

8. 研究施設等の現状と将来計画

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。メゾスコピック計測研究センター（2017年4月発足。分子制御レーザー開発研究センターを改組）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。

自然科学研究機構直属の組織「生命創成探究センター」は、2018年4月に発足した。岡崎3機関の共通研究施設として2000年に設置された岡崎統合バイオサイエンスセンターの成果をさらに発展させるべく、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活動を展開している。

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つの制度を試行し、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。本年度は特別研究部門に藤田 誠卓越教授(東大工教授)を迎え、錯体化学のフロンティア研究を推進いただいた。また、産学連携の強化がさげばれる中、分子科学研究所に社会連携研究部門を設置し、産官学の連携を活性化する試みを開始する。本年度は社会連携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担当教員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)

8-1-1 はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 35 年が経過した。その間、2003 年度の第一期高度化（低エミッタンス化，直線部増強 4 → 8 か所），2012 年度の第二期高度化（TOPUP 運転，挿入光源追加，エミッタンス 27 → 17 nm rad）を実施した。2 度の光源加速器高度化に成功したことにより，1 GeV 以下の低エネルギー放射光施設としては，世界最高性能を達成し（電子ビーム低エミッタンス），真空紫外光から軟 X 線領域をカバーする国際競争力をもつ放射光施設として運用している。世界的に見て技術革新の折に新施設が建設されていくことが常であるが，当時のいわゆる第二世代の面影を残している施設は唯一無二と言える。現在，ビームラインは 14 本が稼働しており，海外からの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ービームライン 6 本を中心に実験設備の重点整備を進めている。特に真空紫外分光，光電子分光，軟 X 線吸収分光は世界的競争力がある。今後は国際利用率の増加が求められる（昨年度実績：年間 220 件申請，のべ 1,300 名弱来所のうち，国際利用約 9% @ 先端アンジュレーターライン，60 名強）。

国内に第三世代放射光施設が SPring-8 のみであり，分子研ではその一旦を担う可能性を長期にわたり検討してきた。当時の計画（分子研レポート 2006 ~ 2012）として挙がっていたものは，① 1.5–2.5 GeV 級新第三世代リング，② 1 GeV 級超高輝度リング，③ ライナックによる軟 X 線自由電子レーザー，④ 小型エネルギー回収型ライナック，であった。2012 年度の高度化以降，これら大型計画は日の目を見ず，2018 年度になり，国内の第三世代施設計画（3 GeV 東北計画）が具現化し，分子研における既存施設の更なる高度化や新施設の建設案は非現実的となった。約 20 年後の分野展望を想像するのは難しいが，その時の UVSOR 施設の姿と国内（+アジア）における位置づけを真摯にかつ可及的速やかに議論していく必要がある。

本報告書は，UVSOR 施設運営委員会（2018 年 7 月，2019 年 2 月），UVSOR 将来検討ワーキング（2018 年 10 月以降逐次），UVSOR 利用者懇談会（2018 年 11 月）における意見交換を元に改訂してきたものである。また外国人運営顧問により意見聴取も行われている（分子研レポート 2016，2017，2018 参照）。本施設における中長期計画の概要を以下にまとめる。

【現状】

- ・真空紫外光から軟 X 線領域をカバーする世界的競争力をもつ放射光施設として運用（先端アンジュレーターラインと汎用偏向電磁石ラインの共存による大学共同利用機関としての共同研究推進）

【課題】

- ・世界的競争力維持のための先端実験機器の開発と利用者分野の拡張
- ・光源加速器の老朽化により現状性能の維持と安定供給に懸念
- ・技術職員の世代交代ができず中期的 10 年後の施設運営に懸念

【計画】

- ・主任研究員を軸として「運動量分解光電子顕微鏡」を導入し 5 年を目処に開発し，国際的に先端性のある共同利用展開
- ・加速器オーバーホールとシステム自動化による機能強化
- ・新光源機能の探査とそれを利用した評価法開発による機能強化

- ・ケミカルマシンとしての利用拡大のため炭素汚染対策による機能強化
- ・主任研究員、技術職員等の雇用と育成（人材交流、待遇改善）による機能強化

8-1-2 施設の現状と今後の計画

(1) 光源加速器

2度の高度化に成功し世界トップクラスの高い輝度（17 nm rad, 真空紫外領域まで回折限界光源）と完全トップアップ運転（60時間／週。ただし、木曜夜間の12時間中にトラブルがあっても補償しない）で安定した運転を行っている。しかし光源加速器関連は基本となる設備構成が古く、多くが老朽化した状態である。2017年から偏向電磁石の冷却水系統の漏水問題が発生しはじめている。同様な経年劣化による各機器の故障に随時対応している状況であるが、先端実験機器に安定した光源を供給し、国際的な共同利用環境を維持するためには、こうした光源加速器の老朽化設備全体の更新、抜本的なオーバーホールも検討すべき段階に来ていると言える。老朽化した既存の電磁石設備を更新するためには約1～2億円の費用が掛かる。現状の運転状況に合致した効果的な改修方法を検討している。また線形加速器の更新によっては、光源性能のパラメータ調整範囲に自由度が生まれ「多彩な光源（輝度、パルス形状、ビーム形状、その自在化・安定化）」を一層発展させる余地が生まれるが、更新には約10億円の費用が掛かるため昨今の経済状況と国策方針では現実的ではない。国内やアジア隣国の次世代コヒーレント放射光施設の動向に大きく左右されるだろうが、高強度パルスレーザーを用いた新型加速器などの次世代技術の開発動向に留意したい。基本的にUVSOR-III加速器は技術的な成熟期を迎えつつあるため、逐次、トラブルや老朽化対応をしつつ、システムの自動化等による加速器の安定運転技術の確立も検討する。

国内やアジア隣国の他施設の動向や次世代光源の台頭（第3.5世代、自由電子レーザー光源、卓上レーザー光源）により、連携、共生、競合といったベクトルが散逸し、施設の将来計画には大きな検討課題が立ちはだかる。多くのユーザーにとっては次期東北計画にあるような空間コヒーレンスや超高輝度（超低エミッタンス）に特化した施設による“美しい先端光源”が必ずしもベストとは限らない。第三世代施設の創始期がそうであったように、分野によっては高輝度特性が仇となり、使い熟すまでに長い年月を要した事実もある。一方、卓上レーザー光源の汎用化による研究舞台の台頭が急速で、放射光施設の在り方を問う意見もあるが、まだVUV帯でさえ波長可変性は乏しく、光源として放射光を置き換えるものでは無いだろう。一部の計測・評価分野においてユーザーの移動は想定されるが、本計画期間に技術革新があったとしても、共存時代がしばらく続いたうえで、棲み分けが進むであろう。それでも本施設のような低エネルギー加速器施設は紫外光領域でレーザー光源との協奏実験が発展していくことも予想できる。光源を相補的・融合的に使い熟す時代を想定した研究開発を継続することが望まれる。

トップダウン型で科学技術イノベーションを志向するSPring-8IIや東北放射光施設、あるいは自由電子レーザー光源やアト秒レーザー光源などの次世代光源施設だけで、全ての学術研究のニーズを網羅することはできない。今、光源加速器性能として完成域にあるUVSORが目指すところは、放射光施設の成熟した姿としての「安定した使い易い環境」の提供であり、「ケミカルマシン」としての利用展開を意識した、新たな分野開拓に繋がる研究支援であるといえる。分子研を基軸としたUVSOR施設の特徴であるケミカルマシンへの適合性を見定めた光源特性（輝度制御・時間ドメイン自由度の開発）などのR&Dと若手人材の育成は継続していく必要がある。

一方でUVSORの回折限界光源性能を有効に活用した新奇な光機能の開発は極めて独創的である。より大型の放射光施設では機動性に乏しくこのような光源研究推進は容易ではないだろう。BLIUを活用した光渦やベクトルビームなど新光源探査やその応用技術開発はUVSOR施設のユニークな特徴（小型・高性能）を効果的に活用した研究と捉えている。

(2) ビームライン設備：分光器

光輸送系（分光器）の陳腐化と経年劣化による性能低下も先端研究環境を維持する上での重要な検討因子である。特に UVSOR は「ケミカルマシン」として顕著な業績を上げてきたが、軽元素化合物、特に有機材料等の詳細な知見を得るためには、分光器の炭素汚染は極めて深刻な問題である。依然として多くの放射光施設は化学系視点の研究が少なく、ともすると炭素汚染は先送りの問題となりがちであるが、UVSOR では BL3U の汚染対策実績があり、積極的な対応ができています。予算の重点化により、他5つのアンジュレータラインにおいても同様の汚染対策を施した光学素子に置換していく計画が望ましい。一方で、硬X線領域では、構造生物学など顕著なコミュニティの広がりを見せているものの、特に物性や機能を議論するために極めて有効な波長帯（VUV～SX）をもつ UVSOR において、潜在的なユーザーを広範に上手く取り込んでいるとはいえない。本質的に汎用化が難しい波長帯であるという問題は残るが、中長期的にユーザーコミュニティのすそ野を拡張し、新たな学術分野を切り開いていくためにも、多種多様なユーザー（研究課題）に対応できる環境を実験設備と合わせて維持していくことが重要である。現在、分子研のネットワークを活用して未開拓である化学系のユーザーを招聘し、新たな利用展開が始まっている。今後、他施設の展開に留意しつつ、人事政策を含めて UVSOR の独自性とその方向性を見定めていく必要がある。

今後10年は、先端アンジュレータラインの重点化により、国際的な厳しい競争下にある先端実験ラインを提供し、大学共同利用機関として世界トップレベルの研究を支援する。同時に、汎用性の高い実験は偏向電磁石ラインで安定した実験環境を提供し、地方大学等の学生教育にも貢献するなどして、共同利用機関としてバランスのとれた支援を継続する。

更にその先10年後は、後述のスタッフ育成問題とも密接であるが、国内他施設やアジア諸国の動向によっては取捨選択による重点化も検討しておくべきであろう。例えばアンジュレータの更新による波長帯の拡張やスイッチング偏向操作が検討できる。また国策転換による基礎学術分野の充実支援により大型予算が措置されるようになれば、汎用ラインを縮小し、先端アンジュレータ6本をタンデム運用することを検討する。これは大規模改造になるが国際的には放射光施設の標準的機能である。現在12時間の運転から24時間運転へ移行し、昼夜で実験装置を切り替え、2交代制で先端実験環境を提供することも可能であろう。この場合、運転時間の倍増によるシステムトラブル増が懸念されるため、加速器のオーバーホールが必須の前提条件である。さらに現在の運転スタッフ人員では全く労力不足であるので、組織体制の抜本的な改革による対応が必要となる。一方で、後述の新規分野開拓の是非によっては、ポスト UVSOR 施設の存在意義が問われるであろう。11施設を抱えることになる日本放射光学会にて国内放射光施設のグランドデザインを検討する議論が開始されたが、同時に所内においても今後20～50年後の施設の在り方の議論を開始した。

(3) ビームライン設備：実験機器とユーザー利用

2018年度は6本のアンジュレータ（U）ビームラインにより、世界最高レベルの極端紫外光を提供している。この他、偏向電磁石（B）ビームラインからの放射光を用いた汎用の分光研究が定期的実施されている。近年 UVSOR ではUラインの高度化を進めており、申請週数はのべ約370週である（H29年度採択率：Bライン97%、Uライン71%）。また国際的な発信力の強化のために海外ユーザーの取り込みを推進している（H29年度海外利用率：Uライン9%）。またいくつかの偏向電磁石のビームラインもユーザーからの要望を受け各装置の高度化を順次計画・実行中である。

幸いにして中期レベルで施設運営費予算を運用することで、自助努力による設備投資が可能で、定期的にエンドス

ーション（実験設備）について、先端技術の開発動向に留意し、重点的に整備していくことが中期戦略となる。世界的な研究動向を把握しつつ、世界を先導する高度な装置で成果を上げていく体制を強化することが不可欠である。そのため研究職員として新たに主任研究員を制度化し、2018年度に1名（電子光学分野）を採用した。最近の動向として、光源の高輝度化に伴い世界的には顕微イメージング技術に注目が集まっており、2016年度から UVSOR では「運動量分解光電子顕微鏡：momentum microscope」を導入する計画を進めている。基本ユニットは2019年度冬頃に導入され、BL6Uにて調整を経たのちに協力研究による R&D を推進する（2019～2023年）。また国際的な先駆性を勝ち取るために新規技術の開発を進め、直入射偏向可変光電子イメージング実験による R&D を検討する（光源としては卓上レーザー光あるいはBL7Uのブランチ化を想定する。早ければ2020年度に20%程度のBL7U専有を想定）。本設備は二段階計画であり、分光器最適化の後、最終形態は運動量分解光電子顕微鏡に2次元スピン分解機能を付加した装置として、唯一無二の先端実験装置にする計画である（後期計画は最遅で2023年以降に開始）。電子状態測定 の代表機器である光電子分光装置は約20年毎に大きな技術革新が起こっているが、今まさに情報の次元アップという劇的な変革期を迎えている。実験情報の多次元化により、研究者の脳は全く異なる視点で刺激され、実験方法論そのもののパラダイムシフトが起こるであろう。こうした装置の存在により、海外からも一線級の研究者が来所し高インパクト成果を発信するようになれば、国内ユーザーの意識改革にもつながるであろう。

こうした実験設備が先端である期間は10年程度であるため、課題としては、予算確保により順次、計画的にエンドステーションを UVSOR の光源特性を活かせるものに更新していくことが不可欠である。本 R&D 以後の次計画はユーザーの動向に留意し、小規模施設の機敏さを有効に活用し、その都度、スピーディな決断と共に逐次対応すべきである。先に述べたように UVSOR は独特な「ケミカルマシン」として顕著な業績を上げてきたが、それでも現時点で化学系・生物系のユーザー数は極めて少なく、放射光を利用したまだ未開拓の実験対象が数多く残されているといえる。光源加速器性能が成熟期にある UVSOR では、こうした新規ユーザーの開拓により、分野の裾野を拡張していく使命があると考えられる。そのためには発信力の高い研究グループによる「有効性」のデモンストレーション実験が求められるが、現在その模索段階である。また新規ユーザーの利用障壁となる「使い易さ」の改善も最重要検討課題であると考えられる。現設備では BL3U における液体試料の軟 X 線吸収分光は、化学系ユーザーへの親和性が高い。原子構造の議論で終息している多彩な未評価物質群について、電子構造の視点でケミストリー研究を展開することが可能と考える。標的テーマによっては分光器設備を含めた更新（輝度制御、時間ドメイン自由度、安定化）が必須である。また BL4U における軟 X 線透過顕微鏡による3次元物性情報は、材料系ユーザーからの利用要望が高く、世界的にもユニークな存在として良く知られたビームラインとなった。これらのビームラインの最適化を「ケミカルマシン」のミッションに従い最優先に検討する。以下に各 U ラインの現状を記す。

・タンデム APPLE-II アンジュレータ高次高調波コヒーレント光源開発用ビームライン（BL1U）

加藤らが外部資金（文部科学省量子ビーム基盤技術開発プログラム）を得て建設した。FEL、光渦やベクトルビームなど新光源開発とその利用の開拓を目的とし、これまで協力研究の形で外部の利用も受け入れてきたが、光源技術が確立されつつある紫外・真空紫外線、ガンマ線の照射実験については、2018年度後期から施設利用で受け入れることとなった。なお、その他の利用については従来通り協力研究で受け入れる。

・真空封止アンジュレータ軟 X 線ビームライン（BL3U）

液体試料の軟 X 線吸収分光（XAS）測定を可能にしている、実環境下の液体試料のその場・オペランド観測が行える。

2017年度後期から施設利用に移行した。現在、液体試料だけでなく、電気化学セル、マイクロ流路セル、レーザー照射による光化学反応セルの開発を行うことで、液相の様々な化学・生命現象に、XAS 測定の適用範囲が広がっている。そのため、触媒分野、生命分野などの多方面からのユーザー利用があり、その利用者数は増加している。また、海外の第三世代先端光源施設（BESSY-II, ALS, MAX-IV など）では不可能な実験を可能にしていることにより、ドイツ BESSY-II（協定あり）、ベルリン自由大学（協定あり）、フィンランド・オウル大学（協定あり）、米国 ALS、フランス SOLEIL、中国合肥 HESYRL などの、海外の研究者による施設利用も実施している。

・真空封止アンジュレータ軟X線顕微分光ビームライン（BL4U）

易損傷試料に適応可能な軟X線透過顕微鏡（STXM）として世界的にユニークな実験を実施できる。フォトンフラックスおよび空間分解能向上を目的として、低分解能回折格子を導入した。また最高分解能を実現する最外輪帯幅 18 nm の Fresnel Zone Plate のキャリブレーションを行なった。今後、Li 端など低元素測定への対応を目指し、高次光除去に向けてフィルターセクションを出射スリット下流に設置し最適化調整を進めている。

・APPLE-II アンジュレータ高輝度固体光電子分光ビームライン（BL5U）

固体の2次元スピン分解角度分解高分解能 ARPES 装置。2018年度前期にマイクロフォーカス用ミラーの設置を行い 23×40 μm にビームスポットを絞ることに成功した。後期にアナライザーをメーカーに送り、deflector の最適化を行うことで微小試料の測定ができるようにする。またスピン分解光電子分光に向けてターゲットチャンバーの準備中である。後期にターゲットからの反射を得ることができるよう調整を行う。

・真空封止アンジュレータ軟X線ビームライン（BL6U）：協力研究用ライン

固体・表面角度分解光電子分光装置では、2次元原子・分子薄膜の電子状態に関する研究について、所内および国内外研究者を招聘しての共同利用研究を進めている。2017年度パーマロイ製の測定槽を新たに導入し、真空度と作業効率を大幅に向上させた。また、国際競争力の面で、海外ユーザーから強い改善要望が出ていたため、広い波数空間でのマッピングができるよう電子エネルギー分析器を更新し、現在性能評価中である。将来構想として前述の運動量分解光電子顕微鏡の導入を計画している。軟X線励起の価電子帯光電子分光・エネルギー掃引光電子回折と極紫外光励起の（直入射）偏向可変価電子帯光電子分光・分子軌道トモグラフィーという独自の実験ステーションとなる予定である。

・APPLE-II アンジュレータ真空紫外超高分解能角度分解光電子ビームライン（BL7U）

固体の低エネルギー角度分解高分解能 ARPES 装置。より広範な物性探査への拡張を目的として、高精度の低温・高分解能での測定を目指し、リニアスケールを設けた XYZ ステージと極低温マニピュレータを新規に導入した（所内設計）。十数 μm の精度で試料位置の微調が可能になった。また試料位置で 5 K まで冷却が可能となり、エネルギー分解能が実測可能な範囲で 5 meV を達成した。施設で高い申請競争率をもつラインである。

(4) 施設スタッフと運営体制

施設を維持していく上で、スタッフ体制について「人員の増補」と「世代交代への対策」が急務である。2017年度は転出 10 人、施設（准教授 1、技術職員 1、技術支援員 3）施設外（教授 1、助教 4）に対して、2018年度に 2

名補填で現員，施設 21（教授 1，准教授 1，主任研究員 1，助教 4，技術職員 11，技術支援員と事務支援員 3），施設外関連教員 4（施設長 1，教授 1，助教 2）である。

これは歴代最少人数体制で，同規模の他施設と比しても不十分な人数体制といえ，ユーザーコミュニティから将来について不安視する声もあがっている。少なくとも先端アンジュレータ挿入光源ラインには専属研究者が配置されているべきであるが，現在は各研究者が複数を兼務して賄っている。有能な技術職員の採用を実現するためには，待遇改善が一つの解決策であるが制度改革には多くの障壁が想定される。更に深刻な問題として，約 10 年後には 2 名を除き技術職員は定年を迎える。引継の教育時間を考えると，残された時間は少ない。人口減もさることながら，法人試験での希望者も少なく，魅力のある職種として技術職員を如何にしてスカウトできるか，放射光コミュニティ全体の大きな問題である。また今後増加していくと考えられる国際的な対応を視野に入れると，外国人スタッフ雇用の検討も必要である。

一方で業務内容を整理し，主任研究員を増補することで人材を確保することも視野に入る。運転にかかる簡易業務は外部委託あるいは技術支援員の雇用で対応することもできるだろう。主任研究員を補填すべき専門分野としては，光電子（済），加速器光源，X線光学，VUV 光学，スピン物性，制御システム，情報処理等があげられる。特に少数で運営するうえで，制御システム機能の重点化は有効であろう。また情報処理は，セキュリティ対策が叫ばれる中，施設としての自己防衛機能としても重要であるが，学術的にも実験スタイルとして大規模データを取り扱う時代であり，共同利用機関としてユーザーへの専門的な対応や支援が求められる。5 年程度のプロジェクトで先端設備の R&D を実施するうえで，人員不足は大きな問題である。事業の効果的推進のために主任研究員を技術的に補助するために，特任研究員の雇用によるプロジェクト運用を開始する。

現在，UVSOR を利用する所内ユーザー数（研究系 PI）も歴代最小規模である。所内ユーザーの活性化により，積極的な外部発信が求められる。軽元素 XAFS，偏光・蛍光スペクトル，時間分解分光，放射線損傷，軟 X 線イメージング（吸収，発光，光電子），VUV 共焦点イメージング，テラヘルツ分光などの実験手法の発展を牽引できるスタッフが必要である。水を含んだ試料系など，分子生物学，生化学の分光学やイメージング研究を如何に切り開くか，分子科学に律した優れた研究テーマの創成を狙う。これにより分子研内にとどまらず，まずは近隣の生理研，基生研，生命創成探究センターを活性化する。硬 X 線による「構造」評価は放射光を使い熟したことにより成熟した。次は UVSOR が得意とする領域での量子デバイス，薄膜界面制御，界面電気化学，ナノ触媒，自己組織化，分子認識，生体模倣などの種々の応用展開を見据えた「機能・物性」評価へ向けた研究展開が待たれる。

UVSOR 利用者懇談会では，次世代を担う優れた人材を育成する機会が欠乏している点が指摘され，本施設での対応を要望する意見があった。多様な視点で学部生・大学院生を広く教育しなければ，科学技術イノベーションを推進できる人材を確保することは難しい時代である。分子研の客員教員部門に加え，新規事業である流動研究部門（クロスポイント制度）による人材交流制度の有効利用を検討したい。

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3名（秋山教授、山本教授、鈴木准教授）、兼任PIが7名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授、古賀准教授、小林准教授、正岡准教授）の計10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。

2018年度の特筆すべき研究成果として、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「*Nature Photonics*」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、「*Scientific Reports*」誌等に国内外の大学や研究機関との共同研究成果が発表され、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トな性質と、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、平成29年4月の発足時に以下の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併任），信定克幸（准教授，理論・計算分子科学研究領域からの併任）
- (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併任），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併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。なお、信定准教授は平成30年1月に残念ながら逝去された。平等准教授は平成30年10月に理化学研究所(放射光科学研究センター)に転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方、平成30年5月には杉本敏樹准教授が物質分子科学研究領域からの併任として就任した。

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、所員ならびに所外の協力研究・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。一方、大学連携研究設備ネットワークの幹事機関として、機器センター所有の多くの機器を設備ネットワークに登録・公開し、この事業の運営を主導し事務局を担当している。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。2018年度は、センター長（併任）、専任技術職員5名、技術支援員3名、事務支援員1名が配置され、これに加えて、前述2事業において、特任研究員4名（マネージャー・コーディネータを含む、うち1名は年度途中退職）、技術系特任専門員1名（年度途中退職）、事務系特任専門員3名（うち1名は育児休暇中、1名は年度途中退職）、事務支援員1名、事務系派遣職員2名（うち1名は年度途中退職）を配置している。

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）および高分解能透過電子顕微鏡（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10機関）の代表機関として中核を担い、実施機関としても参画している。機器センターは、ナノテッ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。2017年度には、他では利用しにくく外部利用頻度の高い極低温・微結晶単結晶X線回折の検出器の更新、マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI-TOF）質量分析計の新規導入、示差走査熱量計（DSC）、熱重量計（TGA）の新規導入などを行い、2018年度は、光励起状態の時間分解高磁場パルス電子スピン共鳴測定を可能にするための大強度ナノ秒レーザー・OPOシステムを新規導入した。また、オペランド多目的粉末・薄膜多目的X線回折装置および高速原子間力顕微鏡装置の次年度納入を確定し作業を進めている。

2018年度は、特別研究部門に着任した藤田 誠卓越教授の主導のもと、結晶スポンジ法による分子構造解析を始動させた。この方法は藤田卓越教授が発明したもので、結晶化できない分子をホストフレーム（スポンジ）形成分子がこれを取り込む形で結晶化させ、単結晶X線構造解析を行うという画期的な手法である。自然界や医薬用分子の多くは結晶化が困難で詳細分子構造が未知のものが多く、既に極めて多くの実施可能性問い合わせが届いている。次年度より本格的な公開を予定している。

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共同利用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、920 MHz NMR装置などの一部装置の停止を決定した。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できるようになり、2017、2018年度は上述の新規導入が可能となった。

中長期的にどのような機器ラインアップを維持するかを検討については、次の3つのタイプに階層化することを想定する。

- 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。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る。分子科学研究所の特色として「低温」「オペランド」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も視野に含める。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、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である。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。
- 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。

これらを機能的に運営するため、次年度から組織改編を行うことが所長主導で決定された。機器センターに、機器センター長のもと、分析チーム、合成チーム、共同利用チームの3つのチームを据え、分析チームのチームリーダーに中村敏和現准教授、合成チームのチームリーダーに鈴木敏泰現准教授が配置換される。この2名のチームリーダーが協力研究を中心とした質の高い研究に取り組み、また、各チームの統括や新規導入機器策定等を行う。共同利用チームは、2名のチームリーダーと3名の特任研究員（マネージャー・コーディネータ）が大学連携研究設備ネットワークとナノテクノロジープラットフォームの運営を担う。次年度の体制は、センター長、チームリーダー2名、専任技術職員8名（分析チーム5名、合成チーム3名）、特任研究員3名（共同利用チーム）、技術系特任専門員1名、事務系特任専門員3名、技術支援員2名、事務支援員1名、技術系派遣職員1名、事務系派遣職員1名（いずれも特任と派遣職員は大学連携研究設備ネットワークとナノテクノロジープラットフォームでの雇用）を計画している。

また、次年度は、明大寺キャンパスの装置開発棟・極低温棟・レーザー棟の建物改修が行われる予定であり、これまで点在していた機器センター機器室を極低温棟と実験棟一部に集約し、新規機器導入とともに飛躍的な機能向上を図る計画である。

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・開発依頼受付を 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、CAM 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、2018 年度は技術職員を 3 名採用した。

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。2018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12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、旧来「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きたが、2017年10月の更新以降「高性能分子シミュレータ」の1システムに統合した。本シミュレータでは、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。

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1075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 (Linux 3.10) をもとに、バイナリ互換性を保ち一体的に運用される。システム全体として総演算性能4.096 PFlopsで総メモリ容量221 TByte超である。LXシリーズのクラスタは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26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コア、192 GBメモリ構成のノード159台と、24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。インターコネクタは、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。

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など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1/3強を占めている。

共同利用に関しては、2018年度は248研究グループにより、総数923名（2019年2月現在）に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した極限の探求」、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、2018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「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」と2つのウィンタースクール「第8回量子化学スクール」と「第12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30年度 システム構成

高性能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
コア数	31,760 コア (40 コア × 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
コア数	1,040 コア (40 コア × 26 ノード) 2.4 GHz
総理論性能	79 TFlops (3,072 GFlops × 26 ノード)
総メモリ容量	19 TB (768 GB × 26 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
コア数	5,724 コア (36 コア × 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
コア数	2,304 コア (24 コア × 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)
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)
運用管理クラスタ	
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 生命創成探究センター

生命創成探究センター（Exploratory Research Center on Life and Living Systems = ExCELLS）は、自然科学研究機構の更なる機能強化を目指すために、岡崎統合バイオサイエンスセンターを中核として機構の組織を再編・統合して2018年4月に設置された機構直轄の組織である。本センターでは、「生きているとは何か？」という人類の根源的な問いの解明に向けて、生命の仕組みを観察する新たな技術を開発するとともに、蓄積されていく多様な情報の中に隠されている意味を読み解き、さらに合成・構成的アプローチを通じて生命の基本情報の重要性を検証する活動を行っている。こうした「みる・よむ・つくる」のアプローチを基軸に、極限環境生命の研究者とも協力しながら異分野融合型の研究を進め、生命の設計原理を探究する。この目的のもとに、国内外の大学・研究機関の連携によりコミュニティ横断型の共同利用・共同研究を推進する。

生命創成探究センターは、センター長の統括のもとに、創成研究領域と極限環境生命探査室から構成されている。創成研究領域は「みる・よむ・つくる」の3つのアプローチ法を開拓するとともに、それらを1つの流れとして捉え、生命のダイナミズムの本質に迫る研究を展開する。

「みる」アプローチでは、革新的な計測手法を開発し、複雑な生命システム全体の中における各構成要素のダイナミックな振る舞いをありのままに観測する。さらに、その背景にある物理化学的諸量の変化の可視化を行う。

「よむ」アプローチでは、計測・観測を通じて蓄積されていく多様な生命情報の中に隠されている意味を解読し、理論体系化し、予測するための情報科学・理論科学・計算科学的アプローチを発展させる。

「つくる」アプローチでは、生命システムを実験的に構成すること、あるいは計算機上で構築することを通じて、外部環境の変動の中で秩序創発していくロバストな生命の本質を統合的に理解することを目指す。

すなわち、「みる」ことで学ぶ生物研究から「よむ」さらには「つくる」ことで学ぶ生命科学への流れを実現し、上記の3つのアプローチを一体として研究を進めていくことで、ダイナミックな生命の設計原理の解明を目指す。こうした研究の発展に資するため、多様な共同利用・共同研究を実施する。例えば、本センター以外の研究機関に所属する複数の研究者が研究グループを構成したうえで、新規な研究手法・測定手法の開発等を通じて分野横断的な研究を推進する連携研究グループが活動を開始している。

一方、極限環境生命探査室では深海、地下、極地、大気圏外などにおける生命体の活動を探査・解析することを目指して生命の始原形態と環境適応戦略を理解する研究を実施する。既に海洋研究開発機構と連携した研究グループが活動を開始している。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、加藤晃一教授がセンター長をつとめるとともに生命分子動秩序創発研究グループと極限環境生命分子研究グループを主宰し、青野重利教授が金属生命科学研究グループ、奥村久士准教授が生命分子動態シミュレーション研究グループ、古賀信康准教授が生命分子創成研究グループをそれぞれ主宰している。