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。2021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大西 洋教授（神戸大学大学院理学研究科教授）が着任され、化学マシンとしてのUVSORの運用強化および機器センターのプローブ顕微鏡の利用促進などを中心に尽力している。

（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」を発してから 38 年が経過した。その間、新規光源開発と先端計測の専門家のコラボレーションにより、UVSOR では 2 度の光源加速器高度化に成功し、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（TOP-UP 運転、挿入光源追加、エミッタンス 27→17 nm rad）を実現した。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。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 9 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。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進められている次世代放射光（NanoTerasu）* 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。

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強化や未利用分野への拡張が重要であり、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、UVSOR が目指すべき方向性に合致する。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り、2018 年度より具体的な検討を進めている。将来計画の経緯は過去レポート 2018～2020 もご参照いただきたい。2021 年度はユーザーコミュニティに広くアンケートを実施し、次期施設に対する技術的要望や施設の考え方について意見を聴取した。またシンポジウム（第三回検討会：光源加速器技術、第四回検討会：次期計画概要）を開催し、次期施設の目指すべき形態について概要をまとめた。詳細は本レポートにて後述するが、本施設規模（小型リング型放射光施設）の光源加速器技術と性能は、UVSOR-III にて実証されたように既に概ね極限化されている。そこで現状のリング型光源加速器性能を基本骨格とし、光源として放射光のみならずレーザー光源を多彩に活用できる実験設備を提供することで、未踏の学術を広く開拓する「分子機能・材料物性計測拠点」としての先端光源施設と位置付けた。また今後の技術的成熟に応じて、高出力小型レーザー光を新規加速器として用いる計画も検討した。これにより VUV 波長帯における自由電子レーザーの併用など、時間・空間軸で極限化されたコヒーレント光源を利用した未踏の新規計測による学術開拓の場としての展開も視野に入る。前者は爆発的にコミュニティ拡大に繋がるような放射光利用実験のロールモデルが不可欠であり、分子研の各センターとも連携した多面的な支援による自由度の高い「高度研究支援環境パッケージ」を提供するための組織設計が重要であろう。後者は高出力かつ安定なレーザー光源技術の進展のみならず、加速器応用のための技術開発が求められ、国内外の多くの専門家との協力体制が必要である。いずれにせよ、現状の UVSOR-III は次施設建設まで

* 編集時にニックネームが発表された

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) 国際的に希少な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

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、経年劣化から数年以内に更新時期を迎える設備が複数箇所想定され、特に建設当初1983年来、未更新の基本設備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2019年度に決定し順次作業を進めている。このように、大型設備の持続性担保の観点で、更新にかかる巨額資金の恒常的確保は根本的な課題である。さらに中長期的には10年後を目途に、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る。また付帯する空調設備、冷却設備や放射線管理設備の更新経費は高額で、UVSOR施設棟の改修工事のタイミングを含めた検討が必要であろう。施設棟の建屋は1983年の建設であり耐久年数から改修時期が迫っている。次期施設の建設計画実現とそのタイミングが極めて重要である。緊急性の観点で当面の設備トラブルへの対処としては、予定した更新作業ではほぼ十分と判断したところであった。しかし今年度夏、BL7Uの光源出射部の四象限スリット冷却パイプからの水漏れにより、蓄積リング全周にわたる真空破壊事故が発生した。復旧には5週間を要し、ユーザー利用週数としては4週分をキャンセルとした。一部は後期実施で対応できたものの、実験を実施できないグループが複数出てしまい、ご迷惑をおかけしたことをお詫び申し上げたい。

一方、開発研究の視点で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されている。2020年度に、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している。ガンマ線利用実験が通常のビームタイムで実施できるように、蓄積リングの電子バンチ軌道を新たに設計した。2022年春のシャットダウン中に軌道調整を行い、2022年度は新軌道で定常運転する予定である。またBL1Uのタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干涉実験等が行われ、新たな分光学的展開が期待されている。これらの実験は、通常の放射光利用と大きくパラメータが異なるために、他ユーザーの影響がない週末に限定して実施している。現在、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いているが、2022年3月に藤本助教が名古屋大学へ転出し、助教1名の休職により加速器関連のスタッフ不足に陥っている。関連するパワーユーザーの協力による臨時的な運用体制を検討している。安定な加速器運転は全ての放射光利用研究に関わるため、中長期的な持続性担保のために早急にスタッフ補強のための人事を進めたい。

8-1-3 ビームラインと観測系利用状況

ビームライン実験設備については、10年程度の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た設備の順次高度化が必要で、分子研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基が稼働しており、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基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。開発が終了したビームラインから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国際的に認知度の高い施設地位を獲得していく方針である。

軟X線 BL6U では、立ち上げ中の光電子運動量顕微鏡の調整を進めつつ、デモンストレーション実験を協力研究により推進している。低エネルギー VUV の BL7U では、光電子アナライザーの電子捕集レンズ部をディフレクタ機能の追加により更新し、高効率角度分解光電子計測装置への改良に成功した。BL5U ではスピンマニピュレータ機能の導入により、高効率スピン分解光電子計測装置への改良を行いレンズパラメータの調整を進めている。

また汎用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、アンジュレー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。2021年度は、易光損傷試料系における需要を鑑み、BL4Bにおける分子固体用角度分解光電子分光エンドステーションについて評価テストを開始した。

一方、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の大きな見直しが起こっている。海外ユーザーの来所は依然として難しく代行測定を進めている。国内のユーザーには with コロナ対応を進め、少人数での来所で実験活動推進を工夫していただいた。特に移動制限から 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ている。VUV-軟X線領域では「真空」の技術的制約により自動化導入の難易度は高いが、国内施設間の情報共有など連携強化を進め、ベンディングビームラインにて自動化・遠隔化測定に向けた準備を開始した。

また課題として運営スタッフの充実化と技術の伝承があげられる。近年教員の転出や技術職員の定年退職などが相次いでおり、組織規模に比して極めて少人数で運営している UVSOR では、過渡的な人員増減の影響が大きい。2021年4月、出田助教が HiSOR に、2022年2月、大東助教が KEK にそれぞれ准教授として転出した。BL4U は依然として国際先端性の高い成果を発信している設備であるため、大東氏にクロアポとして運営をご協力いただくと共に、新たに主任研究員の人事公募により転出の影響を最小限に抑え、研究活動を維持する。また次年度は2名の技術職員の退職が予定されている。UVSOR では、火曜日から金曜日中の48時間(12時間×4日間)に加え、木曜夜間の12時間にも運転を実施し36時間連続したトップアップ運転を実現している。ただし夜間のマシングループの人員を恒常的に配置する余裕がないため「木曜夜間の12時間中にトラブルがあっても補償しない」という運用方針ものと供給を行っている。技術職員の負担軽減のため、2021年1月から教員の深夜勤務、準夜勤務を開始した。また次期施設建設計画など、中長期的な運営体制の強化のために、2021年度施設教授人事公募を行い2名の最終候補者を決定した。主任研究員の松井が教授に昇任し、今後はグループを率いて国際研究を推進しつつ次世代への人材育成に資する。もう1名は残念ながら着任が困難となり、別形式での協力関係の構築を模索している。スタッフの余力が不十分な状態は解消されておらず、転出等による突発的な業務エフォートの変化に対応することが困難であり、引き続き UVSOR 運営スタッフとして適任者が見つければ、採用枠を確保しスタッフとして迎えたい。

8-1-4 次期施設計画

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基本要素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基に、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。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を進めているが、2021度は、光源加速器と実験設備等に関する具体的な議論を行った。

8月に行われた第三回次期施設建設検討会においては、次世代の電子加速技術と光源技術に焦点をあて、HiSORやKEKの専門家を招き40名程度の参加者で活発な議論を行った。放射光を利用するためには、蓄積リングで電子ビームを周回し、偏向電磁石や周期磁石列（アンジュレタ）を用いて放射光を発生するのが一般的である。装置全体は、電子蓄積リングの他に、それに電子ビームを入射する入射器と呼ばれる加速器も含めて構成される。従来入射器では、高周波電場により電子を加速する事が行われているが、はるかに短い距離で同等の電子エネルギーまで加速できるレーザー航跡場加速や誘電体加速の開発が行われている。レーザー航跡場加速は、世界中複数のグループで開発が行われており、エネルギーや電荷量など独立に開発されている内の個々の最良値は、高周波加速と同等の性能が出ている。この要素技術の一端として、ハイパワー小型レーザー光源の開発は分子研社会連携研究部門の平等グループが主導している。5件の講演では最新の開発状況が紹介され、将来蓄積リングへの入射器をレーザー航跡場加速や誘電体加速に置き換える技術が提案された。今後も密に情報交換を行い、実用水準への到達に合わせ最良の光源技術導入を進めたい。

次期施設の電子蓄積リングの現状の設計に関しては、最新技術を取り入れることで電子エネルギー1 GeVのリングにより真空紫外域で回折限界に迫る性能を達成でき、アンジュレタ放射の輝度を現状より1桁向上する事が可能であることが示された。また、偏光変調型紫外光・軟X線を発生できる分割型アンジュレタに関する講演では、偏光放射光利用の幅広い可能性が示され、次期計画においてその導入を積極的に検討する必要がある。次期放射光施設では、実験光源として放射光に加えてレーザー光源もユーザーに供給し、利用目的に合わせて最適な光源を選択し利用できるよう整備し、利便性と多様性を重視した高度研究環境をユーザーに提供できる施設の建設を目指している。

11月に行われた第四回検討会は、コロナ禍によりZOOMウェビナーでオンライン開催した。冒頭に文科省研究振興局基礎基盤研究課長の渡邊 淳氏よりご挨拶を戴いた。次期施設における実験設備を検討するため、各ビームラインの現状と将来展望について、主としてUVSORスタッフから現状と展望を紹介し、対応する実験設備についての外部専門家から未来展望を述べてもらった。参加者は70名弱であった。軟X線オペランド吸収分光、放射光赤外分光、量子ビーム照射研究、真空紫外吸収・発光分光、スピン分解光電子分光、光電子イメージング、X線イメージング、光源加速器仕様の各テーマで活発な議論が行われた。

1) 軟X線分光として、長坂助教からBL3Uの液体に対する吸収分光と、液晶に対する散乱分光の紹介があった。液体は計測が難しく未踏の研究領域であったが、継続的な開発研究により多くの技術的課題を克服し実現した。宮脇研究員(QST)から高分解能非弾性散乱分光(RIXS)の技術開発の最新の状況について、世界動向を踏まえて紹介された。UVSORでの展開が期待される低エネルギー帯(極端紫外光領域)では高エネルギー帯に対して高分解能

化に要請される技術条件が緩和されるなど、その優位性と希少性が指摘され、オペランド計測など試料環境の優位性を生かした研究が有効であるとコメントされた。

- 2) 放射光赤外分光について、池本研究員 (JASRI) から SPring8 の例やレーザー利用、国際的な動向について紹介された。末端装置のユーザー自由度の確保、多様な試料への対応、複合測定 of 展開が重要であることが示された。将来的に SPring8 における利用が停止される予定であり、東北次世代放射光施設でも利用計画がなく、我が国におけるアクティビティ維持について総合的に考える必要があるとの指摘があった。
- 3) ビーム照射について、平准教授から BL1U の開発例が紹介された。独自性の高い手法の意義と共に、次期施設におけるパルスガンマ線のビームの質の向上に向けた技術展開が提案され、マルチバンチ運転における特定バンチの充填などの手法が議論された。副派生ビームである陽電子の利用も議論された。松田教授 (東大物性研) から、4重連アンジュレータによる位相検波計測の有効性が述べられ、レーザー光と放射光の融合の意義と、時間コヒーレンスを利用した各種時間分解計測の未来への期待が述べられた。今後は「顕微×分光×偏光×時間」の多角的計測環境の実現が切望される。レーザー光源の視点から (慣れ親しんだ) 放射光利用を如何にして総合的に考えられるかが融合利用に重要な点であると述べられた。物性科学の発展のために、高度技術の開発だけでなく、それを利用した実証実験と、積極的な広報とコンサルタントが重要であることが指摘された。
- 4) 真空紫外吸収・発光分光として、北浦教授 (山形大) から、BL3B、BL5B および BL7B のこれまでの経緯と現状、海外施設との比較が紹介された。ユーザー利用は基礎研究から実用化を想定した応用研究にシフトしつつあり、兼務されている NIMS での研究体制の例を挙げ、材料開発のスピード感をふまえたうえで、次期施設においては、ミラボなどの適切な実験環境の提供による合理的測定が検討軸に挙げられると指摘された。
- 5) 次世代光電子運動量顕微鏡について、松井主任研究員から、BL6U における開発状況とスピン多次元イメージングへの展開について説明があった。職人芸に頼るところの大きい複雑な電子レンズ調整作業について、AI 制御による汎用化の方向性が議論された。矢治研究員 (NIMS) から、レーザーを光源とした新たに導入された類似装置による研究展開が説明された。多元系物質の材料開発において、探査効率の向上に向けた AI による測定支援やビッグデータにおけるデータ科学の推進において、人材確保とチーム力の重要性が指摘された。
- 6) 先端光電子分光について、田中准教授から BL5U および 7U の現状と開発経緯について紹介された。スピンマニピュレータ 3 次元操作の新機構の開発状況が議論され、次期施設における光源の高輝度化やサブマイクロフォーカス化の必要性が述べられた。黒田准教授 (広大) より、スピン分解角度分解光電子分光による物性研究の一端として光スピントロニクス of 提案があった。手法の普及に向けては、若い力の活性化と、多様性への対応が肝要であることが指摘され、そのためのソフトウェア開発や、実験手法の開発テーマ of 設定の重要性が述べられた。
- 7) X 線イメージングについて、大東助教から BL4U の STXM 開発の経緯と利用状況について説明があった。国際的にみて極めて安定な実験装置環境である利点 that ユーザー獲得につながっていることが指摘された。今後の高空間分解能化 or 試料損傷回避のための技術開発が重要である点 that 指摘された。高橋教授 (東北大) から、先端コヒーレントイメージングの技術開発とその利用について紹介があった。タイコグラフィーと X 線吸収分光を組み合わせたビッグデータに対し機械学習を導入した解析例が示された。放射光を単に分析ツールとしての利用にとどめることにせず、計測深堀とデータ科学の融合が重要であると指摘された。
- 8) 次期施設の光源加速器仕様について、加藤教授から 1 GeV リングのデザイン概要が紹介された。これまで UVSOR では現施設形状を維持したままの 2 度の高度化を行ってきたが、更なる光源性能向上においては、新地において小型リングを刷新する方向性が必須である点 that 述べられた。0.75 GeV と 1 GeV 運転での光源性能の差、多極

ウィグラー装置 MPW の導入効果や、真空槽の小型化のメリット・デメリットが述べられた。100 eV 程度の波長帯ではレーザー光源と同等の空間コヒーレンス性能が達成できる可能性がある事が示された。

最後にパネルディスカッションを行い、ユーザー代表として UVSOR 利用者懇談会のメンバー（岡林教授（東大）、北浦教授（山形大）、木村教授（阪大）、彦坂教授（富山大）、山根研究員（PhoSIC））からパネラーに就いていただき聴衆と議論した。事前アンケートにて UVSOR 利用者や他放射光施設関係者などから寄せていただいた声を基に、光源仕様について利用者側の視点からの意見交換があった。先端技術である挿入光源ビームラインだけでなく、幅広い実験テーマの需要を満たすためバンディングビームラインの堅持を要望する声や、長期的な需要展望を見定めることが重要であるという指摘などがあった。また利用形態や運営体制についての意見交換も行い、建設計画実現に向けた戦略的な活動を求める声を多視点においていただいた。今後は具体的なビームライン設備を念頭に、各要素技術のデザインレポートをまとめていく作業が不可欠であり、各種研究会を開催し議論を深めていく予定である。

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（本レポート参照）。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（分子研レポート 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（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM）のスポーク機関、2022年度からは同事業運営機構横断領域（合成）担当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。

2021年度の人員は以下のものである。まず、センター長・横山利彦（2018～、兼任）、分析チームリーダー・中村敏和（2019～）、合成チームリーダー・鈴木敏泰（2019～）、主任研究員・湊丈俊（2020～）の3名が先端的な共同利用を推進している。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、宮島瑞樹が2021年度に技術員として着任し、高山敬史技師、藤原基靖主任技術員、上田正主任技術員、岡野芳則技術員、賣市幹大技術員、浅田瑞枝技術員の7名とユニット長として繁政英治技術推進部長が兼任する体制となっている。また、技術系特任専門員2名（伊木志成子、長尾春代）、技術支援員1名（藤川清江）、事務支援員1名（兵藤由美子）が配置されている。これに加えて、前述3事業において、運営マネージャー3名（大原三佳（～2021.6）、石山修、中本圭一）、技術系派遣職員1名（外山亜矢（～2022.2））、事務系特任専門員1名（船木弓子）、事務支援員2名（内田真理子、石川あずさ）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、ARIM事業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なされ次年度以降の新展開が期待できる。さらに、ARIM事業2021年度補正予算により超伝導量子干渉型磁束計（SQUID）ならびに2022年度概算要求によりヘリウム液化機の更新が予定されている。一方、これまで機器センター（ナノプラットフォーム）で運用されてきた800 MHzクライオプローブNMRは2022年度より生命創成探究センター EXCELLSに移管されて運用されることとなった。

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んでいる。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、概算要求のみならず外部資金を積極的に獲得することに努めた結果、電子スピン共鳴、超伝導量子干渉型磁束計、ヘリウム液化機の更新が行える状況である。今後さらに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 ARIM プログラムが始動し、分子科学研究所はスポーク機関と運営機構横断領域（合成）担当としてマテリアル 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である。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な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 400 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。

2021 年度より新たに有償利用制度を設けることで、分子研外部からの製作・開発依頼受付を持続可能なシステムとして運用開始し、海外からの依頼も含めて対応できる体制を整えつつある。また従来からある施設利用については、他の施設と同様の形で継続している。

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、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。2021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。

2022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、2021年度は278研究グループにより、総数1,187名(2022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、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。また最近では、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、2021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

ワークショップ「生体分子の構造・機能・デザインの計算科学」と2つのスクール「第11回量子化学スクール」と「第15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。

2021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。2021年度も前年度に引き続き、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。また、2022年3月には「生命システム理解に向けたネオ生命体創成を可能とする染色体工学技術の開発」を目指す新たな連携研究グループ「染色体工学研究グループ」を新規に立ち上げた。

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、物質-生命境界領域研究グループが活動している。2021年度は、超高解像度クライオ電子顕微鏡を導入し、運用を開始した。

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。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、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た。

さらに、2021年度は、研究体制、共同利用・共同研究体制や業務運営体制について、機構外からの意見を反映させ、センターの改善・強化することを目的とし、外部評価を実施した。

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。