

5-4 シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」に関する 新たな学術分野の開拓（自然科学研究機構）

本プロジェクトでは、分子スケールから固体物質や生体分子にわたる物性や機能発現の解析に加え、分子の集団運動と反応との関係、生体分子における揺らぎの下で起こる確実な機能発現や多様な状態・構造変化間の相関などに関する理論・計算および実験研究により分子システムの物性・機能の解明、階層を貫く分子ダイナミクスの解析・観測法の開拓に関する国際研究拠点形成を目指す。また、研究活動の一環として、理論・計算科学に関するセミナーを開催した。さらに、理論および計算分子科学に関する人材育成を目的として、分子シミュレーションおよび電子状態理論に関する講習会を開催した。

以上の国際研究拠点形成活動に加え、自然界における階層と全体の取り組みとして、天文学や核融合科学の分野で行われている計算科学研究に関する方法論的および概念的な共通項を探るとともに、他分野のアイデアの導入による研究の展開を目指した活動も進めている。今年度はMDシミュレーションとその応用、アストロバイオロジー、プラズマ物理などに関する国際シンポジウムを2月5、6日に国立天文台で開催した。