

## 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は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。

教員の流動性が高い分子科学研究所では、着任後の研究立ち上げスピードの速さが求められる。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り、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。また、分子研転出後もこれらの施設を利用することで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も、共同利用設備として施設の管理下でさらに広くの共同利用に供されるケースもある。このように、研究所にとって施設の充実、研究職員が流動していくシステムそのものを支援する意味もあり、施設の継続的な運営が重要である。高度な施設運営を維持するために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。

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、全国規模でナノテクノロジーネットワーク事業や大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、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。

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、2018年に新しい人事交流制度を開始した。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。特別研究部門では、（1）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）分子科学分野において独創的な研究を行っている大学教員をクロスア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。2020年度は特別研究部門にクロスアポイントメント教員として木村真一教授（大阪大学大学院生命機能研究科教授）が着任され、化学マシンとしてのUVSORの運用強化に尽力している。

（川合真紀）

## 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」を發してから 37 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。世界的に見て技術革新の折に旧施設は廃止され，新施設が新地に建設されていくことが常であるが，UVSOR では 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，回折限界光源に迫る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。2 度の高度化で生まれ変わった現在の UVSOR-III は，別の見方をすれば国内で最も若い放射光施設であり，国際的にみても特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では希少な第三世代放射光施設で，今後の国際連携の発展が期待されている。また中型放射光施設として建設が決定した東北リング（仮）と大型放射光施設 SPring-8 とともに国際的な先端放射光施設としての研究主導が求められる。一方，国際研究力の維持には高い光源性能に見合う実験設備の整備が不可欠であるが，UVSOR-III として 8 年目を迎え，全 14 ビームラインのうち 6 基の先端計測放射光ビームライン設備が成熟し，主として材料科学，光化学，環境エネルギー分野の先端の実験成果の収穫期に入った。また UVSOR の高い光源性能とコンパクトな運転体制の特徴を活かした，独自性の高い特徴的な研究開発が行われており，新規量子ビーム源の開発や回折限界光源の特性を利用した放射光コヒーレンスの科学も推進している。その他の標準共同利用ビームライン（8 基）においても，国際的に唯一無二の可視光から真空紫外光まで連続した波長可変な分光システムが稼働しており，材料開発研究にて貴重な成果が発信されている。

先端研究の活動力の維持と同時に，今後の放射光利用においてユーザーコミュニティの拡張と増強が重要であり，特に歴史的に放射光利用が普及していない化学・バイオ系への分野展開が国際的な命題である。こうした潜在的放射光利用者となりうる同分野を長年にわたり支えてきた分子科学研究所への期待は高い。さらに 30 余年来にわたり積み重ねられた貴重な学術資産と，共同利用環境の継続的支援を視野に入れると，次期施設の建設計画（UVSOR-IV:仮）を算段する時期にある。本施設規模（小型放射光施設）の光源加速器技術と性能は既に概ね極限化されており，さらなる光源性能の向上を含めた加速器設備の抜本的な改修が必要であるか否かの判断には，既存技術の成熟度に応じた導入の是非，あるいは根本的な技術革新など次世代技術の登場が待たれる。そのため現時点で検討しうる次期施設の形態について，方向性としては大きく 2 つに分かれる。①現状のリング型光源加速器性能を基本構造とし，ビームライン実験設備の高度利用に特化することで未踏の学術を広く開拓する先端施設，②低エネルギー光領域の光源性能を究極的に極限化し，未踏の光源を利用して選択と集中により学術を開拓する先端施設。前者は爆発的にコミュニティ拡大に繋がるようなロールモデルが不可欠であり，光源として放射光のみならずレーザー光源を組み合わせるようなフレキシブルかつ自由度の高い高度研究支援環境のための設備設計が重要であろう。後者はレーザー加速器など光源加速器技術の開発とその利用法の斬新な提案が求められ，国内の他施設の建設計画に留意する必要がある。いずれにせよ，現状の UVSOR-III は次施設建設までへの研究活動の持続性を担保することが責務で，現有の先端光源性能および最適化光源性能を少なくとも今後 10 年程度維持することによる，先端的量子ビーム実験環境・設備の継続的な提供とその高度化・汎用化による計測分野開拓が最重要課題である。UVSOR の国際的なコア・コンピタンスをまとめる。

- 1) 国際的に希少な低エネルギー帯（物性機能発現領域）をカバーする世界最高水準の高輝度 VUV 光源とその学術利用
- 2) 易放射線損傷試料に最適化された放射光源と先端分析システムを提供する国際的に希少な実験施設
- 3) 国際的に唯一無二の赤外光から真空紫外光の連続波長可変分光による材料評価システムの提供

## 8-1-2 光源加速器の現状と将来計画

将来計画の基本的な考え方は過去レポート 2018, 2019 もご参照いただきたい。次年度はユーザーコミュニティの意見聴取とともに、具体的な次期施設の形態を具現化する作業を中心に、次期施設建設計画の検討を重ね内容を充実させていく。

現有の光源加速器については、従来の 15～20 年の設備更新サイクルを鑑みると、2012 年度の高度化で設置された設備群の経年劣化から数年以内に更新時期を迎えることを想定する必要がある。更には当初建設期 1983 年来、未更新の基本設備も残されており、老朽化設備全般への対応が緊迫した課題である。設備トラブルによる不測の運転停止をさげ、国際的にも希少かつ競争力のある貴重な極端紫外放射光源を安定供給し続けることで、多彩な分野の学術発展に資する大学共同利用機関の使命を果たす責務がある。このうち数億円規模の高額設備以外については逐次更新を行ってきたが、過去の履歴から計画的に更新可能な老朽設備（電磁コイル、シンクロコンデンサ、ストレージコンデンサ、クライストロン、シンクロ偏向ダクト真空ベローズの一部）は、今後 10 年間を目安に所長裁量経費によりその約 6 割について更新完了させることを決定し、2019 年度より順次進めている。緊急性の観点で当面の設備トラブルへの対処としては、これらの更新作業ではほぼ十分と判断する。しかしシンクロ偏向ダクト残分、シンクロ電磁コイルが設立以来 38 年間未更新のままとなり、不測の事態は残される。また今後 10 年をめどにシンクロ電源、電磁石電源、各種高圧電源等が二度目の更新時期を迎え、定期的な運営資金準備の観点で大型設備の持続性担保は根本的な課題である。さらに付帯する空調設備、冷却設備や放射線管理設備は、UVSOR 施設棟の改修工事のタイミングも併せて検討する。建屋も 1983 年の建設であり耐久年数の点で改修時期が迫っている。これらの山積する改修要素から次期施設建設計画がコストパフォーマンスの点で有効であると考えている。

一方、光源グループによる新規光源探査や量子ビーム開発とその利用にかかる研究は、今や UVSOR の独創性の代名詞とも呼べるもので、多彩な学術利用あるいは産業利用の展開が期待できるため、今後も精力的に推進する。広島大学へ転出した加藤教授にはクロスアポイントメント制度により、光源開発研究を継続していただく。2020 年度、平准教授が着任し、パルスガンマ線発生と陽電子消滅によるビーム利用研究を推進することとなった。そこで「将来検討ワーキング」を開催し、BLIU の今後の展開について議論した。BLIU での研究テーマの多様化にともない作業環境の改善が必要で、レーザー光源の光学ハッチの移設が提案され、旧 BL8B 跡地へと移動することとした。作業は今年度末のシャットダウン期間を利用する。これにより BL1B の実験スペースとの干渉問題が解決し、BLIU での作業性が向上すると共に、BL3U へのファイバーレーザーの取り回しなど今後の拡張性に長ける仕様となる。また強力なレーザー光源の導入で現在の 150 倍の強度のガンマ線が発生可能だが、放射線の遮蔽について保護システムを構築することとなった。

## 8-1-3 ビームラインと利用状況：コロナ禍対応

ビームライン実験設備については、10 年程度の国際的な先端研究の開発サイクルに後れを取らぬように、各ビームラインの利用状況と国際動向を踏まえ、設備の順次高度化が必要で、施設予算と外部研究費等により開発研究を継続している。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 線吸収分光は物性・機能研究の点で世界的競争力がある。数年をかけて開発が終了したビームラインは施設利用課題としてユーザー利用が開始されているが、今後は国際利用率を増加させる方針である。また標準的設備であるベンディングラインにおいても、国際的に唯一無二の波長帯をカバーする光反射・吸収測定設備を提供しており、貴重な

材料物性評価の成果が発信され続けている。ベンディングラインは設備の希少性と稼働率を鑑みて将来計画を立て、アンジュレタ光源の先端ビームラインとのバランスを取りつつ運用を継続していく。今年度はベンディングラインの在り方について「将来検討ワーキング」を開催した。特にBL1BとBL6Bの赤外テラヘルツビームラインとBL3BとBL7Bの真空紫外（VUV）ビームラインを利用している外部の先生方をお招きし、これらのビームラインの今後について意見交換をした。またクロスアポイントメント制度でUVSORを利用されている高谷准教授（京都大）と木村教授（大阪大）からも関連する話題をご提供いただき、UVSORでの利用展開をご説明いただいた。

2020年度はコロナ禍の感染拡大防止対策により全世界的規模で研究活動に支障があった。放射光施設ではそれぞれの地域環境とユーザー環境に応じた対応がとられたようである。UVSOR施設では分子科学研究所の活動制限方針に従い可能な限り研究活動を停止させない、研究者の計画的な実験活動を支援するという大方針で年間運営を行った。具体的には以下の方針をとった。

・2020年度に既に配分された前期ビームタイムはそのまま有効であり、所属機関の規定に準じて来所可能であれば課題を実施することができる。

- ・全ての前期課題を後期課題へ移行し、例外無く採択する。
- ・前期に実施しても後期ビームタイム配分には影響しない。
- ・通年申請課題における前期キャンセル分の補填は原則として無し。
- ・後期の新規利用申請は停止し、残ビームタイムの配分は特別随時申請課題にて対応する。

結果として、ほとんどの申請課題で何某かの実験を実施することができたが、5件（うち海外申請3件）の申請課題については全く都合を調整することが叶わず、課題実施不能と終わった。実施された海外申請についてもユーザーの来日はほぼ不能であったため、多くの課題は所内研究者による代行実験となった。また来所人数を抑えた三密回避の目的と所属機関の派遣指針の影響により、大学院生の来所者数が昨年度比で7割と大きく減少した。今回のコロナ禍では課題実施数の観点では確かに大きな影響はなかったと総括できるが、実施された研究の「質」の面では、のちのち影響はあったと評価されるのではないかと危惧する。実質的な実験従事者の規模縮小やメンバ変更による実験成果への影響、あるいは長期的には学生の経験機会が奪われたことによる人材育成への影響が懸念される。一方で、DX志向の強まりにより自動化・遠隔化・標準化などの技術開発が世界中で活発となった。硬X線を利用した構造解析は自動化がかねてより進んでおりコロナ禍において功を奏したようであるが、VUV-軟X線領域では「真空」の技術的制約により難題を抱えている。それでもこれを機にVUV領域でのDX関連の技術開発が各施設で開始され競争が激化するであろう。国内施設間の情報共有など連携強化の側面が重要視されている。UVSORにおいてもベンディングラインで技術職員が代行測定を担当する試みを実施した。汎用的な設備のDX化に有効であるだけでなく、技術職員の意識改革にもつながったと思われる。試行的にBL3Bにて岩山助教が中心となり、DX要素技術の更新を開始した。

#### 8-1-4 中長期計画

2018年度より、UVSOR-IIIの後継となる次期VUV放射光施設の建設に関する議論が進められていたが、今年度は本格的な議論を開始し所内を中心に積極的に意見交換を行った。中期計画としては前述のように特定の先端手法や光源開発、既存の先端設備を利用した成果発信が最重要課題であり、副次的にDX化の要素技術開発を行うことが求められる。これらは長期計画としての次期VUV放射光施設の建設に向けたマスターピースにもなるものである。特に本施設のオンリーワン要素の強化が最重要課題で、新奇光源開発とその応用展開に加え、設立当初に萌芽的に掲げら

れた「ケミカルマシン」の旗印を確固たるものとし、長年蓄積された計測ノウハウを元に、独創的に放射光の化学利用を推進する研究施設として「ケミカルマシン」の完成を目指したい。そのためには高度研究者支援パッケージングとして、分子科学研究所の全面的な協力が不可欠で、次期 VUV 放射光施設を中心とした「分子機能・材料物性計測によるマテリアル科学の研究拠点」の構築を目指したい。

UVSOR-III 光源は THz, 赤外, 真空紫外線から軟 X 線領域をカバーするため、物性・機能研究に最適化されている。BL3U では、長坂助教らが構築した溶液の軟 X 線分光による電子状態測定を通じた化学反応の追跡が可能であり、新規ユーザーを巻き込みつつ精力的に行われている。今後はより広範な分野への研究展開を意識して、クロスアポイントメント制度を活用した効果的な共同研究展開と人材育成を推進したい。BL4U は大東助教らによる軟 X 線分光の顕微イメージングが可能であり、産業界の要望が強く、リチウム端の X 線吸収イメージング (STXM) に世界で初めて成功するなど共用を含めた多彩な利用展開を見せている。BL5U, BL7U では田中准教授らにより、光電子分光法を基軸とした先端装置開発と、多彩な新規物質群の (スピン) 電子状態・電子構造研究が推進されている。同じく光電子分光法を軸に物性研究に注力している HiSOR 施設との施設間連携が重要である。UVSOR では STXM イメージング装置の開発に次ぐ中期計画として、光電子分光ビームラインの重点整備計画があり、2019 年度より松井主任研究者らが中心となり、イメージング装置として次世代型の光電子運動量顕微鏡 (Photoelectron Momentum Microscope: PMM) の開発を BL6U にて推進している。2020 年 2 月にテスト測定を開始し、2021 年度末にはスピン検出機構を含めた拡張増設を完了させ、国際的に唯一無二の実験設備を構築する予定である。今後は、時間軸を研究課題に紐込むための技術開発を推進できる主任研究者やクロスアポイントメント制度による効果的な共同研究展開と人材育成を推進したい。BL1U では平准教授、加藤教授 (クロスアポイントメント) らにより、コンパクトな高性能 UVSOR-III 光源を用いて、アト秒コヒーレンス制御や短パルスガンマ線発生など、極めて独創的な研究が進められている。国際レベルで本施設でしか実施できない種類の研究であり、今後は開発された量子ビームの各種計測への応用展開が待たれる。UVSOR の施設としての特徴は、小型で小回りの効く運用体制にある。今後もスピード感のある光源開発研究や、先端装置の開発研究の展開を維持する。

中長期的な視点で国内における 10 の放射光施設の役割分担と連携強化が求められている。中でも学術系 3 施設 (UVSOR, PF, HiSOR) の果たす放射光関連分野の学術基盤としての役割は今後も欠かせず、3 施設の基盤強化とネットワーク化を進めながら、技術革新や人材育成・輩出の中核的役割を果たす必要がある。今年度はコロナ禍により活動は停滞しているが、次年度はビームライン開発研究のワーキングを立ち上げ若手研究者と技術者を中心に議論が開始される予定である。

本報告は、UVSOR 施設運営委員会 (2018 年度より年 2 回)、UVSOR 将来検討ワーキング・小委員会 (2018 年 10 月以降逐次)、UVSOR 利用者懇談会 (2018 年度より年 1 回)、国際諮問委員会 (2019 年 12 月) における意見交換を元に改訂してきたものである (本リポート参照)。また継続して外国人運営顧問により意見聴取も行われている (分子研リポート 2016 から 2019 参照)。

## 8-2 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い、2021年度からは文部科学省受託研究マテリアル先端リサーチインフラのスポーク機関として共同利用・民間利用拠点を務めることとなっている。

2020年度は、2019年度末に導入された高速原子間力顕微鏡の研究・共同利用を推進することなどを目的として、機器センター初の主任研究員・湊 丈俊が着任した。2019年度から中村敏和と鈴木敏泰が分析チーム、合成チームのチームリーダーとして加わっており、先端的な共同利用の推進体制が整いつつある。この3名は、先端的・開発的な共同利用（協力研究並びに施設利用）の推進に加え、俯瞰的視野に立った機器センターの運営、設備の維持・管理・開発・更新を行い、さらには、大学共同利用機関法人としての大学等への組織的な機能強化貢献をミッションとする。専任技術職員は、昨年と同じく7名であり、2020年度で定年退職の1名を引き継ぐ形で2021年度から1名の新規採用が確定している。また、技術系特任専門員2名、技術支援員1名（2020年度に技術支援員1名を特任専門員に変更）、事務支援員1名が配置されている。これに加えて、前述2事業において、特任研究員2名、技術系特任専門員1名、技術系派遣職員1名、事務系特任専門員3名、事務系派遣職員2名を配置している。なお、2021年度から技術課が技術推進部に組織改編され、機器センター配属の技術職員は機器分析ユニットに所属することとなった。新たにユニット長が置かれ、機器分析ユニットのマネージメントに従事する。

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、機器センターは比較的汎用性の高い装置群を集中的かつ経常的に管理している。2012年7月より、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。また、2015年度からは機器センター所有の設備のうち所外公開装置すべてをナノプラットフォームにて運用している。さらに、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。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。2019年度には、オペランド多目的粉末・薄膜X線回折装置が導入され、さらには2019年度末に最先端の高速原子間力顕微鏡2機が導入された。さらに、もともと競争資金で購入された汎用的な機器の共有・共同利用機器化が始まり、高性能二重収束質量分析計（所内共通機器、魚住教授より）、ESI-TOF型質量分析装置（所内共通機器、藤田卓越教授より）、電界放出形透過電子顕微鏡（共同利用機器、魚住教授より）が登録されている。2020年度は、老朽化した可視・紫外円二色性分散計の設備更新を行い、かつ、新型コロナウイルス感染症対策の2020年度第2次補正予算により400 MHz、600 MHz溶液核磁気共鳴の液体ヘリウム再凝縮器を付加することができた。また、新規文部科学省プログラムであるマテリアル先端リサーチインフラの2020年度第3次補正予算によりデータ連携・遠隔操作機能付電子スピン共鳴装置の導入が予定されている。

2019年度には、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、これまで点在していた機器センター機器室を共同研究棟A棟（旧極低温棟）と実験棟一部に集約しつつある。2021年度以降も引き続き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。

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。なお、大学共同利用機関法人評価において、所外運営委員を半数以上とすることが求められ、次回の運営委員交代時（2022年度）から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは大学連携研究設備ネットワーク、ナノプラットフォーム、マテリアル先端リサーチインフラの事業を推進しつつ、大学利用共同機関法人として大学等の研究者への直接的な研究強化貢献のみならず、大学等への組織的な機能強化貢献にも積極的・具体的に寄与すべきであろう。

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などの一部装置の停止を決定している。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、2017～2019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の検討については、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。

2021 年度から文部科学省マテリアル先端リサーチインフラプログラムが始動し、分子科学研究所はスポーク機関としてマテリアル DX プラットフォーム形成に関与することとなった。このプログラムの主たる目的は、マテリアルデータベースのデータ収集・蓄積、プラットフォーム構築、AI 等を用いたデータベース利活用等であり、追ってマテリアルの構造・物性計測における測定自動化・遠隔化、マテリアル創成における合成自動化・AI 解析等によるハイスループット化を計画している。DX は省庁を跨いだ大規模な国家プロジェクトであり、機器センターもその一翼を担う組織として積極的にデータ収集・蓄積さらには特徴ある解析アプリの提供等による利活用を推進していきたい。

### 8-3 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、近年は年間 30 件程度を受け入れている。当初は施設利用が多かったが、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。また、2021 年度より新たな試みとして、外部依頼を有償で受け入れる制度も整えた。

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、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、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、2019 年度には 5 軸加工機と電子ビームリソグラフィ装置の導入を行った。2020 年度は、附属 3 棟の改修により、工作环境およびクリーンルームの整備を行うこともできた。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、他機関との連携や、他機関共用設備の利用も積極的に検討する。

## 8-4 計算科学研究センター

計算科学研究センターは、2000年度に分子科学研究所の電子計算機センターから岡崎共通研究施設の計算科学研究センターへの組織改組が行われ、現在は分子科学研究所、基礎生物学研究所、生理学研究所の3研究所により運営されている。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。2020年度においても、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業や各種スクールの開催をはじめとした様々な活動を展開している。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。

2021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、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1077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4.24 PFlopsで総メモリ容量222 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98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。

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 16, 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、2020年度は271研究グループにより、総数1,103名(2021年3月末現在)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、生物物理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。また最近、錯体化学分野や有機化学分野など幅広い分野の研究者の利用も増加している。

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スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム、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3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、2020年度はこれらプロジェクトにコンピュータ資源の一部(10%以下)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、計算科学研究センター・

ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ「データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して」と2つのスクール「第10回量子化学スクール」と「第14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。また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、大阪大学ナノサイエンスデザインセンターと協力し、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、計算物質科学協議会を設立・運営し、分野振興を行っている。

## 2020年度 システム構成

### 高性能分子シミュレータシステム 4.24 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	2,352 コア (24 コア × 98 ノード) 3.0 GHz
総理論性能	226 TFlops (2,304 GFlops × 98 ノード) + 944 TFlops (NVIDIA Tesla P100 × 192, V100 × 20)
総メモリ容量	19 TB (192 GB × 98 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)

## 8-5 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。

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。2020年度は、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の活動、並びに機構外の研究者がセンター内の複数のグループとともに異分野融合研究に取り組むExCELLS 課題研究（一般・シーズ発掘）を実施した。

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。海洋研究開発機構と連携した深海・地下生命研究グループ、慶應義塾大学先端生命科学研究所と連携した極限環境耐性研究グループと極限環境生命分子研究グループが活動しており、これらに加えて、2020年度は、電子顕微鏡を用いて、生命と物質の境界を探る物質-生命境界領域研究グループを新規に設置した。

異分野融合研究を推進するためのセミナーや研究会も活発に行っており、海外との研究者との学際的交流を企図したシンポジウムも開催している。2020年度は、新型コロナウイルス感染症の影響により、シンポジウムの開催は延期となったが、分野横断型の研究集会（ExCELLS シンポジウム）や若手が主体的に企画運営する研究集会（ExCELLS 若手交流リトリート）をオンライン開催し、海外の研究者との研究交流を図った。また、一般市民を対象とする自然科学研究機構シンポジウムにおいては、生命創成探究センターが主体となって、研究成果と諸活動の状況を発信した。

加えて、学術交流協定を締結しているアカデミアシニカ（台湾）の研究者との共同利用研究を実施し、外国人研究職員の受け入れも行った。

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。