

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。

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に対応した新たな取り組みである。具体的には、①特別研究部門を整備し、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。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4名を配置している。なお、クロスアポイントメント教員は当初、特別研究部門に配置していたが、2026年からは各研究部門やセンターへの配置と変更している。

生理学研究所および基礎生物学研究所と共同して新たな学術分野を立ち上げる努力の一環として2000年4月に発足した岡崎統合バイオサイエンスセンターを、2018年4月に生命創成探究センター（エクセルズ）へと発展的に改組した。さらに、スピン生命科学コアを生理研およびエクセルズと協力して設置している。

（渡辺芳人）

6-1 極端紫外光研究施設（UVSOR）

6-1-1 2025 年度概要

2025 年 3～5 月をシャットダウン期間とし、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た。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た。入射ビームの電流値は 300 mA に復帰できたが、入射効率の改善余地があり、継続して調整作業を進めている。

施設スタッフとして、加藤特任教授、佐藤助教、水川技術支援員らが転出し、新たに金安教授、高橋技術員、新井特任専門員、池田技術支援員らが着任した。

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。

[BL3B] 木村真一グループ

重い電子がプランキアン時間で運動していることをはじめて観測
——強く相互作用した電子の新たな法則を発見——

[BL7U] 解良聡グループ、田中清尚グループ

分子の運命の赤い糸は、確かにそこにあった
——分子界面に潜む「弱い結びつき」を電子共鳴で可視化

[BL5U] 田中清尚グループ

ダイナミックな電子が効率よく熱を電気に変換する
——近藤効果が熱電材料の性能を向上させるメカニズムを実験的に解明——

[BL7U] 田中清尚グループら

銅酸化物の高温超伝導体で特殊な電子状態「ノード金属」を発見
——三層構造が高い超伝導を実現する仕組みの解明へ——

[BL6U] 松井文彦グループら

光で確かめた金結晶表面のスピン向き
——新しい 2 次元スピン検出方式で、表面電子のスピン方向を可視化し決定——

[BL3U] 杉本敏樹グループ

電流で誘起される非熱的触媒反応の駆動原理を解明
——持続可能な温室効果ガス資源化の次世代化学技術に道筋——

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 2024 年より物性研（ISSP_SOR）を加えた 4 機関連携による「放射光学術基盤ネットワーク」事業として「開発研究多機能ビームライン BL-11A, 11B」の整備を進めてきた。今年度、2 年弱におよぶ開発が完了し、軟 X 線と硬 X 線の同位置照射が実現し、放射光 2 ビーム利用が開始された。これにより光の順次利用計測から同時利用計測の道が切り開かれた。

6-1-2 将来構想概要

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施設刷新の将来計画としていくつかの事業計画を立案している。日本学術会議が募集した「未来の学術振興構想」における「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」が、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。今年度、その改訂版として未来の学術振興構想2026版を提出した。

まだ光を利活用できていない分野の一つである、バイオやライフサイエンス分野へ啓発活動を継続しており、軟X線や真空紫外線を用いた斬新な研究成果の発信を狙った事業を開始した。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として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。OML事業経費により「ラベルフリーで元素を用いてオルガネラソーティングする技術開発」「構造光による『生命現象のゆらぎ』の摂動と制御技術の開発」について、荒木主任研究員、岩山主任研究員らがそれぞれチームを編成し推進している。また、光源グループによる先端的量子ビーム実験環境・設備の継続的な深化も継続しており、低エネルギー光源施設における国際的な発信力強化につながっている。

2025年末より、他機関との議論を深め、大学共同利用機関と共同利用／共同研究拠点の連携による事業「量子マルチビーム共創拠点」を共同提案することになった。分子科学研究所に加え、物質構造科学研究所（Photon Factory施設および低速陽電子施設）、広島大学放射光科学研究所（HiSOR）、東京大学物性研究所（軌道放射物性研究施設（ISSP-SOR）、極限コヒーレント光科学研究センター（LASOR））の4機関を軸とした提案である。複数の量子ビームの同時利用による相関計測をはじめとして、計測手法や研究分野の融合による新領域の開拓を推進する。硬X線大型光源SPring-8と軟X線中型光源NanoTerasuを補完する真空紫外（VUV）領域の小型高輝度光源に加えて、高強度陽電子源や極短パルスレーザー等を整備し、初期開発や技術人材育成に重点を置くことで、国際競争力と持続発展力を強化するとともに、物質・生命の多様な機能の根源を探究する。ロードマップ2026への申請を予定している。

一方で、高輝度放射光リング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、予算要求を進めている。電子ビーム蓄積リングの電磁石構成を見直し、ビーム位置モニター機構の導入により、蓄積ビームの安定性の向上と、より高精度なビーム制御による24時間運転を目標としている。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目論見である。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と期待する。

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）、国際諮問委員会や運営顧問会議（2019年12月、2024年2月、2025年9月）における意見交換を基に改訂してきたものである（過去リポート参照）。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2024参照）。

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として参画し、さらに 2022 ～ 2024 年度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を務め、本国家プロジェクトの設備共用・DX 拠点を担っている。

2025 年度の機器センターの人員は以下のようなものである。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、上田 正技師、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萬代恭子技術員が本年度に新たに採用され計 9 名の在籍となった。ユニット長は 2025 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 3 名（高山敬史、伊木志成子、石田向日葵）に加え、技術支援員として内田真理子、久保田亜紀子、今井弓子の 3 名、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 1 名（太田康仁）と ARIM データエンジニア 1 名（岩瀬未空）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、2024 年度から運転されている。2026 年度には ARIM 事業 2025 年度補正予算から物理物性測定システムが導入される予定である。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。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 500 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 50 年以上が経過し、一部に老朽化、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ー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、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。2025 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。

2026 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 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 EPYC 7763)、同一 OS (Rocky Linux 8.10) 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 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 Lustre ファイルシステムを共有している。

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, ORCA, Molpro, TURBOMOLE、分子動力学分野では、GROMACS, Amber, LAMMPS 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。さらに生物物理分野で活用される AlphaFold3 も実装している。

共同利用に関しては、2025 年度は 440 研究グループにより、総数 1,988 名 (2026 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。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、2025 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「生命科学を加速するバイオインフォマティクスとスーパーコンピュータ」(基礎生物学分野開催)と2つのスクール「第15回量子化学スクール」と「第19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。

2025 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。

この目的のために、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。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。特に、2025年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」を発足し、研究活動を開始した。「生命体のシミュレーション」チームでは、細胞や組織、臓器、個体の生命力を数理モデルや数値計算を用いてコンピューター上で再構成し、細胞の増殖や組織形成、生命体の生と死などをシステムとして解明することを目指している。また、「ネオ生命体の創成」では、天然には存在しない生体分子および生命分子システムを用いることで、自然発生的には達成し得ない高次機能を発現しうる生命体、すなわちネオ生命体の開発を目指して、任意の機能を持つ生体分子の設計法の確立や未知の生体分子の探索、それらを組み合わせた分子システムの開発、開発した分子システムを細胞や個体内に大規模インストールするための方法論開発などを目指している。

また、「物質－生命の境界探査」チーム、「オルガネラの時空間アトラス編纂」チームについても、継続して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。

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」を実施している。この活動を推進する上で、2025年4月に創成研究領域にラボオートメーション研究グループを新たに設置した。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）の活動を実施し、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。加えて、岡崎共通研究施設岡崎連携プラットフォーム オープンミックスラボ（OML OKAZAKI）において、ヒューマングライコームプロジェクトおよびスピン生命フロンティアの研究活動を開始した。

これらの連携活動を推進する上で、2025 年 4 月に研究戦略室を研究力強化戦略室へ組織改編するとともに、URA を配置した。

2025 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、および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、大阪大学蛋白質研究所、北海道大学低温科学研究所、リール大学（フランス）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図したシンポジウムも開催している。特に、アカデミアシニカ（台湾）については、これまで学術交流がある生物科学研究所に加えて、新たに応用科学研究センターとの学術協定を今年度4月に締結した。これらの国際交流事業の一環として、日本・韓国・台湾の研究者にて共同企画した Frontier Bioorganization Forum 2025 を 11 月に岡崎にて開催した。また、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。さらに、大阪大学蛋白質研究所（IPR）と合同で ExCELLS × IPR 合同ファカルティディベロップメントを開催し、国内および国外での競争力強化に向けた今後の共同利用・共同研究のあり方などについて議論した。

分子科学研究所を兼務している教員のうち、加藤晃一教授が副センター長および研究力強化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、岡本泰典准教授が生命分子設計化学研究グループをそれぞれ主宰している。