

5-9 ネットワーク型研究加速事業（自然科学研究機構）

第3期中期計画期間に入り、自然科学研究機構の研究費（運営費）の一部が、機構で統括し、機構長の裁量で各機関に配分する形をとることとなり、自然科学研究機構では2016年度に「自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業」（2017年度からは「ネットワーク型研究加速事業」に名称変更して継承）として機構内で公募して選考することとなった。これは、自然科学分野における国内外の大学や研究機関との連携による共同研究を推進し、新たな学問分野の開拓も視野に入れて自然現象シミュレーションや新計測技術の開発を生かした創造的研究活動を推進する、国際的にも評価される機関間連携ネットワークの構築による国際的共同利用・共同研究拠点を形成することを目的としている。分子科学研究所においては、この機構内公募に対して「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解」という6年（2016年～2021年度）計画の事業を申請し、採択された。その内容の概略は、以下の通りである。

従前の分子観測と分子理論は、分子そのものの特性を描き出すことで分子の多様な構造と機能を解明することに大きく寄与したが、マイクロとマクロの間で起こる分子システムに特徴的な挙動を観察し、それを解釈しようという視点が重要になりつつある。従来の分子観測法・理論から一歩踏み出した、新しい発想の計測実験手法、有意な情報を取り出すデータ解析手法、及び実験結果をシミュレーションし、解析する理論的枠組みを開拓することが必要となっている。それによって、さらに新たな物質機能の開拓、生命活動の根源を探るための新たな方法論を提供することも期待される。本事業ではこの観点に立ち、分子科学研究所で実績のある分子計測法と分子理論の蓄積を元に、先端的な分子観察法と解析手法、理論・シミュレーション技法を一体的に開発する。分子観察法の開発で実績ある国内外主要研究機関との共同研究（国内外の関連研究機関からのインターンシップ受入れ等を含む）を行い、また物質科学と生命科学への利用の観点から連携ネットワークを創出し、分子観察による階層横断的な自然の理解を加速することを目的とする。

2016年度から、これらのコンセプト実証のための測定手法と装置の設計を開始するとともに、計測技術確立のための試料作製に取り組んでいる。計算科学の立場からは、階層的な構造をプログラムできるよう、検討を進めている。また、計測装置の中で分子が電磁場と相互作用する際に起きうる現象について、理論的に妥当なモデルを構築するための計算を進めている。これらの将来的な生命科学への展開について可能性を議論するため、2018年3月には生理学研究所と協力して海外の講演者を含む研究会を開催した。この他、本事業に関わる研究会やセミナーを2018年度4件、2019年度7件、2020年度6件開催した（2020年度はほぼ全てがオンライン開催となった）。また海外諸機関との共同研究、インターンシップ受入れを継続して行っている（2020年度はCOVID-19感染拡大のためほぼ実施が不可能となった）。