

## 8 . 研究施設の現状と将来計画

日本の学術研究行政は依然として憂うべき状況にあると考えられる。研究活動等の評価は当然行われなければならないが、現在の状況は、「評価疲れ」と言う言葉に表されている通り行き過ぎた状態であり、今後の改善が強く望まれる。

昨年度報告したとおり、平成 19 年度から分子研の組織は大幅に改編され、研究系と施設を大きく 4 研究領域にまとめた。それぞれの領域内の連携が深まったものと思っている。また、各施設は、大学共同利用機関の施設として分野コミュニティに対して極めて大事な役割を担っており、そのあり方について常に議論がなされている。各施設の現状、改善の努力、及び、将来計画の議論等が本節にまとめられている。

詳細については各施設における議論を参照願いたい。常の問題となるのが設備の高度化、購入、拡充の必要性である。所内の研究者と技術職員による高度化と改良の努力、及び、予算の工面による共通設備の購入等を実施しているが、まだほんの一部に限られている。施設の拡充は、分子科学コミュニティの研究者が行う基盤的研究を支えると共に、最先端研究の遂行を支援するために欠くことの出来ないことである。研究者自身の努力と共に、国の学術研究支援強化が切望されることである。

序言で述べたが、国の「光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発」事業の一環として、平成 20 年度後半から「量子ビーム基盤技術開発プログラム」を極端紫外光研究施設が、また「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」を分子制御レーザー開発研究センターが責任を持って遂行している。しかも、前者のプログラムでは、両施設が緊密に協力することによって強力なコヒーレント放射光の開発が進められようとしている。

国の基幹事業として進められている「次世代スーパーコンピューター開発」に関して、分子研は、ナノサイエンスに係るアプリケーションソフト開発の中核的役割を果たしてきている。次世代スーパーコンピューター完成後に、これら開発されたソフトを基盤として分子スケールナノサイエンスを更に発展させるために、分子科学研究所が同分野の拠点となるべく、理論・計算分子科学研究コミュニティの方々と協力して検討が進められている。

(中村宏樹)

## 8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

UVSOR-II 光源加速器は 2003 年の高度化（低エミッタンス化，直線部増強）とそれに引き続くアンジュレータの整備などにより，1 GeV 以下の低エネルギー放射光リングとしては世界的にも最高レベルの輝度を誇る光源となった。トップアップ運転導入に向けての整備も順調に進み，2008 年 10 月より試験運転を開始している。今後さらに調整を進めて，トップアップ運転での定常的な共同利用の実現を目指している。

今後の施設の将来像については，

- (a) 既存施設の更なる高度化
- (b) 新しい施設の建設

の 2 つの方向で考える必要があると考えている。

まず，(a) については，蓄積リングで唯一手つかずの偏向電磁石をビーム収束作用を持つ複合機能型に交換することでさらにエミッタンスを 15 nm-rad 程度まで下げられる可能性がある。また，入射点を移動することで長さ 4 m の直線部を新たに創出できる可能性がある。特に後者については今年度から 5 年計画で始まった量子ビーム基盤技術開発プログラムの中で実現されることが既に決定している。このプログラムでは，新たに創出される直線部にアンジュレータ 2 台を直列に設置し，外部レーザーを用いたコヒーレント放射光など特長ある光を発生する技術の開発とその利用法の開拓を目標としている。専用ビームラインの建設も計画に盛り込まれている。このためにビームラインの移設や高度化も実施される予定である。この量子ビームプログラムを推進しつつ，以下で述べる新施設建設の可能性も探りながら，状況によって，偏向磁石の更新による低エミッタンス化を実施するのが現実的と思われる。

次に (b) については，

- i) 1.5–2.5 GeV 級新第 3 世代リング
- ii) 1 GeV 級超低エミッタンスリング
- iii) ライナックによる軟 X 線自由電子レーザー
- iv) 小型エネルギー回収型ライナック

など様々な可能性が考えられる。それぞれの検討を進めながら，他施設の動向なども考慮しつつ，計画を練ることになる。i) は比較的低エネルギーで汎用性の高い高輝度光源の実現を目指すものであり，SPring-8 では十分に対応しきれない VUV 軟 X 線領域での高輝度光源を実現することで，我が国では SPring-8 以外に真に第 3 世代光源と呼べる光源がない状況を打破しようとするものである。現施設の更新になるが，規模は大きくなるため，新たに土地が必要になる。また，日本全体として考える必要がある。ii) は光源性能をより重視し VUV 領域での超高輝度光源を実現しようとするものである。現施設の更新として現敷地内に収めることも可能であるが，一旦，更地にしてから建設する必要がある。iii) は高輝度ライナックによる軟 X 線領域でのシングルパス型自由電子レーザーの実現を目指すものである。リング型光源と相補的な光源となるので，現施設に併設することになる。収容場所を考える必要がある。iv) はリング型光源の限界を打ち破る光源性能を実現し，且つ，リング型光源の汎用性も有する施設の実現を目指すものである。超電導加速技術などの高度な加速器技術が必要となるため，今後の加速器技術開発の進捗を慎重に見守る必要がある。現施設の更新になるが，規模は大きくなるため，新たに土地が必要になる。

## 8-2 分子スケールナノサイエンスセンター

自然科学研究機構・分子科学研究所・分子スケールナノサイエンスセンター規則第2条に、ナノセンターの設置目的として「センターは、原子・分子レベルでの物質の構造及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な研究設備の管理を行い、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を目的とする」との記載がある。即ち、ナノセンターは「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な研究設備の管理と共同研究の推進」という機能が要求されていることになる。

平成19年度からは、分子研の組織改編に伴いこれまでのナノセンターの機能が（新）分子スケールナノサイエンスセンターと（新）機器センターに分かれることになった。ヘリウムや窒素の液化機・供給装置を含め汎用的な装置類およびそれらの装置の責任者であった技術職員は機器センターに所属替えとなった。センター長は、物質分子科学研究領域・電子構造研究部門の横山利彦教授が併任で務め務めている。ナノ分子科学研究部門の小川琢治教授が平成19年9月に大阪大学大学院理学研究科教授として転出（現在当センター兼任教授）、その後任として、平成20年4月に平本昌宏教授（前所属は大阪大学大学院理学研究科、准教授）が着任した。これ以外の専任教員は、鈴木敏泰准教授、永田央准教授、櫻井英博准教授の3名である。

共同研究支援に関しては、平成19年度から文部科学省のナノテクノロジー・ネットワークプロジェクト（5-5参照）を研究所として受託し、ナノセンターの業務としてこれを運営している。これを遂行するため、併任教員を配置した。ナノ計測研究部門には、横山利彦教授、西信之教授、岡本裕巳教授、永山國昭教授（岡崎統合バイオサイエンスセンター）、ナノ構造研究部門には、加藤晃一教授、永瀬茂教授が併任し、ナノネットプロジェクト業務を実施している。また、920 MHz NMRでのプローブ開発として、西村勝之准教授が併任している。ナノセンターが管理する共通機器は、920 MHz NMR、300kV分析透過電子顕微鏡、走査電子顕微鏡、集束イオンビーム加工機、クリーンルームがあり、クリーンルームを除いてはナノネットを通して共同利用（協力研究と施設利用）に供されている。ナノネットの内容及び成果に関しては5-5に記述する。

センター運営委員会は、センター長を委員長とし、専任併任教員・准教授全員、センター以外の教授・准教授若干名、外部委員からなる。20年度外部委員は、冨田博一大阪大学大学院基礎工学研究科教授、山口芳樹理化学研究所チームリーダー、馬場嘉信名古屋大学大学院工学研究科教授、隅山兼治名古屋工業大学大学院物質工学専攻教授、榊裕之豊田工業大学副学長（電子情報分野教授）であった。超高磁場NMRに関する現状と将来、ナノネットプロジェクトに関して評価や提言をいただいた。

超高磁場NMRは平成18年度まで実施されていたナノサイエンス支援において設置された。溶液から固体試料のナノ構造精密研究を実現する世界最高かつ唯一の装置である。本機の機能を縦横に活用して、タンパク（中でも膜タンパク糖タンパクのような難結晶性複合タンパク）、固体ナノ触媒、有機-無機複合コンポジット、CNT及びフラレン類縁体の精密構造研究、海洋性巨大天然分子などのナノサイズ分子構造体の高次構造や動的挙動の精密解析などに対して、ナノネットを通して共同利用に供されている。本年度は、新たに西村准教授が温度可変固体プローブの開発を進めることになった。また、平成20年4月に岡崎統合バイオサイエンスセンター教授として着任した加藤晃一教授を中心として、精力的に本装置を活用したタンパク質構造解析研究を遂行している。さらに、桑島邦博教授のグループもパワーユーザーとして加わり、所外共同利用を含めてますます充実した先端利用が期待できる。

昨年度の分子研レポートで短期的事業計画として掲げた目標のうち、温度可変プローブ開発は来年度中にも共同利用の実現が可能となった。また、ニュースレター・パンフレットの発行に関しては、まずアクティビティレポートの発行という形で行い、今後さらに検討する。

ナノネットにおける共同利用機器のうち、UVSOR-II を利用する超伝導磁石高磁場極低温 X 線磁気円二色性測定装置（電子構造研究部門所有）に関しては、利用者数が多くなったため、UVSOR-II BL4B のビームタイムのうち一定時間をナノセンターが利用し、その中で利用者支援を行うという体制を整えた。今後、機器をナノセンターに移管してさらに共同利用の利便性を高めるなどを検討する。

中期・長期的な事業展開として、第一に NMR 高度化をさらに推進する。このため、まずは予備測定を実施する 600MHz クラスの固体測定に対応できる中規模 NMR 装置の導入を実現する。920 MHz NMR を最大限有効に活用するには、同じ環境で作動する予備装置を利用できることが極めて重要である。また、現状では  $^1\text{H}$  と  $^{15}\text{N}$  の 2 核種しか測定できないので、核種の拡張を目的としてプローブを開発する。これらの高度化を実現するため、また、分子研 NMR をコアとした全国研究ネットワークを形成して、外部資金獲得を目指す。

### 8-3 分子制御レーザー開発研究センター

分子制御レーザー開発研究センターは、旧機器センターからの改組拡充によって平成9年4月に設立された。以降、平成18年度までの10年間、分子位相制御レーザー開発研究部、放射光同期レーザー開発研究部、特殊波長レーザー開発研究部の3研究部において所内課題研究及び調査研究を行う他、多数の共同利用機器、小型貸出機器を維持管理し、利用者の便に供してきた。各研究部には助教授及び助手が各1名配置され、またセンター共通の技術支援は技術課の3名の技術職員（うち二名は、後日機器センターに配置換え）が行ってきた。放射光同期レーザー開発研究部は猿倉助教授が担当し、分子研 UVSOR との同期実験に向けた基礎的レーザー光学技術の開発の他、大出力紫外パルスレーザーやコヒーレントテラヘルツ光源の開発などの成果を挙げたが、平成18年1月に大阪大学レーザー・エネルギー学研究中心の教授として転出した。特殊波長レーザー開発研究部は平等助教授が担当し、分子科学の新たな展開を可能とする波長の可変な特殊波長（特に赤外域）レーザーの開発の他、マイクロチップレーザー光源等の開発を行い、産業界からも注目される成果を挙げてきた。分子位相制御レーザー開発研究部は、分子制御のための時間的特性を制御したレーザーの開発と反応制御実験を目的として設置されたが、佐藤助教授が平成12年に転出した。

一方、平成18年度には分子研の研究系・施設の組織改編へ向けた議論が活発に行われたが、この中で、本センターのあり方に強く関連する事柄は以下の2点であった。第一に、レーザーや放射光を重要な研究手段とし、光と物質との相互作用に基づく分子科学を展開する研究領域として新たに光分子科学研究領域が設けられることになった。従来はこの研究領域の研究が、主に分子構造、電子構造、極端紫外光科学の各研究系と、極端紫外光研究施設と本センターとに別々に所属する研究グループによって行われてきた。しかし、この組織形態は、多くの共通した概念や方法論を基本とする研究グループを縦割りに分断し、研究者間の情報の共有や研究活動における日常の議論を阻害する要因となっていた。一方、レーザー光源を用いた研究グループは、17年度から始まった「エクストリーム・フォトニクス」のプログラムにより、既に当時、組織横断的なつながりを持つ機会が増えていた。そこで、この新研究領域を創設することにより、放射光関連の研究グループとの間の壁も取り払い、本研究所における光分子科学研究をさらに活性化することを目指したのである。第二の点は機器センターの設置であった。本研究所には以前、同センターが設置されていたが、その後、極低温センターと化学試料室と共に廃止され、本センターと分子物質開発研究センターが設置され、しかも後者は分子スケールナノサイエンスセンターへと改組された。しかし、共通機器を一括して管理運営し、所内外の研究者の共同利用を促進する必要が改めて認識され機器センターが再度設置されることとなった。このため、本センターが管理運営していた共通機器の大部分が機器センターに移管されることになった。この措置により、本センターは従来の共同利用に関する業務を大幅に圧縮することができ、その業務のほとんどを開発研究に移すことが可能となった。これら2点はどちらも本センターが分子研における光分子科学の開発研究の中心として活動するための環境を整えるものとなった。

このような背景を考慮すると、組織改編後の本センターは、光分子科学研究領域の研究グループと密接な連携をとりながら開発研究センターとしての機能を果たさねばならない。ただし、当該研究領域の研究グループと本センターの役割の違いははっきりと認識すべきである。すなわち、当該研究領域における個々の研究グループがそれぞれの興味のもとで光分子科学における研究分野を開拓しようとするのに対して、本センターの業務は、光源開発を含む光分子科学分野の将来像を大局的に展望したときに、今後世界をリードして行く上で重要になって来ると思われる方向の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究に重点がおかれるべきである。本センターが開発研究を本務とし、そこで得られた知識、技術、方法論を蓄積し、共同利用研のセンターとして開発された部品や装置および手法を所内外に提供・共同利用に供する点にこそ、当該研究領域における通常の研究活動と一線を画する違いが存在する。

ただし、これらの研究と開発研究の間を明瞭に区別することは困難な場合があり、これが渾然一体として研究がなされることもあり得る。このような状況を鑑みると、本センターと当該領域間の研究グループの相互乗り入れは不可欠である。したがって、新組織のもとでは開発要素のある研究を遂行する当該研究領域のグループが本センターに併任し、本センターのリソースをも使いながら開発研究をするなどの措置をとる必要がある。

このような理念のもとに、本センターは19年度より、光分子科学研究領域との連携のもとに、光分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行なう開発研究施設として生まれ変わった。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究を遂行するためのリソースとして提供することが好ましい。新センターは以下の3つの研究部門より成り立っている。

- (1) 先端レーザー開発研究部門；平等拓範（専任）、准教授1名（専任）、加藤政博（UVSORより併任）
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門；菱川明栄、大森賢治（以上、光分子科学研究領域より併任）
- (3) 極限精密光計測研究部門；岡本裕巳、大島康裕（以上、光分子科学研究領域より併任）、

松本吉泰（京都大学大学院理学研究科より兼任）

それぞれの部門の任務は、(1) テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発；(2) 主に高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発；(3) 高空間分解および高エネルギー分解分光法の開発などである。すなわち、レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコープ、マイクロスコープ、制御法に至る統合的な研究手法を開発することを目的としている。これらの分野での開発研究から他に類を見ない装置や方法論を開発し、本センターが分子科学研究所の一つの重要な柱として分子科学分野へ大きく寄与し、新たな共同利用の機会を創出していかねばならない。そのためには、現在、先端レーザー開発研究部門にしかない専任准教授のポストを、他の2部門にも設けることが強く望まれる。また、技術職員が積極的にこれらの研究開発に参加することによって、新たに開発された方法論をセンターに蓄積していくための原動力として活躍する事も重要である。その意味では、現在2名分しかない技術職員のポストが少なくとも部門数と等しい3名以上に増員されることが強く望まれる。一方、先端レーザー開発研究部門における加藤教授の参加は、レーザーセンターとUVSORとの連携による新しい研究分野の創出を目指すものであり、今後、益々先鋭化する先端レーザー光源を用いた観測制御技術と放射光を用いた研究との連携がさらに進められる。将来的には、レーザーセンターとUVSORを包括した、光分子科学研究センター（仮称）の設立も視野に入れ検討を重ねるべきであろう。この試みは、分子研の光科学分野における研究環境の個性を対外的にアピールする為にも必要であると考えられる。

## 8-4 機器センター

分子スケールナノサイエンスセンターと分子制御レーザー開発研究センターの汎用機器を統合して、平成19年4月より機器センターが新たに発足し、2年の歳月が経とうとしている。機器センターの役割は汎用機器の維持・管理・運用と所内外の施設利用者への技術支援である。機器センターでは化学分析機器、物性測定機器、分光計測機器、液体窒素・ヘリウム等の寒剤供給装置と、大別して4つ機器の維持・管理を行っている。また、いくつかの機器を化学系研究設備有効活用ネットワークに公開しつつ、この事業の実務的な側面を支援している。機器センターの業務を円滑に運営するために、センター長（兼任）のほかに8名の専任技術職員（化学分析機器2名、物性測定機器2名、分光計測機器1名、寒剤装置2名、化学系設備ネットワーク1名）と2名の非常勤事務職員（機器センター1名、化学系設備ネットワーク1名）を配置している。平成21年度からは分光計測機器担当の技術職員1名が新たに配置される予定になっている。技術職員が担当する機器は厳密に分担が分けられているわけではなく、化学系設備ネットワークの運用システムの支援にも参加し、分子スケールナノサイエンスセンターの保有する920 MHz NMRや高分解能電子顕微鏡の維持管理にも参加している。この2年間で機器センターの姿が整いつつあるが、平成20年度は新機器センター事務室の化学試料棟への設置、化学系設備ネットワーク予約課金システムの改善、新装置の導入、明大寺地区から山手地区への機器の移動、所内利用者への利用料の見直し、施設利用者向けの広報誌「機器センターたより」の発行などを行った。

### 8-4-1 設備

化学分析機器は山手地区にNMR、質量分析装置、元素分析装置、X線回折装置、円二色性分光装置など、物質合成を行う上で最低限なくてはならない装置が配置してある。このうち、円二色性分光装置は山手地区の利用者が多いため、平成20年度に明大寺地区から山手地区へ移設した。物性測定装置は明大寺地区にESR、SQUID磁束計、X線回折装置、熱分析装置など、新たに開発した物質の物性を評価する上で必須の汎用装置を配置している。分光計測装置は三種のパルスレーザーシステム、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置などの汎用機器を明大寺地区に配置している。蛍光分光装置は近赤外領域の蛍光を測定できるという特徴を持っているが、平成20年度は高感度光電子増倍管を導入して近赤外領域の蛍光感度を大幅に増強させた。

研究所の予算を長期的な視野に立って計画的に運用するために、汎用性の高い装置は特定の研究グループではなく機器センターに予算措置する。このことによって、機器の稼働率を高めるとともに、機器の最高性能を維持する。このような考えに基づいて平成20年度は中村宏樹所長よりいくつかの新しい汎用装置を購入するための予算が機器センターに投入された。山手地区には生体試料用世界最高感度の示差走査型カロリメータと等温滴定型カロリメータを設置した。平成21年度に所内公開し、平成22年度より所外にも公開する予定である。明大寺地区には蛍光X線分析装置を新たに設置し、平成21年度より所内・所外に公開することを予定している。また、マイクロ単結晶X線回折装置の試料冷却装置とESR（Bruker E500）用デュアルモード共振器を新たに導入し、実験環境の向上を図った。さらに、老朽化したパルスレーザーシステムを補うために高パルスエネルギー型エキシマーレーザーを更新した。

機器センターの所有する機器は汎用機器が主であるが、高周波ESR（Bruker E680）のような特殊装置も保有しており、共同利用を通して特色ある研究を展開している。この装置は購入後10年を経過して制御用コンピューターの老朽化が著しいため、平成20年度に制御用コンピューターの更新を行った。このような特殊装置に平成21年度より波長可変ピコ秒レーザーシステムが加わる予定になっている。この装置はピコ秒時間分解ラマン分光測定などの実験が可能で、電子構造研究部門西グループより機器センターに移管され、平成21年度より所内・所外に公開の予定である。

新しく機器センターに配属される技術職員がこの装置を担当する。機器センターは分子集団動力学部門の旧小林グループより移管された 15 テスラーの超伝導磁石を付属した希釈冷凍機を所有している。この装置は分子磁性体や分子導体などを研究する上で有用な装置であるが、汎用装置とは言い難い特殊な装置の部類に入る。平成 21 年度より大阪大学理系大学院の中澤康浩教授を物質分子科学領域の客員教授として招聘し、高磁場・極低温下における比熱測定装置の立ち上げを予定している。

## 8-4-2 利用状況

機器センターの共同利用の形態は施設利用であるが、現状では化学分析機器と寒剤は所内の利用者が主であり、所外の利用者は主として X 線回折装置や物性測定機器を施設利用している。平成 20 年度の所外施設利用件数は 61 件で、平成 19 年度の 51 件<sup>\*</sup>に比べてやや増加した。施設利用の実態を把握し施設利用者と機器センターとの交流を図ることを目的として、機器センターの施設利用者向けの広報誌「機器センターたより」を発行した。施設利用者の利用状況の統計を調べた結果、機器の利用頻度や頻りに利用している所外施設利用者の実態も明らかになった。所外施設利用者には半期に一件あたり 2 泊 3 日 1 回の旅費が支給されるが、一回で目的が達成されるような実験は非常に少ない。年間 30 回も利用しているヘビーユーザーもあり、このような頻繁な施設利用者に対しては旅費の支給を 2 回に増やすなどの方策が望まれる。また機器センターの保有する機器、特に新しく配置された機器の特徴をホームページよりも詳しく説明する欄を設けた。また、所内利用者と所外利用者一名ずつに、施設利用を通して得られた研究成果について執筆を依頼した。「機器センターたより」は新たな施設利用者を発掘することができると考えており、毎年一回発行することを計画している。

## 8-4-3 今後の課題

- (1) 平成 20 年度に化学試料棟に機器センターの事務室を整備したのであるが、諸般の事情で平成 21 年度より南実験棟一階へ移動することになった。平成 20 年度中に化学設備ネットワークの業務を主とする事務室が完成する予定である。明大寺地区の機器センター職員を全員収容できる事務室を整備するためにはもう一部屋必要であるが、実験棟改修に伴ってスペースが確保できない状況になった。実験棟改修の終了する平成 23 年度には是非とも完成させたい。
- (2) 現在、機器センターは極低温棟二階にインターネットその他が利用できる共同利用者控え室を用意している。この控え室は極低温棟とレーザー棟にある機器を利用する施設利用者によって有効に利用されている。南実験棟の地下にある機器を利用する施設利用者にとって極低温棟はあまりにも離れすぎているので、実験棟改修が終了した後は、南実験棟にも同様の共同利用者控え室を用意する必要がある。山手地区は所外施設利用者が少ないこともあって共同利用者控え室が設置されていない。空き室はないので、部屋の再編が必要となるが、共同利用者控え室を作る努力をしなければならない。
- (3) 現在、分子科学研究所の明大寺地区では平成元年に導入した神戸製鋼所の全自動液体ヘリウム液化装置を用いて、年間約 4 万リットルの液体ヘリウムを供給している。この設備は導入後 20 年が経過しようとしている。この装置が使用不能になるとき山手地区のヘリウム液化機から液体ヘリウムを供給することが計画されているが、この計画を実行に移すためには明大寺地区で回収したヘリウムガスを山手地区へ移送するための地下埋設配管が必要である。平成 20 年度は施設課に依頼して配管工事費用の見積りを行った。その結果、明大寺地区のヘリウム液化機を更新する費用の約 3 分の一程度の費用がかかることが分かった。このほか、実際に埋設工事を行うためには道路や研究所外の土地を通す必要があり、そのための許可や交渉が必要であり、時間がかかることが予想される。まずは、明大寺地区の

液化機の更新を最優先させるべきであると考え。長期的な計画としては明大寺地区のヘリウム液化を更新した後に、山手地区と明大寺地区を結ぶ回収ラインを敷設するのが最良の方策である。このような態勢をとっておけば、山手・明大寺どちらの液化機が故障しても、その間、稼働している液化機で液体ヘリウムを両地区に供給する態勢を整えることができる。

(4) 山手地区の 500 MHz NMR は平成 7 年に導入された稼働率の高い機器であるが、すでに 13 年が経過している。制御用コンピューターは、ハードウェアの補修部品の調達が困難になっているのみならず、オペレーティングシステム (OS) を含めたソフトウェアの保守が受けられない状況になっている。今後、トラブルが発生した場合、復旧が不可能であり、共同研究の推進に重大な支障をきたすことになる。この装置は化学設備ネットワークの更新機器に指定されているので、予算がつけば更新可能であるが、このほかの手立ても考えておく必要がある。この他、マトリックス支援イオン化 - 飛行時間型質量分析計も高い稼働率で使用されているが、購入後 9 年経過しており、更新を計画しておく必要がある。

\* 分子研リポート 2007 には平成 19 年度の施設利用数 57 件と記載してあるが、装置開発室の施設利用が含まれていることが後になって判明した。

## 8-5 装置開発室

装置開発室は分子科学の新展開に必要な新しい装置および技術を開発する事と日常の実験研究に必要な部品および機器の設計・製作に迅速に対応するという2つの役割を担っている。新しい装置の開発には、実験研究者との密接な協力体制で取り組んでおり、平成17年度からは共同利用機関の活動の一環として所外研究者からの製作依頼も受け付けるように体制を整えた。これにより、装置開発室固有の技術の維持と向上に研究者と技術者が一体となって取り組んでいる。また、日常の実験研究で必要な工作依頼や緊急性を要する依頼に対しては加工技能を持つ短時間契約職員の協力により対応している。この様に、装置開発室の重要な業務である新しい装置・技術の開発と日常の実験研究に対する技術支援との両方に技術職員が取り組んでいる。

### 8-5-1 独自技術の開発

機械技術では、平成18年度から「脆性材料の超精密加工」として、国立天文台の先端技術センター設置の超精密加工機を利用して、赤外光用の光学材料である硫化亜鉛（ZnS）結晶を用いた回折格子の試作を行っている。これは名古屋大学及び国立天文台との共同開発として実施している。この共同開発は赤外天文観測用の光学素子製作を課題としてきたが、その他に平成20年度は、レーザー用の光学結晶を冷却するヒートシンクの素材に用いる銅タングステン（CuW）のテスト加工を行った。平成21年度はこの材料とZnSの最適な加工条件を探索する計画である。

もう一つの「小径工具を用いたマイクロ加工」についての取り組みも4年経過し、100 $\mu$ m以下の工具を使うノウハウが蓄積されてきた。平成19年度はサブミクロン駆動のXYZステージを導入し、微小切り込みや精密位置決めなど新しい加工法を応用しマイクロ部品の製作を行った。平成20年度はオンマシン計測が可能なCNCフライス装置の開発を開始した。今後はこのマイクロ加工装置を完成させ、多方面からの研究支援に対応する計画である。

電子回路技術では、高速化や多機能化が進む電子回路の需要に対応するために、CPLDやFPGAなど、プログラマブル論理回路素子を用いたカスタムICの開発を行っている。また、平成18年度より、東京大学大規模集積システム設計教育センター（VDEC）を利用したアナログ集積回路の開発技術の導入に向け、バイオセンサーに用いるCMOS集積回路の試作設計を中部大学の協力を得て進めている。今後は、LSIの設計・製作・評価のためのノウハウを蓄積しユーザーの要求に迅速に対応できる体制を整える計画である。

### 8-5-2 設備

装置開発室の設備は、創設から30年以上経過し老朽化、性能不足、精度低下などが進み、分子研の新しい展開を担う研究支援に影響するため、毎年、重要事項として対策の検討を進めている。平成16年度から中村所長の配慮で、計測評価のための機器の一部が新規導入および更新され、先端技術から取り残される事態から踏みとどまっているが、加工設備に関してはまだ十分とは言えない。今後さらに研究所の方針に合わせた設備計画を運営委員会等で検討していく事とする。

高度な加工設備は機械本体そのものも高価であり、また設置環境を整え、維持管理など付帯経費も必要であることから、導入はなかなか困難であるが、他機関、他大学または民間企業を含め、すでに設備されている機器を利用する方法も検討していきたい。現在 国立天文台が所有している超精密加工機の利用を行っている事例もあるが、これらは、年度毎に共同開発として利用申請書を提出し採択される必要があり、研究支援や速やかな対応には向かない面もある。また、新規な材料等を加工する場合には、加工条件の探索から始まるので、長期に亘っての使用、共同利用の場合の研究内容との整合性、更には、利用料や派遣経費などの問題がある。これらを踏まえ、研究支援に効果的な加工機器活用を調査・検討していく。

## 8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターにおいては、2000年度における計算科学研究センター化にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究以外にも、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等の新たな業務に取り組んできているところであるが、2008年度においても、次世代スーパーコンピュータプロジェクト支援、分子・物質シミュレーション中核拠点形成、ネットワーク管理室支援等をはじめとした様々な活動を展開してきている。上記プロジェクトについてはそれぞれの項に詳しく、ここでは共同利用に関する活動を中心に、特に設備の運用とセンターの将来構想の検討の必要性について述べる。

2009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図と表に示す。本システムは、超高速分子シミュレータと高性能分子シミュレータから構成されている。前者は2006年7月に導入し明大寺地区に設置され、後者は2008年2月に更新されて山手地区に設置されている。「超高速分子シミュレータ」、「高性能分子シミュレータ」は、いずれも量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、反応動力学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。

まず、「超高速分子シミュレータ」は富士通のPrimeQuestとSGIのAltix4700から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サブシステムは同一体系のCPU（Intel Itanium2）およびOS（Linux2.6）をもとに、バイナリ互換性を保って一体的に運用される。システム全体として総演算性能8 Tflopsで総メモリ容量10 TByte超である。

PrimeQuestサブシステムは、64 CPUコア/256 GBからなるSMPノード10台で構成される。演算ノード間は16 GB/sのバンド幅で相互接続され、大規模な分子動力学計算などノード間をまたがる並列ジョブを高速で実行することができる。Altix4700サブシステムは2ノード構成からなり、それぞれ512 CPUコア/6 TBおよび128 CPUコア/2 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムである。さらに本サブシステムには、磁気ディスク装置SGI TP9700がジョブ作業領域として提供され、実効容量104 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有するディスクI/Oを実現する。本サブシステムは大容量（最大6 TB）の共有メモリおよび超高速ディスクI/Oに特徴をもち、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。

一方、2008年3月に導入された「高性能分子シミュレータ」は、演算サーバ、ファイルサーバ、フロントエンドサーバおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、日立製作所製のSR11000後継機であり、1 CPUコアあたり18.8 Gflopsの演算性能を持ち、1ノードが32 CPUコアと256 GByteメモリを有する共有メモリ型スカラ計算機である。理論総演算性能は5.4 Tflops、総メモリ容量は2.3 TByteであり、一時作業領域として23 TByteのディスクを装備している。本演算サーバは、浮動点少数演算量が多い分子科学計算はもちろんのこと、高クロック周波数CPUの強みを生かし、従来性能が出しにくかった整数演算や論理演算を多用するプログラムも性能を発揮することが期待される。ファイルサーバは、共同利用システム全体のホームディレクトリ等のサービスを行い、128 TByteのディスクを装備している。またバックアップ領域として60 TByteのディスクも装備している。

共同利用に関しては、2008年度も151の研究グループにより、総数646名にも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が、システムの運用にあたり、世界をリードする計算科学研究を本センターから発信していくことができるよう、特に大規模ユーザのために施設利用Sを設定している。これに従い、審査により、平成20年度は5件の利用グループに本システムを優先的に使用していただき、従来の共同利用の枠を超えた超大規模計算の環境を提供している。

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次世代スーパーコンピュータプロジェクトの中で、ナノサイエンスに関わるアプリケーション開発という重要な役割の一端を担っており、分子科学に関わる計算科学研究のナショナルセンターともいふべき分野拠点として、活動を展開している。

この中で、昨年度は計算科学研究センターワークショップとして、分子科学、物性科学、計算機科学の分野の研究者が集まり、「次世代理論化学の新展開と超並列計算への挑戦」をテーマとしたワークショップを開催した。また、次世代スーパーコンピュータについては、センターユーザーをはじめとした理論・計算分子科学研究コミュニティの主だった先生方により設立準備委員会が組織され、計算科学研究センターの位置づけ、果たすべき役割等について検討がなされた。その中で計算科学研究センターに期待されている重要なアクティビティの大筋は以下の通りである。

- (1) 神戸に設置される次世代スーパーコンピュータの共用に際して、理論・計算分子科学領域を含め、計算科学研究センターがナノサイエンス分野、分子科学分野の分野拠点として機能していくこと、つまり神戸センターが計算機の運用に対して責任を持つ一方で、分子研は分野の研究に対して責任を持ち、研究をリードし、取りまとめを行っていくこと。
- (2) このため、分子科学研究所に理論・計算ナノサイエンス特別研究センター（仮称）を設置し、計算科学研究に加えてソフト開発を含めたライブラリの整備や研究支援活動を行っていくこと。

#### 平成 20 年度 システム構成

##### 高性能分子シミュレータシステム

演算サーバシステム	
	型番：HITACHI SR11000 次世代モデル
	OS：AIX
	CPUCore 数：288 (32CPUCore × 9 ノード)
	総理論性能：5.4TFLOPS
	総メモリ容量：2.3TB (256GB × 9 ノード)
	ディスク容量：23TB (/work)
ファイルサーバシステム	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
	ディスク容量：120TB (/home (37.4TB), /week (20.0TB), /save (37.4TB))
	60TB (バックアップ用)
フロントエンドサーバ	
	型番：HITACHI EP8000/550Q (2 ノード)
	OS：AIX
	総メモリ容量：64GB (32GB × 2 ノード)
高速ネットワーク装置	
	型番：Alaxala AX6708S

