

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はなく、共同利用支援業務を滞りなく行うために技術職員を配置した。高度な研究を進めるためには研究開発が不可欠であり、研究職員との密な連携が必須である。

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る。施設の技術職員の技術の向上に努め、絶えず技術レベルの高い人材を確保するように留意している。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も重要である。長期戦略が必要な施設には教授を置くことで、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。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、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。協奏分子システム研究センター（2013年4月発足。分子スケールナノサイエンスセンターを改組）では、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研究を展開している。2017年4月に発足したメゾスコピック計測研究センターでは、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新しい計測手法の開発を目指す。分子機能の開発と機能を計測する研究を組み合わせることで、分子科学研究所の特徴を活かしつつ、新しい分子科学研究領域の開拓を目指す。

岡崎統合バイオサイエンスセンターは、岡崎3機関の共通研究施設として2000年に設置され、岡崎3研究所（基礎生物学研究所、生理学研究所そして分子科学研究所）の研究力を統合した成果をあげてきたが、本年度をもってその使命を全うする。2018年4月からは、新たに自然科学研究機構直属の組織として、「生命創生探究センター」が発足する。

分子研では、共同利用をより活性化し、大学の研究活動に貢献する施策として、新しい人事交流制度を開始する。これは、かつて法人化前に運用されていた「流動研究部門」制度を元に、現在の人事制度と我が国が置かれている状

況とに対応した新たな取り組みである。具体的には、以下の2つの制度を試し、分子科学分野のトップレベル研究と、研究者層の厚みを増強するための支援を行う。(1)特別研究部門では、分子科学分野において最先端の科学を切り拓く世界的研究者を招聘し、研究に専念できる環境を提供する。(2)流動研究部門では、分子科学分野において独創的な研究を行なっている大学教員をクロスポイントメントで招聘し、分子研の先端設備を使った研究に集中的に取り組む時間を提供する。次年度からの研究室設置に向けて、本年度は特別研究部門の制度を整えると同時に、運営会議の人事選考部会において、教授採用にかかる人事選考を行なった。

(川合眞紀)

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，電子ビームエネルギーが 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 UVSOR-II となった。さらに，2012 年には，世界最高輝度を狙って，光源加速器で唯一手つかずであった偏向電磁石をビーム収束機能を有する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 27 nm-rad から 15 nm-rad 程度まで下げること成功した。この UVSOR-III への改造に合わせて，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という最先端高輝度光源施設が完成した。UVSOR 施設における光源加速器の高度化は UVSOR-III で一段落し，現在，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している。なお，世界的競争力のある国内の最先端高輝度光源として，SPring-8 は X 線領域を，UVSOR-III は真空紫外～軟 X 線領域をカバーしているが，UVSOR-III の軟 X 線は低エネルギー部分だけで十分ではない。そのため，現在，広く軟 X 線をカバーする最先端高輝度光源の建設予算を量子科学技術研究開発機構が中心になって要求中である。実現が確実になった際には，利用分野として互いに相補的になるような調整を行う予定である。

ビームラインについては，海外から第一線の研究者が利用に来るような競争力のあるアンジュレータビームライン 6 本を中心にエンドステーションの重点整備を進めている。UVSOR の現在の光源特性では軟 X 線発光分光はもはや競争力がなくなったが，各種真空紫外分光，電子分光，軟 X 線吸収分光はまだ世界的競争力がある。このように今後，電子光学と X 線光学を中心としたエンドステーションの重点整備は UVSOR 施設の最重要な中長期戦略となるため，世界的な研究動向を把握しつつ，世界を先導するような高度な装置（導入後も開発要素が高く，共同利用するにも高度な技術支援が不可欠な装置）で成果を上げていく体制が不可欠である。そのため，研究職員として電子光学，X 線光学を専門にする主任研究員を制度化し，まず，電子光学分野の主任研究員が平成 30 年度から着任することになった。光源の高輝度化に従い，世界的には顕微光電子分光技術に大きな進展が見られるため，技術開発力に優れた主任研究員をコアにして UVSOR の光源性能をフルに生かせる新技術の開発・導入を検討する予定である。

現在，アンジュレータビームライン 6 本の内，1 本は次世代光源技術の開発として，渦光など電子ビームを用いた回折限界のコヒーレンス光発生とその利用法に関する多様な研究を進めている。2 本の可変偏光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，エンドステーションとして固体の角度分解光電子分光装置（スピン分解，ミクロンスケールの空間分解なども可能）が威力を発揮している。また，3 本の軟 X 線真空封止型アンジュレータラインは化学分野で特徴ある分光研究（溶液系や反応系のその場・オペランド観測，ミクロンスケール及びナノスケールの顕微分光なども可能）に利用されている。これらすべてにおいて海外の一線級の研究者による利用が進んでおり，国際化に成功している。

なお，エンドステーションとして国際競争力のある先端装置を整備しても先端である期間は 10 年程度であるため，最長でも 20 年を越えないうちに世界動向に沿ってビームライン全体の整理統合を進め，順次，世界最高輝度（1 GeV 以下の低エネルギーリングとして）の UVSOR-III 光源の特性を活かせるものに置き換えるなど，計画的に更新・高度化を実施していくことが肝要である。

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。現在、専任PIが5名（秋山教授、山本教授、古賀准教授、鈴木准教授、小林特任准教授）、兼任PIが6名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授、古谷准教授、正岡准教授）の計11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。

2017年度の特筆すべき研究成果として、機能分子システム創成研究部門では、光駆動型のデバイス開発に関する研究（山本グループ）が科学雑誌「*Advanced Materials*」や「*Nature Materials*」に掲載された。その他、階層分子システム解析研究部門の秋山グループや小林グループからは、国内外の大学や研究機関との共同研究成果が多数発表され、その一部は国内外のメディアでも多数紹介されるなど、その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

専任PIはセンターが掲げる目標に向かって、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、研究グループの居室を南実験棟の3階の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しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoSセミナー、CIMoSランチ、ワークショップなどを企画・実施し、それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

8-3 メゾスコピック計測研究センター

メゾスコピック計測研究センター（以後「本センター」）は、旧分子制御レーザー開発研究センター（平成9年4月設立）からの改組により、平成29年4月に設立された。分子科学研究所の研究対象は、広い意味での分子物質であることは設立当初から変わらないが、当初は一つ一つの分子の挙動に重点をおいて注目されていたのが、最近では様々な分子やナノ構造体などがシステムを作って発現する機能・特性の解明と制御、及び新しい機能を持つシステムの構築に重点がシフトしてきている。それによって、分子の物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すことが初めて可能になると考えられる。そのような新しい研究の方向性に対応する一つの方策として、分子科学研究所では平成25年4月に協奏分子システム研究センターが設立されたところである。

分子計測の先端的手法では、時間、空間、波長、パワーなどにおいて極限に向かう方向が精力的に推し進められ、大きな成果を上げてきた。そうした手法では、理想化された極限条件下で系に大きなエネルギーの擾乱を与えて素過程の挙動を解析する方法が一般的であった。現在もその方式の重要性に変わりはないが、このような従来型計測法の可能性と限界も少しずつ明らかになってきている。本センターでは、従来の手法とは一線を画した、繊細・広帯域・多次元の計測解析手法で分子システムの挙動・機能のありのままの姿に迫り、また低摂動・超精密制御で新たな量子機能を創出する、革新的実験法の開発が必要という立場をとる。新たな分子能力の創発の現場を、マクロ階層の強靱でロバスタな性質と、ミクロ階層の機能に富む特性が絡んだメゾスコピック領域に求め、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにするために、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新発想の計測開発手法を開発する。（ここでいうマクロ、ミクロ、メゾスコピックは、相対的な階層であり、扱う系によって実際のスケールは異なる。また空間だけでなく、時間領域についてもメゾスコピック領域が考えられる。）これらを通じて、分子の素過程が系全体の大域的な機能を生む機構を解明する研究などに主眼を置いて推進する。この目的のために、旧分子制御レーザー開発研究センターの研究業績・資産を引き継ぎながらも、分子科学研究所の基盤となる四つの領域から関連する研究を遂行する研究者の参画を得て、それらをまたぐ領域横断的なセンターとして設置することとした。これにより、同様な組織構成を取った協奏分子システム研究センターとともに、分子物質のシステムとしての挙動・機能を研究する両輪として研究活動を展開することが可能となった。

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして、以下の3部門と担当教員を置くこととした。

- (1) 物質量子計測研究部門：大森賢治（教授，光分子科学研究領域からの兼任），信定克幸（准教授，理論・計算分子科学研究領域からの兼任）
- (2) 繊細計測研究部門：岡本裕巳（教授・センター長，専任），平等拓範（准教授，専任）
- (3) 広帯域相関計測解析研究部門：飯野亮太（教授，生命・錯体分子科学研究領域からの兼任），藤 貴夫（准教授，専任）

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または兼任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法，増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコーピー・多次元解析手法，高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子

の能力とそれを司る物理過程を明らかにし、従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること、及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが、同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャンネルの共同研究を通じてそれを実施するほか、適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催することを計画している。また、さらに新たな革新的計測手法の開拓を念頭に置いた、萌芽的研究テーマとアイデアの発掘、可能性及び将来構想を議論する研究会等の開催も視野に入れている。旧分子制御レーザー開発研究センターでは、分子科学研究所と理化学研究所の連携融合事業「エクストリーム・フォトニクス」を推進する母体となり、その主な研究活動終了後も、合同シンポジウム等の活動を自主的に継続してきたが、本センターはこの活動の継続のための推進母体ともなることが想定されている。なお、旧分子制御レーザー開発研究センターは、発足当初、種々の共用機器を保有して施設利用に供していたが、現在ではそれらの機器とその利用は全て機器センターに移っており、それを受けて本センターでは施設利用は想定していない。

8-4 機器センター

機器センターは、先端機器の開発・維持・管理・運用，汎用的な物性・分析・分光機器の維持・管理・運用，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。先端機器開発に関しては，研究所内外の共同利用者と協力して，特色ある測定装置の開発とその共同利用を行っている。また，汎用的な化学分析機器，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・管理を行い，全国の共同利用者が分子科学研究を推進するための研究支援を担っている。さらには，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。また，文部科学省受託研究ナノテクノロジープラットフォーム（2012～2021年度）分子・物質合成の代表機関・実施機関の運営を担っている。機器センターには，センター長（併任），教授（併任）1名，専任技術職員5名，事務支援員1名，技術支援員4名が配置されている。また前述の2事業として，事務支援員5名，研究員4名（マネージャ，コーディネータを含む）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，「ナノテクノロジーネットワーク事業（2011年度にて終了）」で運営されてきた920 MHz NMR（2016年度にて利用停止）および高分解能電子顕微鏡（2015年度にて利用停止），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，「ナノテクノロジーネットワーク事業」の発展である「文部科学省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。ナノテクノロジープラットフォームは3つのプラットフォーム（微細構造解析，微細加工，分子・物質合成）と1つのセンターが運用しており，分子科学研究所は分子・物質合成プラットフォーム（全11機関）の代表機関として参画している。機器センターは，ナノテクプラットフォーム実施機関における共用設備運用組織として登録されており，2015年度からはナノプラットフォーム室を統合し，実質的な運用事務もすべて機器センターが行っており，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。2015年度から，機器センター所有の設備のうち所外公開装置はすべてナノプラットフォームにて運用する体制となった。これにより，X線回折，熱分析装置，ナノ秒・ピコ秒レーザーなどが新たにナノプラットフォームを通じた利用となった。また，理化学研究所より移管された2台のNMR装置（Bruker AVANCE80，AVANCE600）は2013年秋より本格的な供用が開始されており，安定に動作している。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。2013年度には，2012年度ナノプラットフォーム補正予算により，マイクロストラクチャー製作装置（マスクレス露光装置，3次元光学プロファイラーシステム，クリーンブース），低真空分析走査電子顕微鏡，機能性材料バンド構造顕微分析システム（紫外光電子分光），X線溶液散乱装置が導入され，マイクロストラクチャー製作装置は装置開発室が管理し，それ以外の3機器は担当教員のもと機器センターが維持・管理・運用し，既に多くの利用がある。

所外委員5名を含む機器センター運営委員会では，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。利用状況として，最近では年間200件程度の所外利用グループがあり，共同利用機関としての責務は十分に果たしている。さらに前述の2事業を推進しつつ大学利用共同機関法人としての寄与をより明確にすべきであろう。一方で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15年以上経過したもので老朽化が進み，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。その中で，2016年度，12年間運転してきた920 MHz NMR

装置の停止を決定した。国際的な競争力は無くなり、もはや維持費が高むだけの設備と判断した。これにより運営予算における経費圧迫が緩和され、能動的に更新プランを遂行することが可能となった。所内で機器導入検討委員会を立ち上げ、所内外の要望と需要を検討し、重点化の方向性と導入優先順位を議論した。2017年度は、低温微結晶X線回折装置の検出器と駆動部更新、MALDI質量分析器の更新を行った。

一方、中長期的にどのような機器ラインアップを維持するか改めて検討すべきであろう。次年度よりセンター長の交代と共に、運営体制の見直しも検討されている。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的機器。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。分子科学研究所の特色として「低温磁性」「構造解析」を柱とした分野強化を進める。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り、主任研究員制度の適用を検討する必要があるだろう。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、UVSORをはじめとする所内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が、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切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な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 件超に及ぶ。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。2016 年度からは、開発要素の大きな依頼は「協力研究」として受入れることとした。

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 の開発等に取り組んでいる。これに加えて、3D プリンタやシミュレーションなどのデジタルエンジニアリングの導入を進めている。

装置開発室の設備については、創設から 40 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。また、2017 年度にはワイヤー放電加工機の更新を行った。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。今後の世代交代を見すえて、2017 年度は技術職員を 2 名採用決定した。

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、さらに、研究の場の提供、ネットワーク業務の支援、人材育成等に取り組んでいる。2017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。

2018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」の2システムから構成されていたが、2017年10月に更新した計算機システムでは、「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合化した。本シミュレータは、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、研究室で所有する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。

高性能分子シミュレータは、主として日本電気製のLXシリーズで構成される1069ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは同一体系のCPU (Intel Xeon) およびOS (Linux3.10) をもとに、バイナリ互換性を保ち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4.096 PFLOPSで総メモリ容量219 TByte超である。LXシリーズのクラスタは以下の運用形態を念頭に置いて2タイプから構成されている。1つはTypeNと呼ぶノード単位の利用形態向けクラスタで、2.4 GHzのクロック周波数を持つ40 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード794台と、メモリ構成を768 GBに強化した20台からなるPCクラスタである。もう1つはTypeCと呼ぶコア単位の利用形態向けクラスタで、3.0 GHzのクロック周波数を持つ36 CPUコア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24 CPUコアにGPGPUを2基搭載した演算性能を強化したノード96台からなるPCクラスタである。インターコネクトは、Omni-Pathアーキテクチャを採用し、全台数を100 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。これらPCクラスタは9.4 PBの容量を持つ外部磁気ディスクを共有し、Lustreファイルシステムを構成している。これらとは別に前システムから継続運用しているPRIMEHPC FX10は、16 CPUコア、32 GBメモリの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。

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。

共同利用に関しては、2017年度は233研究グループにより、総数904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ポスト「京」開発事業（フラッグシップ2020プロジェクト）において、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（重点課題）のうち、とくにナノサイエンスに関わるアプリケーション開発「重点課題（5）エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において重要な役割の一端を担っている。また、同「重点課題（7）次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「萌芽的課題 基礎科学の

挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」, 科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」, 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>とも連携を行っている。これら5つの大規模並列計算を志向したプロジェクトを支援し, 各分野コミュニティにおける並列計算の高度化へさらなる取り組みを促すことを目的として東北大学金属材料研究所, 東京大学物性研究所, 自然科学研究機構分子科学研究所が共同で「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)」を運営しており, 2017年度はこれらプロジェクトに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「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」と2つのウィンタースクール「第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～」と「第11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 29 年度 システム構成 (平成 29 年 10 月 1 日以降)

超高速分子シミュレータシステム 4.096 PFLOPS

クラスタ演算サーバ TypeN	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	CPUCore 数：31,760 CPUCore (40 CPUCore × 794 ノード) 2.4 GHz
	総理論性能：2,439 TFLOPS (3,072 Gflops × 794 ノード)
	総メモリ容量：152 TB (192 GB × 794 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeNF (メモリ強化)	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：800 CPUCore (40 CPUCore × 20 ノード) 2.4 GHz
	総理論性能：61 TFLOPS (3,072 GFLOPS × 20 ノード)
	総メモリ容量：15 TB (768 GB × 20 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeC	
	型番：日本電気 LX 1U サーバ 110Rh-1
	OS：Linux
	CPUCore 数：5,724 CPUCore (36 CPUCore × 159 ノード) 3.0 GHz
	総理論性能：549 TFLOPS (3,456 GFLOPS × 159 ノード)
	総メモリ容量：30 TB (192 GB × 159 ノード)
クラスタ演算サーバ TypeCA (演算性能強化)	
	型番：日本電気 LX 4U-GPU サーバ 108Th-4G
	OS：Linux
	CPUCore 数：2,304 CPUCore (24 CPUCore × 96 ノード) 3.0 GHz
	総理論性能：221 TFLOPS (2,304 GFlops × 96 ノード) + 806 TFLOPS (NVIDIA Tesla P100 × 192)
	総メモリ容量：18 TB (192 GB × 96 ノード)

「京」用開発サーバ	
	型番：富士通 PRIMEHPC FX10
	OS：Linux
	CPUCore 数：1,536 CPUCore (16 CPUCore × 96 ノード)
	総理論性能：20 TFLOPS (211.2 GFLOPS × 96 ノード)
	総メモリ容量：3 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：DDN SFA14KX
	総ディスク容量：9.4 PB
高速ネットワーク装置	
	型番：Intel Omni-Path Architecture 100Gbps
フロントエンドサーバ	
	型番：日本電気 LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,536 GB (192 GB × 8 ノード)
運用管理クラス	
	型番：日本電気 Express5800/R120g-1M
	OS：Linux
	総メモリ容量：1,024 GB (64 GB × 16 ノード)

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、飯野亮太教授は生命動秩序形成研究領域に所属している。