

## 8 . 研究施設の現状と将来計画

分子科学研究所の各研究施設は、言うまでもなく、大学共同利用機関の施設として分子科学分野コミュニティに対して極めて重要な役割を担っています。各研究施設の現状、改善の努力、及び、将来計画の議論が本節にまとめられています。詳細については、各節の議論を参照して頂きたいと思いますが、常に問題となるのが、設備の拡充と高度化、及び、新規設備の購入の必要性であります。所内研究者や技術職員による高度化と改良の努力は常に行っておりますし、予算の工面による共通設備の購入等も前述の通り少しずつながら実施してはいますが、まだまだ一部に限られます。研究所自身の努力と共に、国の学術研究基盤支援強化が切望されるところであります。なお、昨年突然修復不可能な故障で停止してしまった明大寺地区の自動ヘリウム液化装置は、文科省の計らいで、平成 22 年度予算で措置され、新規装置の購入が可能となりました。

国の予算編成のあり方がなお流動的であると思われるので、今後、大学共同利用機関の共同利用・共同研究のあり方や大学の分野コミュニティとの連携のあり方等について、所内のみならず各方面との議論を深めていく必要があると考えます。

(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(一定ビーム強度運転)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, その後, 段階的に運転時間を拡大し, 2010年度よりトップアップ運転での定常的な共同利用を実施する予定である。

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 (UVSOR-III 計画)
- (b) 新しい施設の建設
- (c) 海外アウトステーションの建設

の3つの方向で考える必要があると考えている。

(a) については, UVSOR-II 蓄積リングで唯一建設来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エミッタンスを現在の 27 nm-rad から 15 nm-rad 程度まで下げ, さらに高輝度化を図るものである (UVSOR-III 計画)。なお, 直線部を増強するために入射点を移動し長さ 4 m の直線部を新たに創出するという計画は, 昨年度から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が決まっている。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。また, 同じ場所を占めている既存ビームラインの移設と高度化が予定されている。当面, 量子ビームプログラムを推進しつつ, 偏向磁石の更新による低エミッタンス化を実施する。

(b) については, 以下のようないくつかの選択肢がある。

- i) 1.5-2.5GeV 級新第3世代リング
- ii) 1GeV 級超高輝度リング
- 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

それぞれの検討を進めながら, 他施設の動向など国全体の中での位置付けも考慮しつつ, 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。ii) は汎用性よりも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。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はずである。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。

(c) については, UVSOR-III は維持しつつも, 性能的に UVSOR-III では不利なエネルギー領域を, 極限に達している海外の最新鋭高輝度光源施設のアウトステーションでカバーするものである。国内では該当する光源施設はなく, 新たな建設計画のチャンスもない状況である。アジア・オセアニア地区では中国, 台湾, 韓国, 欧米ではフランスやスウェーデンが対象施設を有する(一部は建設中)。アウトステーション計画を進めるのであれば, 長期的な海外戦略を立てて臨む必要がある。

## 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。平成19年度から，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ている。また，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。現在の専任教員は，平本教授に加え，鈴木敏泰准教授，永田央准教授，櫻井英博准教授の4名である。

共同研究支援に関しては，分子科学研究所が，平成19年度から文部科学省・先端研究施設共用イノベーション創出事業の一環であるナノテクノロジー・ネットワークプロジェクトを受託し，ナノセンターが業務としてこれを運営している。本プロジェクトを遂行するため，併任教員を配置している。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（岡崎統合バイオサイエンスセンター），永瀬茂教授，唯美津木准教授が併任し，ナノネットプロジェクト業務を実施している。また，920MHz NMRでの新規固体プローブ開発を目的として，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には，920MHz 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。ナノネットの内容や成果に関しては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，専任教員・准教授全員，センター以外の教授・准教授若干名（併任のセンター教員を含む）ならびに外部委員からなる。平成21年度の外部委員は，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及びフラー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。所内でも，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のグループが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おり，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，所内外ともますます充実した先端利用が期

待できる。また、安定な共同利用運用に加えて、本年度は、新たに西村准教授が温度可変固体プローブを開発し、来年度からの共同利用供与を目指している。

昨年度に展望として記述した、920MHz NMR と同じ環境で作動する予備装置の導入に関しては、600MHz 溶液固体 NMR 装置が機器センターに納入されたことで達成された。これにより 920MHz NMR 測定の準備測定が可能となり、さらに 920MHz NMR が有効利用できると期待できる。

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。今年度既に 3 件の利用があった。

今年度は、920MHz NMR に関する助言と評価をいただく目的で、生体 NMR の専門家である Max-Planck 研究所（Göttingen, Germany）の Christian Griesinger 教授を招聘した。これまでの運用に関しては、全利用時間のうち所内利用が 30% 程度でしかなく、残りを外部利用者に供出している点が特に高く評価された。また、固体を含めて国際共同研究を含めて幅広い範囲で高い成果が挙げられている点が評価された。一方で、維持管理に対してより一層の時間短縮を追求すること、可能ならば信号感度改善のためのクライオプローブの導入などを助言していただいた。

やや中期・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。予備測定を実施するための 600MHz 溶液固体 NMR 装置の導入が実現できた。920MHz 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、本センターと当該研究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。21年度現在、本センターは以下の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; 平等拓範准教授(専任) 藤 貴夫准教授(専任) 加藤政博教授(UVSORより併任)
- (2) 超高速コヒーレント制御研究部門; 大森賢治教授, 菱川明栄准教授(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; 岡本裕巳教授, 大島康裕教授(以上, 光分子科学研究領域より併任),

松本吉泰教授(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

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、いくつかの機器を大学連携研究設備ネットワークに公開しつつ、この事業の実務を担当している。機器センターにはセンター長（併任）のほかに9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2名、寒剤装置2名、研究設備ネットワーク1名）と2名の非常勤事務職員（機器センター1名、研究設備ネットワーク1名）が配置されている。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、研究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。平成19年4月に発足した機器センターは発足後の3年間でほぼその姿を整えつつある。平成21年度は機器センター事務室の化学試料棟から南実験棟一階への移転、研究設備ネットワーク予約課金システムの改善、古い装置の更新と新しい装置の導入、施設利用者向けの広報誌「機器センターたより No.2」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、粉末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必須の装置が配置してある。平成21年度は元素分析用電子天秤の更新を行った。また、昨年導入した生体試料用の示差走査型カロリメータおよび等温滴定型カロリメータを平成22年4月より研究設備ネットワークの予約システムを通して所外公開する。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要な汎用装置を配置している。平成21年度は極微小結晶用単結晶X線回折装置（CCD-3）の制御システムを更新した。このほか、液体ヘリウム輸送管とリークディテクターを新たに購入した。分光計測装置は三種のパルスレーザーシステム、波長可変ピコ秒レーザーシステム、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。機器センターの蛍光分光装置は近赤外領域の蛍光を高感度で測定できるという特色をもっているが、購入後14年経過している。平成21年度は老朽化した制御システムを更新し、それに伴い、励起光用と試料光用の二つの分光器を更新した。

「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築のための最先端設備」に対して平成21年度の補正予算が交付された。分子科学研究所に交付された予算で生体分子計測用高磁場低エネルギー核磁気共鳴装置（600 MHz）と高感度パルス電子スピン共鳴装置（Q-band）を購入し、機器センターが管理することになった。平成21年度末に納入される両設備は研究設備ネットワークの予約システムを利用して、平成22年10月から所内公開し、平成23年4月から所外にも公開することを予定している。このほか、平成21年度は所長より顕微ラマン分光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。この装置は励起光として3本の半導体レーザーと1本のガスレーザーを有し、試料を液体ヘリウム温度まで冷却することができる主に固体試料を対象とする装置である。この装置は平成22年9月を目途に準備が整い次第、所内・所外に公開を開始する。明大寺地区のヘリウム液化装置は購入後20年が経過しており、運転不能となることが危ぶまれていたが、平成21年5月に液化装置の心臓部が故障し、修理不能となった。関係各位のご支援により、ヘリウム液化装置の更新を急遽平成22年度の概算要求に追加して平成22年度の予算内示を受けることができた。平成22年2月4日に第一回の仕様策定委員会を開催し、平成23年8月の納入を目指して導入手続きを開始した。

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。前項で説明したように平成 21 年度には更に Q バンド領域のパルス ESR システムを追加した。このほか、機器センターは 15 テスラーの超伝導磁石を付属した希釈冷凍機を保有している。これは研究領域の研究グループから移管された装置で、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。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研究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設計を開始した。現在、大阪大学で開発した緩和法による比熱測定装置を希釈冷凍装置に組み込んで実験を開始しており、平成 22 年度中の完成を目指している。

#### 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、前期後期に分けて年二回の施設利用を受け付けている。平成 21 年度の所外施設利用件数は平成 22 年 2 月末現在で 51 件である。所外施設利用者には半期に一件あたり 2 泊 3 日の旅費を 1 回支給しているが、1 回で目的が達成されるような実験は非常に少ない。そのため、自費で分子研に來所する施設利用者も多い。このような施設利用の統計を昨年に引き続き発行した「機器センターたより No. 2」に掲載した。この施設利用者向けの広報誌は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いる。新装置および更新装置の欄を設けて、平成 20 年度に新たに導入した装置と更新を行った装置の特徴と性能をホームページよりも詳しく説明した。研究紹介欄では所外・所内の機器センターヘビーユーザーに執筆を依頼した。また、「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 ISSN 番号を取得した。

#### 8-4-3 今後の課題

- (1) 機器センターの運営委員会は 4 つの研究領域から推薦された委員と機器センター職員で構成される所内委員会である。所外施設利用者の意見をすい上げる場として機器センターたよりの交流欄をもうけ、投稿をよびかけているがまだ投稿はない。今後は、機器センター運営委員に所外委員を入れて、外部の意見を反映できるようにする必要がある。
- (2) 平成 21 年度より大学連携研究設備ネットワーク事務室を南実験棟一階へ移動した。実験棟耐震工事に伴ってスペースが確保できない状況になっているため、現在使用している 2 部屋は機器センター事務室も兼ねている。工事が完了する平成 23 年度からは機器センター事務室としてもう 1 部屋を確保する必要がある。これに伴い、南実験棟一階の部屋の再配置を行う必要がある。
- (3) 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。しかし、南実験棟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。耐震工事終了後には、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。
- (4) 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という視点から、機器センターには平成 20 年度より新しい装置が導入され始めた。また、研究領域の研究グループから移管される装置が今後もいくつか予定されている。このような傾向は今後も続くことが予想されるので、機器センターの新たなスペースの確保と稼働率の少ない老朽化した装置の廃棄を計画的に行う必要がある。

(5) 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 14 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。この装置の更新を常に念頭に置く必要がある。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 10 年経過しており、更新を計画しておく必要がある。

## 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技術支援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、より高度で先進的な技術により研究・開発を支援するために様々な新しい加工技術に取り組んでいる。多点計測型イオンチャンネルバイオセンサーの製作に必要な超精密金型を、理化学研究所と共同で超精密ナノ加工機により試作を行っている。またホットエンボス加工により10 $\mu\text{m}$ の残膜部を有するPMMA基板の製作を産総研と共同で、さらにニュースバルにおいてPMMA基板への直径3 $\mu\text{m}$ の微細孔加工をリソグラフィーにより試みている。

従来から行っている超精密加工およびマイクロ加工に関する以下の技術開発も継続して行っている。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。平成21年度は、単結晶ZnSの加工特性に及ぼす結晶方位依存性について調査を行い、その結果をもとに単結晶ZnS回折格子を試作した。今後は、ガラスおよびシリコンなどの超精密加工への適用を図る予定である。

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 $\mu\text{m}$ 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の開発を積極的に行っている。東北大学多元物質科学研究所からの施設利用である「超高速多重同時計測回路」では、従来使用していたデバイス(ECL)に代えてCPLDでの開発を進めている。これにより、回路の高速性は保ちながら高機能化へ向けての対応が容易になり、さらに消費電力やデバイスの入手性など現状の問題点も改善できる。

また、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、ワークステーションの立ち上げとLSI設計支援ツールの整備を行った。今後は、CMOSアナログ集積回路の試作を行って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により設備更新が徐々に進み、本年度はデジタル・マイクロスコープ、ドリル研磨機、集塵装置付きグラインダー、高速絶縁データ・ロガー、ミクスド・シグナル・オシロスコープ、周波数カウンタを導入した。しかしながら、先端的な加工設備や計測機器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。

一方、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、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、2009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。

2010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SR16000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。

さらに、2011年7月以降に「超高速分子シミュレータ」を更新するために、2010年1月に仕様策定委員会を設置し、導入に向けた手続きを開始した。

共同利用に関しては、2009年度も171の研究グループにより、総数683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、2009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。また、近年、共同利用における利用者の数が増加傾向にある。このことは、計算科学研究センターが分子科学分野や物性科学分野において、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。

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でもい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、「大規模並列分子シミュレーションの最前線」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・計算分子科学研究領域を含め、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 21 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 SR16000 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

超高速分子シミュレータシステム

蜜結合演算サーバサブシステム	
型番	富士通 PRIMEQUEST
OS	Linux
CPUCore 数	640 (64CPUCore × 10 ノード)
総理論性能	4.096TFLOPS (409.6GFLOPS × 10 ノード)
総メモリ容量	2.56TB (256GB × 10 ノード)
ディスク容量	800GB × 10 ノード (/work)
	: 8TB (/week)
高速 I/O サーバサブシステム	
型番	SGI Altix4700
OS	Linux
CPUCore 数	640 (128CPUCore + 512CPUCore)
総理論性能	4.096TFLOPS (819.2GFLOPS + 3276.9GFLOPS) (6.4GFLOPS/CPUCore)
総メモリ容量	8TB (2TB + 6TB)
ディスク容量	114TB (/work)
高速ネットワーク装置	
型番	Catalyst 6504

システム構成図

