

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が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充実させた。また、高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員も配置した。

流動性の高い分子科学研究所の場合、着任後の研究立ち上げスピードの速さが重要である。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る。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。それによって、転出後もこれらの施設の共同利用によって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、共同利用設備として施設の管理となって、さらに広く共同利用されるケースもある。このように、研究所として見た場合、施設の充実が研究職員が流動していくシステムそのものを支援することになる。従って、施設の継続的な運営が重要であり、毎年、所全体に定員削減、人件費削減の要請があっても施設の技術職員については手を付けず技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するようにした。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を可能とした。さらに長期戦略が必要な施設には教授を置くことで、現在は、施設所属の研究職員であっても流動性を保てる方向になっている。

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。分子制御レーザー開発研究センター（1997年設置）、分子スケールナノサイエンスセンター（2002年設置）、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、それぞれ最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点事業、ナノテクノロジーネットワーク事業、大学連携研究設備ネットワーク事業をそれぞれ受託し、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。2013年4月に、分子スケールナノサイエンスセンターを改組し、多重の階層を越えて機能する分子システムを構築することを目的とした新たな研究センターとして「協奏分子システム研究センター」を発足させた。

（大峯 巖）

8-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

UVSOR 施設は 2003 年の光源加速器高度化（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増設，トップアップ運転（一定ビーム強度運転）導入により，1 GeV 以下の低エネルギーシンクロトロン光源としては世界的にも最高水準の高性能光源となった。さらに，光源加速器で唯一建設来手つかずの装置である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，電子ビームエミッタンスを現在の 27 nm-rad から 15 nm-rad 程度まで下げる改造を 2012 年春に行った。この改造に合わせて，アンジュレータ 1 台が増設され，周長 50 m の小型光源に合計 6 台のアンジュレータが稼働することとなった。現在，運転の安定性の向上に取り組んでいる。

ビームラインはスクラップアンドビルトにより数を絞り込み，競争力のあるビームラインを中心に重点的に整備を進めており，現在は 13 本が稼働しており，2 本が立上調整中である。このうち 2 本の偏光可変型アンジュレータビームラインは世界的にも最高水準の性能を誇り，固体の光電子分光による研究に威力を発揮している。また，3 本の真空封止型アンジュレータビームラインは気体や液体の特徴ある分光研究に利用されている。他，国内では唯一の軟 X 線顕微分光ビームラインとして利用が開始された。

新しい光源技術の開発として，レーザーと電子ビームを用いた光発生とその利用法に関する研究を，文部科学省の受託研究として進め，装置の整備が完了した。現在，コヒーレントなテラヘルツ光・真空紫外光の試験利用開始に向けて更に研究を進めている。

光源加速器の高度化は 2012 年度の改造で一段落し，その後はより高い光源安定性の実現へ向けた改良や新しい技術の導入へ重心を移す。また，老朽化の進んでいる一部のビームラインについては，整理統合の可能性も排除せず更新・高度化の検討を進め，段階的に実施する。現在，固体光電子分光ビームラインのうち一本について，アンジュレータや分光器，末端の実験装置も含む高度化が進められており，2014 年度中の利用開始を目指している。

上記のように既存設備の性能を世界最高水準に維持し高度な利用研究を推進しつつ，次期計画の具体化に向けた検討を進める。様々な可能性が考えられるが，需要，予算，敷地，加速器技術の進展，他施設の動向なども考慮しつつ，計画を練り，最適なものを選択する必要がある。高輝度・高繰り返し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は，リング型光源と相補的な光源となるはずであり，既存加速器を運用しつつ整備を進めることができる可能性があること，現在進めているレーザーと電子ビームを用いた光発生技術を活かせる可能性があること，などの利点もあり，その実現可能性について技術的検討を進めている。

8-2 協奏分子システム研究センター

8-2-1 経緯と現状，将来構想

協奏分子システム研究センターは2013年4月に発足し，分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産を基盤に，新しい分子科学の開拓に取り組んでいる。センターのミッションは，「分子それぞれの性質が階層構造を持つ分子システムの卓越した機能発現にどう結びつくのか」という分野横断的な重要課題を解決することである。そのためには，システムの構成要素である分子自身について理解を深めるのに加え，それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり，複雑かつ高度な機能の発現へと繋がっていくのかを理解しなければならない。

このような目的の達成に向けて，微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り，「階層分子システム解析研究部門」，「機能分子システム創成研究部門」，「生体分子システム研究部門」の3部門体制で研究活動を展開している。発足時の体制は，専任PIが7名（秋山教授，山本教授，村橋教授，櫻井准教授，鈴木准教授，石崎特任准教授，鹿野特任准教授），併任PIが6名（斉藤教授，青野教授，加藤教授，古谷准教授，正岡准教授，藤井准教授）の計13名であり，10月1日に小林特任准教授を迎えて現在14名（専任PI 8名，併任PI 7名）となっている。未踏の領域に切り込む若手研究者から，分野をリードするシニア研究者まで，異なる学問領域の研究者が集う，幅広くも層の厚いメンバー構成となっている。

2013年度の主な活動状況として，階層分子システム解析研究部門では，分子時計システムを題材に実験（秋山グループ）と理論（斉藤グループ）のあいだで共同研究が進行している。また，同部門に属する3名の若手特任准教授は研究活動を活発に展開しており，その成果の一部は論文や受賞という形で評価されている。機能分子システム創成研究部門からは，有機分子による超伝導トランジスタの実現（山本グループ）など興味深い研究成果が複数発表されている。設立よりいまだ日も浅く，センターとしての研究成果が目に見える形となって表れるのはまさにこれからである。

専任PI（若手独立フェローを含む）はセンターが掲げる目的に向かって，これまでの研究とは違う新しい一歩を踏み出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが，より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため，明大寺地区の研究グループの居室を1フロアに集中させ，一部をオープンスペースとして運用するべく準備を進めている（2014年度5～6月あたりを計画）。

その他，ウェブサイトの立ち上げ，2回のワークショップ（共催），8回のCIMoSセミナー等を企画し，これらを通じてセンター活動や成果を国内外に発信している。

8-3 分子制御レーザー開発研究センター

8-3-1 経緯と現状、将来構想

分子制御レーザー開発研究センター（以後「レーザーセンター」）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名の技術職員が行ってきた。放射光同期レーザー開発研究部は、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。特殊波長レーザー開発研究部は、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活動を行った。

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行われたが、この中で、レーザー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レーザー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・フォトンクス」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再設置であった。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、レーザーセンターと分子物質開発研究センターが設置され、後者は更に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。これに伴って、レーザー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、レーザー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、センターとしての活動の重点を開発研究に移すことが可能となった。そこで改組後のレーザーセンターでは、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、分子研におけるレーザー関連光分子科学の開発研究の中心として機能することを重要なミッションと考えることとなった。ただし、光分子科学研究領域の研究グループとレーザーセンターの役割の違いを認識しておく必要がある。光分子科学研究領域の各研究グループではそれぞれの興味のもとで光分子科学の研究分野を開拓し、先端的研究を展開するのに対して、レーザーセンターのミッションは、光分子科学の先端的研究とその将来的な発展に必要な、光源を含む装置、方法論の開発、及びそれらの技術の蓄積に重点がおかれるべきである。光分子科学研究領域とレーザーセンターのインタープレイにより生まれた技術や方法論を蓄積するだけでなく、開発された手法、装置や部品を所内外に提供・共同利用に供する点で、研究領域における各グループの研究活動との差が存在する。

ただし、技術や方法論の開発段階においては、各グループの研究活動とレーザーセンターの活動を明瞭に区別する

ことは、しばしば困難である。従って、レーザーセンターと研究グループの人的な相互乗り入れは不可欠であり、平成 19 年度の組織再編に際しては、光分子科学研究領域及び UVSOR に属する数名の教授・准教授がレーザーセンターに併任する形で運営することとなった。このような組織で、光分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発と技術蓄積を行う開発研究施設という位置づけで、レーザーセンターを運営している。開発された装置や方法論の技術的蓄積も既に始まっており、今後、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望まれる。

これまでの所内、特にレーザーセンター内と光分子科学研究領域内における議論、及び所外委員を含むセンター運営委員会等の席において、レーザーセンターの機能・ミッションに関しても議論を重ねてきた。そこでの意見として、高いポテンシャルを持つ部門間の有機的な繋がりを考え、高い視点から見た共有点や一致点（例えば光による時間・空間を分解する研究手法）を探ること、レーザーを使って新しい実験の方法論を作っていくことが必要ではないか、という議論があった。またそれに向けて、レーザーセンターを光分子科学に関わる研究者が幅広く議論を行う場として有効活用することが必要との意見もあった。前者はまさに数年前の組織再編時に掲げた理想に沿うものであり、それに向けてレーザーセンターを議論の場として有効活用して行く必要があると考えている。エクストリーム・フォトリソグラフィーの活動としての所内セミナーの開催時に、そのような機会を持つことを、平成 23 年度より試行している。

平成 25 年度現在、レーザーセンターは以下の 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（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）

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。レーザー光源の開発から新たなスペクトロスコピー、マイクロスコピー、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。これらの開発研究により、他に類を見ない装置や方法論を創出して分子科学研究の重要な柱として寄与し、分子科学研究所とコミュニティの新たな共同利用の機会を開拓することが求められる。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、新たに開発された装置や方法論をセンターに蓄積し、継承していくための原動力として活躍する事が、センターのミッションに照らして重要な点である。センターが保有する光計測に関する汎用の小型装置と技術については、一部を所内で共用することを試行している。その意味で、現在 1 名しか配置されていない技術職員ポストが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への加藤教授（UVSOR 所属）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る。平成 22 年度からは実際に、レーザーセンターと UVSOR の現場の研究者・技術職員が、レーザーと相対論的電子ビームを組み合わせたコヒーレント放射光源の開発に関して議論を重ね、実験に取りかかっている。今後、先鋭化する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むことが期待され、それにより光分子科学の新たな領域を創出する正のフィードバックも加速されるであろう。この延長線上には、将来的に、放射光とレーザーの技術を総合した大規模な新規の研究施設を建設する構想も持っておく価値はある。国内外の類似の施設建設の動きを考慮すると、分子研において取り組むとすれば、レーザーに線形加速器を組み合わせたコヒーレント光源の建設が考えられる。想定される利用実験に関する十分な議論も尽くす必要がある。先端的なレーザー光源をセンターで保有し、その利用研究を複数のグループが行うというセンターの形態も状況によっては考えられる。しかし現在の分子科学における先端的なレーザー実験は、多くの場合、そ

それぞれの研究目的に適した小型レーザーが用いられており、一つの大型のレーザーを共同で利用するという利用形態が一般的ではない。このような利用形態を取るとすれば、どのような仕様とし、どのような利用実験が可能であるかを、コミュニティを巻き込んで十分議論する必要がある、このような方向を想定すべきかどうかは今後の検討課題である。これらの構想を含め将来的には、レーザーセンターと UVSOR を包括した研究センターの設立も視野に入れた検討を行う必要があると考えている。

8-3-2 共同研究の状況

平成 25 年度は、下記のような共同研究とその成果があった。

1)「高出力レーザー新材料の基礎研究」

高輝度光発生を目的として、物質・材料の微細な秩序領域であるマイクロドメインを機能的に構造制御する手法を探索している。これまでにコンボン研・豊田中研との共同研究において、分子研で開発の異方性レーザーセラミックスにおいてマイクロドメインの方位に統計的な揺らぎがあることを見出した。そこで希土類 4f 電子のスピン・軌道角運動量を考慮した磁場による系の異方性制御に関し、スピンの歳差運動による揺らぎをアンサンブル平均し、熱雑音を考慮してギブスの自由エネルギーの視点からの新たなモデル構築を行った（関連論文 2 件）。今後、モデルの実験的検証を行う予定である。

2)「チャープパルス上方変換による単一ショット中赤外スペクトル測定」

フィラメンテーションを使った波長変換によって、7 fs 程度の単一サイクル中赤外光パルスが発生された。そのパルスを使った高速な赤外分光装置の開発を香川大学の中西教授と協力して行った。結果として、遠赤外から近赤外までの超広帯域のスペクトル ($200\text{--}5000\text{ cm}^{-1}$) を 1 ms で計測することができた。研究成果の一部は国際会議で発表し、論文として出版された。

8-4 機器センター

機器センターは、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を主な業務としている。この他、研究所内外の共同利用者と協力して、機器センターの機器を利用した特色ある測定装置の開発とその共同利用も行っている。機器センターでは、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・管理を行っている。また、機器センター所有の多く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7名の専任技術職員と2名の事務支援員が配置されている。

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、機器センターにおいて、比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理することとなった。その一環として、2011年度末に終了した「ナノテクノロジーネットワーク事業」で運営されてきた920 MHz NMR および高分解能電子顕微鏡、さらに、X線光電子分光器、集束イオンビーム加工装置、走査型電子顕微鏡の計5装置が、機器センターに移管された。2012年7月よりは、「ナノテクノロジーネットワーク事業」の発展である「ナノテクノロジープラットフォーム(ナノプラットフォーム)事業」が開始された。当センターは、「ナノプラットフォーム」と緊密に連携を取り、様々な汎用設備の維持・管理と所外研究者への供用サポートを継続している。機器センター所有の施設の中、電子スピン共鳴（ESR）装置（Bruker EMX Plus, E500）ならびにSQUID型磁化測定装置は2013年度から「ナノプラットフォーム」にて運用する体制となった。また、理化学研究所より2台のNMR装置（Bruker AVANCE80, AVANCE600）が移管され、2013年秋より本格的な供用が開始されている。電子スピン共鳴装置に関しても各コンポーネントのアップグレードや様々なオプションの導入によって、研究環境の整備が行われた。

以上の状況に対応して、研究所外のコミュニティの方々から広くご意見を頂く必要性がますます増加するものと考え、機器センターの運営委員会が現在までは所内委員のみで構成されていたものを、所外委員も含めた構成に変更した。当会議では、施設利用の審査を行うほか、施設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る。

機器センターの今後であるが、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、現在の所有機器の多くが10年以上前に導入されたもので老朽化が進み、かなり高額な修理を頻繁に実施せざるを得ない状況になっている。全てを同時に更新することは予算的な制約からほぼ不可能であり、緊急性・使用頻度を考慮して順次更新を進めるプランを策定して、分子研全体の設備マスタープランへ組み込む必要がある。この点で、どのような機器ラインアップを維持するか再検討すべきであり、機器の利用形態を考慮すると、次の3つのタイプに階層化することが有用と思われる。

- 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。所内利用者には利便性を図りつつ相応の維持費負担をお願いする必要がある。また、オペレーターとして、技術職員ばかりでなく技術支援員等に対応することも検討する。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べきである。
- 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べきである。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、例えば、UVSOR や分子制御レーザー開発研究センター等と共同して取り組むことも効果的と考えられる。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。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。また、各種プロジェクトに適当な装置の時間貸しをすることによって維持費の一部を捻出するなどの工夫も必要であろう。

- 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。

8-5 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、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 300 件近くに及ぶ。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。

分子研外部からの製作・開発依頼を受け入れる「施設利用」を 2005 年度より分子研の共同利用の一環として開始し、年間 10 件程度を受け入れている。これを本格的に運用するにあたって、受入れ方式を見直し、分子科学の発展への寄与、装置開発室の技術力向上への寄与、装置開発室の保有する技術の特徴を活かせること、の 3 点を考慮し、受入れに関する審査を行っている。

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、フォト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、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取り組んでいる。

装置開発室の業務の基盤である依頼業務、すなわち、分子研内外からの装置の製作や開発の依頼に応える業務に加えて、装置開発室職員が技術力向上を目指して自主的に技術開発を行うような取り組みを「将来技術開発プロジェクト」と位置付け、研究の現場における需要を意識しつつ、装置開発室で保有する技術をさらに伸ばす仕組みとして展開していきたいと考えている。

装置開発室の設備については、創設から 30 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。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、他機関の保有する設備の利用も積極的に検討する。これまでの利用経験から、利用申請などの手続きに時間がかかるなどの問題も明らかになってきており、効果的な利用・活用の方法を調査・検討する。

8-6 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度の電子計算機センターから計算科学研究センターへの組織改組にともない、従来の共同利用に加えて、理論、方法論の開発等の研究、理論計算科学研究の場の提供、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いる。2013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、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、特に設備の運用等について記す。

2014年3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、「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2012年2月に更新され、後者は2013年3月に更新された。両シミュレータは、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社製のPRIMERGY RX300S7とSGI社製のUV1000から構成される共有メモリ型スカラ計算機で、両サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) 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。これらに加え、京コンピュータと同じアーキテクチャの富士通製PRIMEHPC FX10があり、システム全体として総演算性能188.7 Tflopsで総メモリ容量55 TByte超である。PRIMERGY RX300S7は、16 CPUコア/128 GB構成のノード342台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、InfiniBand QDRを採用し、全台数を40 GB/sで、一部は2系統の80 GB/sで演算ノード間を相互接続しており、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。特徴としては、vSMPが導入してあることで、複数ノードを仮想的に1ノードの巨大共有メモリシステムとして運用でき、これをジョブ毎に制御が可能である。また32ノードには、NVIDIA社製のGPGPU TeslaM2090を搭載している。UV2000は1024 CPUコア/8 TBを有するNUMA型の共有メモリシステムであり、ジョブ作業領域用に実効容量400 TBおよび総理論読み出し性能12 GB/sを有する高速磁気ディスク装置が装備され、大規模で高精度な量子化学計算を可能とする。この2サーバで1000 TBの容量の外部磁気ディスクを共有し、NFSより高速なパラレルNFSが使用できる。PRIMEHPC FX10は、16CPUコア/32GBの96ノードが富士通独自のTofuインターコネクトで連結されたシステムである。京コンピュータと互換性があり、京コンピュータのプログラム開発やデータ解析等に活用されている。

一方、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、運用管理クラスタおよびネットワーク装置から構成される。演算サーバは、富士通製のPRIMERGY CX250S1で、16 CPUコア/64 GByte構成のノード368台からなる共有メモリ型スカラ計算機のPCクラスタである。理論総演算性能は136.6 Tflops、総メモリ容量は23 TByteである。インターコネクトはInfiniBand FDRを採用し、全台数を56 GB/sで相互接続しており、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。ファイルサーバは、1800 TByteのディスクを装備しており、演算サーバのインターコネクトに直結している。本ディスクは、演算サーバのワークディレクトリとしてだけでなく、共同利用システム全体のホームディレクトリやバックアップ領域として運用している。本年度はファイルサーバのメモリを32 GBから128 GBに増強することでファイルアクセス速度の大幅な改善に成功した。本演算サーバは、2014年9月に次世代CPUを有するPCクラスタに入れ換えることになっており、その時点では300 Tflops以上に増強される。なお両システムのPCクラスタは一体的に運用が可能であり、この場合総演算性能は263.5 Tflopsにもおよぶ。本構成でlinpackによるCPU性能測定を行った結果237.9 Tflopsを記録することができ、2013年6月版TOP500リストに世界で129位の計算機として掲載された。

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 09, Gamess, Molpro, Molcas, Turbomole, 分子動力学分野では、Amber, NAMD, Gromacs 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約半数を占めている。さらに、量子化学データベース研究会の活動を支援し、同会から提供された量子化学文献データベースをホームページから検索できるようにしている。これまでに合計 125,646 件のデータが収録され、世界 84 カ国から利用されている。

共同利用に関しては、2013 年度は 200 研究グループにより、総数 737 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。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において、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」において重要な役割の一端を担っている。また、昨年度より、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) 戦略プログラムが開始された。この中で、HPCI 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ (CMSI: Computational Materials Science Initiative) が物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野により構成され、CMSI の戦略機関の一つとして分子科学研究所が参加し戦略プログラムを推進している。HPCI 事業の中で、計算科学研究センターは HPCI の資源提供機関の一つとして HPCI 戦略プログラムに参加し、2011 年度よりコンピュータ資源の一部 (20% 未満) 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、スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」と 2 つのウィンタースクール「第 3 回量子化学ウインタースクール～基礎理論と分子物性の理論～」と「第 7 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。

平成 25 年度 システム構成

超高速分子シミュレータシステム

クラスタ演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7
	OS：Linux
	CPUCore 数：5472 (16CPUCore × 342 ノード)
	総理論性能：126.9 Tflops (371.2 Gflops × 342 ノード) +21.2 Tflops (TeslaM2090 x32)
	総メモリ容量：43.7 TB (128 GB × 342 ノード)
高速 I/O 演算サーバ	
	型番：SGI UV2000
	OS：Linux
	CPUCore 数：1024
	総理論性能：21.2 Tflops (20.8 Gflops/CPUCore)
	総メモリ容量：8.0 TB
	ディスク容量：400 TB (/work)

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore数：1536（16CPUCore×96ノード）
	総理論性能：20.2 Tflops（13.2 Gflops/CPUCore）
	総メモリ容量：3.0 TB（32 GB×96ノード）
	ディスク容量：48 TB（/k/home）
外部磁気ディスク装置	
	型番：PANASAS PAS12，PAS11
	総ディスク容量：1000 TB
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 Z9000

高性能分子シミュレータシステム

演算サーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY CX250S1
	OS：Linux
	CPUCore数：5888（16CPUCore×368ノード）
	総理論性能：136.6 Tflops（371.2 Gflops×368ノード）
	総メモリ容量：23.5 TB（64 GB×368ノード）
ファイルサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7（8ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：320 GB（64 GB×2ノード+32 GB×6ノード）
	ディスク容量：1800 TB（/home（300 TB）, /save（600 TB）, /week（300 TB）, バックアップ領域（600 TB））
フロントエンドサーバ	
	型番：富士通 PRIMERGY RX300S7（4ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：256 GB（64 GB×4ノード）
運用管理クラス	
	型番：富士通 PRIMERGY RX200S7（16ノード）
	OS：Linux
	総メモリ容量：512 GB（32 GB×16ノード）
高速ネットワーク装置	
	型番：Force10 S4810

8-7 岡崎統合バイオサイエンスセンター

岡崎統合バイオサイエンスセンターは2000年に岡崎3機関の共通研究施設として設立されて以来、新たなバイオサイエンス分野の開拓という趣旨のもと、質の高い研究を展開してきた。一方、この10年余りの間に、各種生物における全ゲノム配列の決定などの網羅的研究手法が大きく発展し、生物学の新たな発展の可能性が期待されている。すなわち、生命現象に関わる素子としての分子や細胞の同定を主としたこれまでの還元論的な方法論に加え、同定された分子や細胞群に関する情報を統合することにより、生命現象の本質の理解に新たに迫ることへの期待である。このことは同時に、生命という複雑な階層構造を持つ対象を各階層に分断し、それぞれを詳細に調べるといった戦略に沿って進んできたこれまでの研究に対して、階層を超えたさまざまな視点からの統合的なアプローチによる研究方法の確立と展開が求められていることを意味する。

このような状況は、分子科学から基礎生物学、生理学までをカバーする幅広い分野の研究者が結集する岡崎統合バイオサイエンスセンターの存在意義をより高めるものであると同時に、このような学問的要請に本センターが答えるためには、生命現象を理解する上で本質的に重要ないくつかの問題について焦点を当て、それらに統合的な研究方法を組み入れるとともに、階層を超えた研究協力体制を確立することが望まれる。そこで、2013年度において、これまでの研究領域を発展的に改組し、新たに「バイオセンシング研究領域」「生命時空間設計研究領域」「生命動秩序形成研究領域」を設立した。各研究領域では、主に下記のような研究を実施する。

「バイオセンシング研究領域」では、分子から個体までのセンシング機構を駆使して生存している生物の生命システムのダイナミズムの解明に迫るために、環境情報の感知に関わるバイオセンシング機構研究を推進する。分子、細胞や個体が環境情報を感知する機構は様々であり、異なる細胞種や生物種におけるバイオセンシング機構の普遍性と相違性を明らかにするとともにセンスされた環境情報の統合機構も明らかにする。そのために、バイオセンサーの構造解析やモデリング解析、進化解析も含めた多層的なアプローチを実施する。

「生命時空間設計研究領域」では、生命現象の諸階層における時間と空間の規定と制御に関わる仕組みを統合的に理解することを目指す。短時間で起きる分子レベルの反応から生物の進化までの多様な時間スケールの中で起きる生命現象や、分子集合体から組織・個体に至る多様な空間スケールでの大きさや空間配置の規定や制御に関わる仕組みを研究する。そのために、分子遺伝学、オミックスによる網羅的解析、光学・電子顕微鏡技術を活用したイメージング、画像解析を含む定量的計測、などによる研究を展開し、さらに数理・情報生物学を駆使した統合的なアプローチを実施する。

「生命動秩序形成研究領域」では、生命体を構成する多数の素子（個体を構成する細胞、あるいは細胞を構成する分子）がダイナミックな離合集散を通じて柔軟かつロバストな高次秩序系を創発する仕組みを理解することを目指す。そのために、生命システムの動秩序形成におけるミクロ-マクロ相関の探査を可能とする物理化学的計測手法の開発を推進するとともに、得られるデータをもとに多階層的な生命情報学・定量生物学・数理生物研究を展開し、さらに超分子科学・合成生物学を統合したアプローチを実施する。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授はバイオセンシング研究領域に、加藤晃一教授、藤井浩准教授は生命動秩序形成研究領域に所属している。2012年度末に定年退職した桑島邦博教授の後任は、現在選考中である。