,000人程度の青少年を日本に招へいする交流計画(JENESYSプログラム)に基づいたJSPSの事業である。次世代を担う若手研究者の計画的な交流により、アジアを中心とした国々との研究者間のネットワークの形成・強化、当該地域における高度人材育成及び科学技術コミュニティの形成等が期待される。対象国はASEAN加盟国(インドネシア、カンボジア、シンガポール、タイ、フィリピン、ブルネイ、ベトナム、マレーシア、ミャンマー、ラオス)であるが、全体の30%以内であれば、オーストラリア、ニュージーランド、インドを含めることが可能である。今年度は8件が採択され、そのうち化学分野は、分子研の主催する下記プロジェクト1件であった。

5-9-2 分子研主催プロジェクト課題について

プロジェクト課題名は「『環境・エネルギー』基礎研究基盤の確立」である。

現代自然科学が解決すべき問題のひとつである環境・エネルギー問題において、東アジア諸国における自国での研究開発を可能にするための基礎研究基盤の確立は極めて重要である。本交流事業においては、環境・エネルギー問題に関わる基礎科学に関して、主として学位取得前後の若手研究者を広く招へいし、また本交流事業後のフォローアップとしての共同研究体制を確立し、自国における基礎研究の継続を力強くサポートすることで、基礎科学の定着を推進することを目的とする。

分子科学研究所は、国際交流の重要性に鑑み、かねてより様々なチャネルを通じて国際共同研究、研究支援、教育事業を推進してきた。本交流事業は、教育事業に特化した「アジア冬の学校」を研究者養成事業へと発展し、最終的には、既に基盤研究機関が充実している極東アジア諸国間で形成している研究教育拠点ネットワークを東アジア諸国へ伸展させる、橋渡しの事業となることが期待される。

5-9-3 実施状況

13研究室(うち分子研10, 所外3)を受入研究室として指定し、公募を原則とした募集を行った。各候補者に対し、research proposal および帰国後のfuture planの提出を求め、その妥当性や将来性等に関して審査することにより決定した。

実際の募集は、

- (1) 受入教員の直接推薦
- (2) 指定交流相手機関からの推薦(学内公募を原則)
- (3) ホームページを利用した公募

の順で行った。指定交流相手機関は以下の通りである：チュラロンコーン大学(タイ)、マラヤ大学(マレーシア)南洋工科大学、シンガポール国立大学(シンガポール)ベトナム科学技術アカデミー(ベトナム)、インド国立化学技術大学(インド)。

その結果、直接推薦より3名、指定交流機関からの推薦5名、公募3名、計11名と、比較的バランスのとれた採択となった。実際の志望者は指定交流期間内公募を含めて、把握しているだけで数十名にも及んでおり、本プロジェクトに対する大きな関心が伺いしれる。国別ではインドネシア1名、シンガポール1名、タイ5名、ベトナム2名、

インド2名と、若干今回はタイに偏った結果となった。その理由は、タイ国内において積極的に本事業に対して周知がされたのも一因であるが、本事業の原則として研究者の国籍で採否が決まるため、シンガポール国内の大学で学ぶ多くの中国国籍などの対象外地域の研究者が採択できなかった影響も大きい。またキャリアの内訳は、博士研究員7名、博士課程学生4名となった。

実際の招へいは2009年1月末より順次行われており、各研究者に応じて、30～60日の期間での研究プログラムが組まれた。本執筆段階ではまだその成果については明らかではないものの、帰国後の研究計画についても最終報告において提出を求めており、将来の広くアジア圏全体への分子科学ネットワーク形成へ向けてのひとつのチャンネルとして機能していくことが期待される。