

領域番号	2503	領域略称名	柔らかな分子系
研究領域名	理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学		
研究期間	平成25年度～平成29年度		
領域代表者名 (所属等)	田原 太平（独立行政法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員）		
領域代表者 からの報告	<p>(1) 研究領域の目的及び意義</p> <p>物質科学は20世紀において驚異的な進歩を遂げたが、その一方で多くの資源がきわめて速く消費されるようになり、現在の水準を保ちつつ持続可能な社会を実現することが危急の課題となっている。そのような中、物質科学の一つの究極の目標として生命に象徴される複雑系の理解、制御、利用が強く意識されるようになってきている。なぜなら生命活動あるいはその要素現象は極めて複雑にも関わらず、常温下で大きなエネルギーも必要とせずに極めて特異的かつ究極の効率を持って進む分子過程だからである。これら高い機能を有する複雑系の本質は、系が必要に応じて柔軟に変化して最適な機能を発現できる点である。しかし、この分子系の「柔らかさ」に基づく物質研究は未開拓であり、従来のカテゴリーに縛られたアプローチでは解明できない。そこで、分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算科学の叡智を集め、理論と実験を融合させた新しい学術領域を創出し、複雑系の分子科学を強力に推進する必要がある。本領域では革新的な分子理論による理解と予測、最先端計測による現象観測、合成化学や遺伝子工学を駆使した機能変換・創成研究の3つを協奏的に推進し、これらを有機的に結合することで相互理解に基づいた分野横断的な研究協力体制を構築する。これによって異分野融合と先鋭化した研究を実現すると共に広い視野を持った次世代の研究者を育成し、我が国の科学と技術の発展に大きく貢献できる複雑系の分子科学のための新しい学術領域を創造する。</p>		
	<p>(2) 研究成果の概要</p> <p>5年間の研究推進で本領域以前には全く想像出来なかった分野横断的研究ネットワークが形成された。これを基に出現頻度が少ない生体高分子の重要な構造変化をシミュレートする分子理論の開発、従来の100倍の時間分解能で複雑分子の構造ダイナミクスを一分子ごとに観測できる分子計測技術の開発、機能や進化系統の全く異なる光受容タンパク質の発見や新奇機能を示す分子集合体の創成、などの革新的な研究成果が上がり、983報の論文を発表した。領域内の150件に上る共同研究で54報の共著論文を出版し、従来の分野を超えた連携によって「動的包摂」「機能的稠密性」「機能転換の非対称性」等の柔らかな分子系の機能に関する新概念が生まれた。全体合宿会議やワークショップでの徹底した議論や毎月発行のニュースレターによる情報共有によって班員間に将来につながる人間関係が結ばれた。また自由闊達な議論や海外派遣によって若手研究者の育成を行ったが、その成果は130件を超える受賞や、大学の教授、准教授、助教などへの73名の就職・昇進として表れた。本領域の成果は公開シンポジウムや国際研究集会での456件にのぼる招待講演などによって国際的に強く発信した。研究期間終了に合わせて英国王立化学会の学術雑誌Phys. Chem. Chem. Phys.において複雑分子系に関する特集号を発刊し、新しい学術研究の潮流の起点とした。活動を通じて全班員が本領域の意義と問題意識を共有し、自発的に各々が連携、刺激しあうことで強い一体感が生まれ、想定を遙かに越える成果を達成できた。</p>		

科学研究費補助金審査部会 における所見	A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの成果があった)
	<p>本研究領域は、理論・計測・創成を統合した分子科学的な解析により、生体分子系などにみられる大きな内部自由度の機能発現への関与機構の解明について大きな成果をあげた。特に、本研究領域から新しい概念として、「動的包摂」、「機能的稠密性」、「機能転換の非対称性」が創出されたことは、この分野の今後の発展にとって大きな意義があると言える。物質科学及びその関連分野の新しい方向性を模索すべく、個々の研究を高いレベルで推進するとともに、分野横断型の研究を推進し、理論・計測・創成の垣根を越えて相互作用させた点は評価できる。特に、英国王立化学会の学術雑誌で複雑分子系に関する特集号を発行したことは、当該研究が世界レベルであることを証明していると言える。また、若手ワークショップや若手研究者の海外渡航支援など効果的な取組が実施され、多くの昇任等のキャリアパスの実績を上げていることも高く評価でき、研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの成果があったと認められる。</p> <p>一方で、「柔らかな分子系の科学」という新しい考え方に基づいて、何が明らかになっていくのか、より具体的で分かりやすい事象や概念の明確化に向けた取組が今後期待される。当該研究領域から生まれた新たな概念を軸として、教科書の一部書き換えや新項目の追加がなされるような成果が近い将来に創出されることを期待したい。</p>