

6. 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」制度に準じ、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、特別研究部門に以下の2つの制度を整備し、分子科学分野のトップレベルの研究推進と研究者層の増強を図っている。(1) 2023年4月より、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である東京大学の藤田 誠卓越教授をクロスアポイントメントで分子科学研究所卓越教授として招へいし、研究に専念できる環境を提供している。(2) 分子科学分野において独創的な研究を行っている教員に対してクロスアポイントメントで分子研教員ポジションを提供し、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こととし、現在3名を配置している。2023年度は女性研究者を積極的にクロスアポイントメント教員として受け入れる事を決定し、2024年4月以降、2名を採用した。

(渡辺芳人)

6-1 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

6-1-1 はじめに

UVSOR 施設は 1983 年 11 月 10 日に「初点」を発してから 40 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（TOP-UP 運転、挿入光源追加、エミッタンス 27→17 nm rad）のように、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。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 12 年目を迎え、全 13 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コヒーレント放射光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（7 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、特に 10 eV 付近をカバーする真空紫外光領域では国際的にみても希少な第三世代放射光施設で、今後も国際共同研究の持続的な発展を目指す。また中型放射光施設 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相補的運用と研究主導が求められる。大型・中型・小型の先端放射光施設を国内に有するというコミュニティ総合力は、我が国の国際的にみた優位性である。各施設における光源の波長帯域の相補性だけでなく、ゼロをイチにする学術開拓、研究の厚みを創る学術発展から社会実装までのニーズとシーズの相関とその研究時間スケールの違いによる相補性も重要な因子である。

これまで 40 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、後述のように 2018 年度より具体的な検討を進めている。現状の先端研究の活動力を維持すると同時に、今後の放射光利用において先端分析を利活用できるユーザーを育成することや、コミュニティ全般強化へ向けた組織間連携や、未活用分野への支援による研究領域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ある。こうした潜在的放射光利用者となりうる当該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。

計画概要として、次期施設は小型放射光を軸としつつも、あらゆる光源（高輝度放射光、自由電子レーザー、高次高調波レーザー等）を多彩に活用できる実験設備を一元集約して提供することで、光計測が研究連携の横串となつて多くの異分野を融合し、分子科学研究所の牽引力とともに未踏の学術を広く開拓する。成熟した各種光源技術を有機的に組み込んだ国際的に見ても稀有な、唯一無二の研究空間の創出を目指す。特に「分子機能・生命機能・量子物性などの複雑系／不均一系の光計測拠点」としての先端計測設備を機能強化し、大学共同利用機関として長期的に支援する施設と位置付けた。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に入射加速器として用いる計画も検討している。この技術は相補的に EUV 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拡大展開が視野に入る。

先端サイエンス分野の細分化の時代において、異分野融合によるコミュニティの構築は容易ではない。各分野が緻密化・専門化されるに従い多くの専門用語が生成され、独自のコミュニティにおける集中的な議論体制の形成もあり、分野の垣根を超えた議論は極めて難しい時代となった。もはや卓越した俯瞰的視野と大局観を有するような研究者がいたとしても、分野横断による新分野創発の作業は、一個人の能力を超えてしまっている感がある。こうした時代に

においては、横串として適切な規模の設備・人員を整備した拠点センターが総合的な体制として不可欠である。また光科学は、放射光施設の実績と在り方を見れば明らかなように、あらゆる分野における利便性と拡張性を持ち合わせている。特定分野を出口戦略の短期的視点で強化する政策に対し、長期的視点で学術の裾野を広げる役割を担う。今まさに未開拓の分野に「光」をあて、国際的に見て爆発的にコミュニティ拡大に繋がるような光利用実験のロールモデルを作り上げることが不可欠である。分子研が設置当初にケミストリー分野への放射光利用学術展開を意識して UVSOR を建設し、分野育成に貢献したと同じように、その第二弾の学術開拓を意識した計画を検討している。大学共同利用機関のユーザー支援ノウハウの蓄積と共同研究の実績により、各関連センターと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」を提供することができる。特にバイオ系（生物学、農学、薬学、生命科学等）の実験手順では、放射光を利用した実験の前後の評価や試料調製環境の充実が不可欠で、時間と空間のスペース感覚を意図することが極めて重要となる。光科学の設備を軸としつつも、周辺の汎用分析器も一元集約する新センターが必須であろう。

こうした背景に基づき、本計画の関連提案を日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」の策定に向けた「学術の中長期研究戦略」の施設計画に提案した。我々の「複雑・不均一系の分子ダイナミクスに挑む量子光科学拠点の構築」は、2023 年 10 月にグランドビジョン「量子ビームを用いた極限世界の解明」の一計画に策定された。また、文部科学省のロードマップ 2023 へ提案「自律型機能の解明に向けたテラレーメイド光科学研究拠点」を申請した（不採択）。また 2023 年 12 月には UVSOR 設立 40 周年記念事業を開催し、これまでの UVSOR を振り返りつつ、持続的に未来へ向けて次期施設の目指すべき姿について議論した。そこでは 40 周年記念冊子を発行するとともに、コンセプトデザインレポートを執筆した（web 公開）。現 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あるが、同時に、次期施設へ繋ぐための軟 X 線と真空紫外線を用いたバイオ系の斬新な研究成果の発信を狙い、着実な需要開拓を目指したい。岡崎三機関の基礎生物学研究所、生理学研究所の各研究グループとの共同研究を開始しており、Proof of Concept 実験検証を通じて、相互連携を強化する作業を進めている。また、光源グループによる先端の量子ビーム実験環境・設備の継続的な深化も重要で、低エネルギー帯施設における国際的な発信力を強化したい。こうした計画の経緯は過去の分子研リポート 2018 ～ 2023 もご参照いただきたい。

6-1-2 光源加速器の現状と老朽化対策

現在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、2030 年程度には大規模な更新が想定され、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け、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ているが、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 年度に決定し順次進めている。2022 年度からは電力料金の高騰問題から節電対策を検討し、昨年度比で同月毎 2～10% の使用量削減に成功した。2024 年度も継続して節電に努めている。

加速器老朽化における緊急課題として入射効率の低下が挙げられる。2023 年 1 月頃から効率が減少し始め、一時は入射効率が 10% を切る事例が発生し、蓄積電流値を通常 300mA のところを 200mA に下げて運転してきた。その後、原因特定の作業を進め、入射効率低下の要因を見出し、次年度は改善する見込みがたった。執筆現在 2025 年 3 ～ 5

月は、シャットダウン期間中であるが、シンクロトロンブースターリングの大規模改修を実施している最中であり、偏向部真空ダクトを全て新品に交換を進め、より安定な状態でのビーム入射を目指した設備整備を実施している。

他機関連携については、マスタープラン 2020 での協力体制方針を継承し、2023 年度から KEK-PF、UVSOR、HiSOR さらに名古屋大 SR センターの光源部門が共同で SR 加速器情報交換会を月一回程度の間隔で開催し、研究者から技術職員までが参加し、それぞれの施設の運転状況や技術開発への取り組みなどを報告している。技術情報の交換による各施設職員のレベルアップ、若手への技術伝承、要素技術・保守部品などの共通化による維持管理コスト低減、将来計画へ向けた共同技術開発などを狙いとしている。

一方、光源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。こうした研究は、大型施設では通常の放射光ユーザーのための定常運転への影響があるため困難であるが、小型施設ならではのメリットとして、光源パラメータ操作の自由度が高いことや、週末実験などで定期的な実験環境が与えられていることがあげられる。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。前述のように特殊運転が必要な実験は、ユーザー利用の無い週末あるいは特定の専用運転週をユーザー利用週の間に設定して運営してきた。今後の需要バランスを鑑みて、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、2022 年春に蓄積リングの電子パンチ軌道を新たに設計し、新軌道で定常運転することに成功した。その他、加藤特任教授(クロアボ)らによるタンデムアンジュレータの特性を活用した斬新な光干渉実験等も行われてきた。金安教授が 2025 年 4 月着任予定で、新規光源開発とその利用に関する研究力を強化する。これにより、中長期的な加速器運転における持続性が担保されるとともに、次期計画推進に向けた強力な陣容となった。

6-1-3 ビームラインと観測系利用状況

現在ビームラインは 13 基が稼働している。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。ビームライン実験設備については、国際的な動向を鑑みて 10 年程度の先端開発研究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等を踏まえた設備の高度化が必要で、分子研予算と外部研究費等により開発研究を継続してきた。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。ユーザーバランスはコロナ禍以前に戻りつつあり、今後は国際申請数や、民間需要への対応、採択競争率を意識した運用となるであろう。

軟 X 線 BL6U では、2020 年から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。2022 年度に二次元スピン検出ユニットを導入し、スピン分解機能を付加した同顕微鏡装置の最終設備開発が始まった。さらに、低エネルギー VUV の BL7U の光源をブランチ化して同顕微鏡に導入する機構を立ち上げ、直入射光源による偏光依存実験に成功している。

また汎用設備であるペ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。ペ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。大型放射光施設 SPring-8 の大規模更新計画で、赤外分光ビームラインが廃止されることを受け、国内ユーザーコミュニティのアクティビティ維持を目的として、UVSOR で積極的に受け入れを行うことで合意し、2025 年度から設備の移設や関連ビームラインの更新を予定している。2024 年度は、シャットダウン 10 週、調整運転 2 週、マシンスタディ

4 週, ユーザータイム 36 週 (うちシングルバンチモード 2 週) であった。前期の申請件数は 109 件 (うち有償利用 7 件, 随時申請 3 件, BL3U 水漏れによるキャンセル 14 件を含む) で, 後期の申請件数は 123 件 (うち有償利用 9 件, キャンセル 4 件を含む) であった。

最近の成果として以下の 6 点を取り上げる。いずれもこれまで見えなかったものを「観る」ことにより「解る」につなげた研究である。

[BL1U] 世界で希少な高フラックス・エネルギー可変・偏光可変・超短パルスガンマ線源

円偏光度を制御したガンマ線にて磁性体の空孔などを調べる独自の手法の利用が広がる

[BL3U] 共鳴軟 X 線散乱の測定システムを整備。ソフトマターの構造解析手法を開発

対象は液晶や高分子, 生体試料など。100 nm 程度のねじれ構造の観測や元素選択的な解析

[BL4U] 走査透過 X 線顕微鏡 (STXM) を核とした複合分析による化学状態マッピング

軟 X 線を使った生命科学ヘフィージビリティスタディを進めている

[BL5U] 全方位スピン分解 ARPES を目指して最終電子レンズ調整

軟 X 線の広いエネルギー範囲で高分解能スピン偏極バンド分散計測が可能に

[BL6U] 光電子運動量顕微鏡 (PMM) による TaS₂ や IrT₂ などの CDW 相転移中の Fermi 面変化観察

顕微分光と暗視野像法を駆使し相分離の顕微分布と各所の電子状態の変化過程を可視化

[BL7U] 世界で最も低温まで冷却できる 6 軸光電子マニピュレータを実装

低エネルギー帯連続光源で世界トップクラスの高エネルギー分解能バルク敏感電子状態測定拠点

[BL3B] ベンディングビームラインにおけるシンチレータなどの材料評価計測

福島第一原子力発電所事故における内部調査委に使われる新規材料開発で有効活用されている

6-1-4 中長期計画 (次期施設計画)

本施設規模 (小型リング型高輝度放射光施設) 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成熟期にあり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, 利用ニーズに即した組織体制の在り方に重点を置く計画とした。近代サイエンスにおいて欠かせない異分野融合を真に具現化するために必要な拠点スタイルとインフラストラクチャー設備群を検討した。これは奇しくも分子科学研究所の設立時の理念として, ケミストリー分野のための放射光施設を建設する必要性を提示したコンセプトと合致する。つまり光科学を軸とする新たな学術創成計画の第二弾と捉えていただければ幸いである。

光源技術の発展により, 今や放射光のみならずレーザー光源 (自由電子レーザー FEL や高次高調波 HHG レーザー) を自在に利用できる施設が求められている。特に EUV 領域 (100 eV 程度以下) の波長帯は現時点では放射光よりもレーザー光源の方が時間分解能や周波数特性において高性能を示す側面がある。これまで HHG レーザーは安定性や技術的な困難さから汎用的に普及するには至っていないが, 今後は世界に先駆けて我が国の共同利用施設が主導することで, 広く HHG レーザーを活用するフェーズに移行する必要がある。こうしたレーザー設備に対して, 放射光分野で培われてきたビームライン技術を転用することで更なる高度化が期待されるとともに, 大学共同利用機関の支援体制と運用法を広く展開することによる包括的な効果として, 周辺分野の活性化が期待できる。より短波長の光源としては放射光の優位性は揺るぎなく, 物性や機能を研究するために不可欠な広帯域の光の利用には, これらの光源 (SR, FEL, HHG) を網羅する設備が欠かせない。

2024 年度は自然科学研究機構のオープンミックスラボ（OML）事業支援により、所外グループと連携し、フォトンバイオロジーフィージビリティ研究を開始した。生体試料の多彩な計測を意識した手法開拓を進めている。また、各実験手法や分野毎の研究会を以下のように開催した。

2024.10 分野研究会「物理化学と放射光・先端計測に関する研究会」

2024.12 分野研究会「複雑系へのアプローチ ～ 物質の複雑性をどこまで予測できるのか？」

2024.12 VSX 研究会共催（物性研究のための VUV・SX レーザー光源と加速器光源の協奏利用）

2025. 1 日本放射光学会年会特別企画（日本の放射光施設のポートフォリオと将来展望）

一方で、UVSOR-IV の建設費用の獲得は非常に困難であるため、事業継続性の観点から既存リング設備を軸とする UVSOR-III+（プラス）高度化および光源最適化を同時進行で計画しており、予算を概算要求している。電子ビーム蓄積リングの電磁石構成を DBA 型に刷新することで、世界最高レベルの低エミッタンス高輝度 EUV 光源の超安定運転が実現する。先端光源の更なる高度化により、ビーム安定性が飛躍的に向上するとともに、光源のコヒーレンス特性が向上し、未開の計測手法が開発される。これらの先行開発は、ニーズの高まりをみる複雑系分野への展開に必須で、国際競争が激しさを見せる中、我が国の基礎学術の持続的発展に不可欠である。また懸念の老朽化設備を全て刷新し、ビームプロファイル機構を導入することによる光源安定化により、時空間計測のための先駆的实验の検証が実現し、新イメージング法により国際研究展開をリードすることにつながると考えている。また老朽設備の撤廃により、24 時間運転の実施が可能となり、UVSOR の強みである挑戦的な光計測法の開発研究機能を維持しつつ、スタッフ対応が困難な夜間タイムにおいては、汎用型計測の自動化機能、AI ロボット支援システムを開発することで高スループット型の実験が実現する。大型施設では相容れない汎用自動型と先進開発型の二面展開が可能となり、分子科学の新たな潮流を生み出せると期待している。ここで開発される新規イメージング法やオペランド法など先端実験設備は、次期施設（UVSOR-IV）へ持続的かつ効果的に誘い、新たな要素技術の供給源ともなるだろう。

UVSOR-IV の詳細のコンセプトデザインレポート全容は web 開示している。繰り返しになるが、リング型放射光の仕様は、UVSOR-III よりも一回り大きな省エネ小型の高輝度光源 UVSOR-IV を新地に刷新する。光源のテラーメイド利用のために、運営自由度のある小型施設規模が不可欠で、成熟した各先端技術を導入しオペランド・イメージング手法への適用に耐えうる安定性を重視した設計である。SX、VUV の長波長帯域では回折限界性能の高輝度光源となりレーザーを組み合わせたコヒーレント特性を利用する最先端研究が行える。また次世代の最新技術である小型レーザー加速器による入射器を世界に先駆けて導入し、50 年後も持続可能な長期的な展開を視野に入れる。次期計画のコンセプト概要の詳細はリンク先をご高覧いただきたい。

<https://www.uvsor.ims.ac.jp/uvSOR4/>



ミッション：先端光計測による生命と物質の謎の解明

Knowledge innovation by seeing the unseen “観るから解るへ”

戦略目標：

省エネ／高輝度小型リング放射光源設備による新センター建設

サイエンスニーズ視点で光のテーラード利用による未開拓分野の啓発

ゼロをイチにする学術開拓的・異分野融合型研究の推進

次世代への技術伝承と人材育成

研究者・技術者の相補性強化 “技術職員の待遇改善”

タスク：

SR, HHG, FEL の自在提供による先端開発と最新技術の協奏

付帯分析機器群によるマルチモーダル実験設備の複合研究支援

ワンルーフ集約された研究環境による融合型研究の促進

知識・技術を持ち寄り新しい発想を生み出す異分野交流の潮流

シニアと若手が切磋琢磨する光道場による相互作用の仕掛け

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）、国際諮問委員会や運営顧問会議（2019 年 12 月、2024 年 2 月）における意見交換を元に改訂してきたものである（過去レポート参照）。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 2023 参照）。

6-2 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（設備 NW）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、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）事業の「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関、2022 年度からは同事業運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任機関として本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を務めている。

2023 年度の機器センターの人員は以下のである。センター長は 2018 年度から横山利彦が務め、分析チームリーダー・中村敏和（2019～、2023 年 11 月から研究力強化戦略室・特任部長が主務）、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、高山敬史主任技師、上田 正主任技術員（年度途中で技師に昇任）、藤原基靖主任技術員、浅田瑞枝主任技術員、岡野芳則技術員、賣市幹大技術員、宮島瑞樹技術員、長尾春代技術員、平野佳穂技術員に加え、安全衛生管理室と併任の南田悠技術員が本年度に新たに採用され計 10 名の在籍となった。ユニット長は 2024 年度も繁政英治技術推進部長が兼任する体制とした。また、技術系特任専門員 2 名（伊木志成子、石田向日葵）に加え、育児休暇中の事務支援員・内田真理子が技術支援員として復帰し、さらには、設備 NW と ARIM の 2 事業において、運営マネージャー 4 名（石山 修、中本圭一、太田康仁、賀来美恵）が配置されており、事務支援員は、計 4 名（兵藤由美子、船木弓子、遠山 遊、栗田佳子）が業務に当たっている。

研究所全体としては大規模装置を効率的に運用する必要性が高まっているが、機器センターは其中で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。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、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、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)、ARIM 事業 2022 年度補正予算により単結晶 X 線構造解析と有機自動合成システム、所内予算による 600 MHz 溶液 NMR が新規に導入された。また、名工大から電子プローブマイクロアナリシスが譲渡され始動しており、2023 年度センター予算において山手地区に蛍光分光と蛍光寿命装置、2024 年度センター予算において山手地区に示差走査型溶液熱分析計を導入している。さらには、2022 年度概算要求によりヘリウム液化機の更新が実現し、本年度から運転されている。設備予算はなかなか措置されにくい状況が続いているが、所内予算・競争資金・概算要求を含めて何とかある程度の新規設備が導入できている状況である。

所外委員 5 名を含む機器センター運営委員会では、協力研究・施設利用の審査を行うほか、共同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ている。利用状況として、最近では年間 200 件程度の所外利用があり、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、2022 年度から所外委員比を増やすこととなった。機器センターは設備 NW、ARIM 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、現在所有の多くの機器の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、単結晶 X 線構造解析、高磁場核磁気共鳴、ヘリウム液化機など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。

2021 年度から ARIM 事業が始動し、分子科学研究所は「マテリアルの高度循環のための技術」領域スポーク機関と運営機構横断領域物質・材料合成プロセス技術分野の責任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、共用プラットフォーム・データ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などであり、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も推進していく。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。

6-3 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 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 年以上が経過し、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。

6-4 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。2024 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。2024 年度には、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合がなされた。

2025 年2 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、2017 年10 月から稼働していた旧「高性能分子シミュレータ」を2023 年2 月に更新した「高性能分子シミュレータ」である。本シミュレータでは、量子化学、分子シミュレーション、固体電子論、生物物理などの共同利用の多様な計算要求に応えう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 HPE 製の Apollo シリーズで構成される 834 ノードの共有メモリ型スカラ計算機クラスタであり、全サーバは全て同一 CPU (AMD E7763)、同一 OS (Rocky Linux 8.7) を有し、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 6.68 Pflops で総メモリ容量 224 TB である。主力の演算サーバは Type C と呼ぶもので、2.45 GHz のクロック周波数をもつ 128 コア、256 GB メモリ構成の 804 台である。仮想ノード単位とコア単位の利用形態のジョブの大半は Type C で実行される。Type F はメモリを 1 TB に強化した 14 台であり、他は Type C と同一である。多くのメモリを必要とするジョブが仮想ノード単位で実行される。Type G は 1 ノードあたり 8 GPU を有する 16 台であり、筐体が違うものの他は Type C と同一である。インターコネクトは InfiniBand アーキテクチャを採用し、全台数を 100 Gb/s で接続しており、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。これらクラスタ演算サーバは 14.8 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, GAMESS, Molpro, TURBOMOLE、分子動力学分野では、Lammps, GROMACS, Amber 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、2024 年度は 429 研究グループにより、総数 1,737 名 (2025 年3 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。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。また、基礎生物学研究所のスーパーコンピュータとの統合の結果、利用者数が格段に増加した。

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、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとも連携を行っている。これら2 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、2024 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研究施設のワークショップ「AI/ML に基づく材料設計と開発：理論と実験の接

点」と2つのスクール「第14回量子化学スクール」と「第18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、大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³ 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。

2024 年度 システム構成

高性能分子シミュレータシステム 6.68 PFlops

クラスタ演算サーバ Type C	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：102,912 コア（128 コア × 804 ノード）2.45 GHz
	総理論性能：4,034 TFlops（5,017.6 GFlops × 804 ノード）
	総メモリ容量：206 TB（256 GB × 804 ノード）
クラスタ演算サーバ Type F（メモリ強化）	
	型番：HPE Apollo2000 Gen 10 Plus
	OS：Linux
	コア数：1,792 コア（128 コア × 14 ノード）2.45 GHz
	総理論性能：70 TFlops（5,017.6 GFlops × 14 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
クラスタ演算サーバ Type G（演算性能強化）	
	型番：HPE Apollo6500 Gen10 Plus
	OS：Linux
	コア数：2,048 コア（128 コア × 16 ノード）2.45 GHz
	GPU：NVIDIA A100 NVLink
	総理論性能：80 TFlops（5,017.6 GFlops × 16 ノード）+ 2,496 TFlops（19.5 TFlops × 128 ノード）
	総メモリ容量：14 TB（1024 GB × 14 ノード）
外部磁気ディスク装置	
	型番：HPE ClusterStor E1000
	総ディスク容量：14.8 PB
インターコネクト装置	
	型番：NVIDIA Mellanox InfiniBand Switch
フロントエンドサーバ	
	型番：HPE ProLiant DL385 Gen10 Plus v2
	OS：Linux
	総メモリ容量：1 TB（256 GB × 4 ノード）
運用管理クラスタ	
	型番：HPE ProLiant DL360 Gen10 Plus
	OS：Linux
	総メモリ容量：1.1 TB（192 GB × 6 ノード）

6-5 岡崎連携プラットフォーム

岡崎連携プラットフォームは、岡崎3機関（基礎生物学研究所、生理学研究所及び分子科学研究所）の枠を超えた融合研究を推進するための組織として2024年7月に設置された。分子科学分野では、計算科学手法の開発と活用、光を用いた先端的な研究手法や光源の開発、そして新規分子・物質の設計やそれらの高度集積化を通して、原子・分子・生命システムが示す多様な構造、物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの高次機能や動的構造を解明するとともに、新たな現象や有用な機能の設計と制御に取り組む。また、国内外の大学・研究機関と連携し、国際的に卓越した若手研究者を育成するための支援を強化する。

2024年11月時点で、同プラットフォーム下に「スピン生命科学コア」、 「オープンミックスラボ [OML OKAZAKI]」が設置されている。

6-6 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。

2022年度からは、新たに先端共創プラットフォーム及び連携強化プラットフォームを実施し、共同利用・共同研究の活性化を図っている。この2つのプラットフォームにより、国内外の大学・研究機関との共同利用・共同研究を一層強化するとともに、産業界との共創の推進も目指している。

先端共創プラットフォームでは、センターに所属する教員と外部の研究機関が一体となって研究チームを構成し、設定された研究課題に共創的に取り組むExCELLSプロジェクト研究を実施している。2022年度に始動した「物質－生命の境界探査」チームに加え、2023年度からは新たに「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームを立ち上げ、異分野融合型の研究を積極的に進めている。「物質－生命の境界探査」チームでは、生命機能を維持するために必要となる、本質的あるいは最小の機構や原理を解き明かすために、極限環境に生きる生物、ウイルス等における生物間相互作用や環境応答に関する分子複合体の形態・機能・動態を観測し、物質－生命の境界の体系的理解を目指す研究を実施している。また、「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームでは、膜オルガネラに加え、近年の非膜オルガネラ同定に伴い拡張しつつあるオルガネラ研究を推進し、その構成を明らかにすると共に、様々な要因によって引き起こされる再編成、ダイナミクス変換や機能発現制御を解き明かす研究を実施している。各チームはExCELLSの研究者が中心となって進めるサブチームと、外部の大学の研究者から提案された研究課題を進めるサブチームで構成されており、互いに共創しながら研究を進めることで、新たな研究者コミュニティの創出や、広い視野を持つ若手研究者の育成を目指している。2024度は新たな研究プロジェクトチーム「生命体のシミュレーション」および「ネオ生命体の創成」の発足準備を進めるための計画研究2課題を立ち上げ、2025年度の本格始動に向けたチームの体制整備を進めた。

連携強化プラットフォームでは、国内外の大学・研究機関との組織間のネットワークの強化を図り、連携構築を戦略的に推進している。糖鎖生命科学ユニットでは、共同利用・共同研究拠点である「糖鎖生命科学連携ネットワーク型拠点（J-GlycoNet）」の活動を東海国立大学機構糖鎖生命コア研究所及び創価大学糖鎖生命システム融合研究所と連携して進めている。さらに、このネットワーク型拠点を基盤として、文部科学省 大規模学術フロンティア促進事業「ヒューマングライコームプロジェクト」を開始した。また、先端創薬科学ユニットでは、文部科学省・先端研究基盤共用促進事業（先端研究設備プラットフォームプログラム）NMRプラットフォームの活動を分子科学研究所より引き継ぐとともに、日本医療研究開発機構 生命科学・創薬研究支援基盤事業（BINDS）の活動を開始し、名古屋市立大学の創薬基盤科学技術開発研究拠点とも連携して、先端的な創薬基盤技術等の創出を目指す活動に取り組んでいる。

さらに、2023年度より、文部科学省 令和5年度共同利用・共同研究システム形成事業「学際領域展開ハブ形成プログラム」の採択課題のうち、「分子・生命・生理科学が融合した次世代新分野創成のためのスピン生命フロンティアハブの創設（申請機関：生理学研究所）」および「マルチスケール量子－古典生命インターフェース研究コンソーシアム（申請

機関：東京大学物性研究所)」に参画し、関係機関と連携して異分野の研究を行う大学の研究所や研究機関と連携した学際共同研究、組織・分野を超えた研究ネットワークの構築・強化・拡大を推進している。これを受けて、連携強化プラットフォームに、「スピン生命科学ユニット」及び「量子生命科学ユニット」を設置し、活動を推進している。「スピン生命科学ユニット」に関しては、関連する組織体として2024年度より岡崎共通研究施設岡崎連携プラットフォームスピン生命科学コアが始動し、本センターからも関連する教員が本事業の構成員として参加し、国内の集約型MR研究技術開発拠点の構築に向けて活動を推進している。また、このユニットの研究活動を充実させるため、2024年度は新たに2つのSpin-L連携研究グループを設置した。また、「量子生命科学ユニット」に関しては、2024年度より文部科学省令和5年度 共同利用・共同研究システム形成事業「学際領域展開ハブ形成プログラム」の採択課題「マルチスケール量子-古典生命インターフェース研究コンソーシアム（申請機関：東京大学物性研究所）」の運営協力に関する覚書を締結した。

これらの連携活動を推進する上で、研究戦略室の体制の強化を図り、2025年4月に予定されている研究力強化戦略室への組織改編およびURA配置に向けた準備を進めた。

2024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。

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。加えて、鳥取大学染色体工学研究センターと新たに連携協定を締結し、学術交流の強化を図った。

さらに、昨年度締結した株式会社生体分子計測研究所とクロスアポイントメント協定に基づき、生命分子動態計測グループのChristian Ganser 特任助教がクロスアポイントメント教員として企業連携型の研究機器の高度化を推進している。

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画したシンポジウムも開催している。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）を開催し、センター内外の研究者との研究交流及び若手研究者の育成を図った。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）および韓国科学技術院生命科学技術大学（KAIST・韓国）の研究者との国際交流および共同利用研究を実施した。この国際交流事業の一環として共同企画したFrontier Bioorganization Forum を2024年9月にアカデミアシニカ（台湾）で実施し、本センターからも教員8名が参加した。また、本フォーラムの2025年度の日本開催に向けて、本センターの若手教員が中心となって準備を進めている。さらに、デンマーク政府のInternational Network Programの支援を受けている学術交流の一環として、Aarhus UniversityのInterdisciplinary Nanoscience Center（iNANO）と新たに連携協定を締結し、学術交流の強化を図った。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、青野重利教授が副センター長をつとめるとともに金属生命科学グループを主宰し、加藤晃一教授が研究戦略室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、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をそれぞれ主宰している。2024年度からは新たに岡本泰典准教授が生命分子設計化学研究グループを主宰している。