

### 5-3 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）

自然界の事象はマイクロからマクロまでの多数の階層で構成され、それぞれの階層に固有の運動法則に支配されている。さらに全体としては階層間で相互作用しながら時間発展し、その結果全体として大変複雑な様相を示す。本プロジェクトでは国立天文台、核融合科学研究所、分子科学研究所が連携して、自然科学における階層性、構造形成等の階層横断現象の解明を目指すとともに、関連研究機関との連携を推進することにより、学際領域としてのシミュレーション科学を通じての異分野の融合の推進を目指している。本プロジェクトにおける連携研究活動として、「階層構造とシミュレーション」、「分子シミュレーションとその応用」、「不均一系触媒の界面における化学反応とダイナミクス」等をテーマとした連携シンポジウムを2020年1月10、11日に国立天文台で開催した。また、活動の一環として、理論・計算分子科学に関するセミナーを開催した。さらに、理論・計算分子科学に関する人材育成を目的とした電子状態理論、分子シミュレーションに関する講習会も開催した。