



新学術領域研究「柔らかな分子系」を始めるにあたって

田原太平（理化学研究所・領域代表）

今年度から新学術領域研究「理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学(略称:柔らかな分子系)」(領域番号 2503、平成 25～29 年度)を開始することになりました。これは本領域の評価委員の先生方をはじめとする多くの方々の御指導と御協力のおかげだと思っております。領域開始に当たり、心から感謝申し上げます。

21 世紀に入ったばかりの頃、分子科学の分野では将来についての議論が盛んに行われ、分野に対する危機感や閉塞感が強く意識されました。その中で私が痛切に感じたことは、我々は一旦「分子の科学」と言うものを広く定義し直し、狭い枠を飛び出して新しい挑戦を始めるべきだということでした。素粒子物理などの一部を除く自然科学のほとんどは分子の振舞いによって理解できる現象を取り扱っています。したがって、最も分子に立脚する視点で研究を行っているわれわれが原点に立ち戻り、古い枠を外して自由な挑戦を始めれば、その前には未開の領域が広がるはずで、その広大な新しい未開地を自由に進もうとする一種の楽天的な活力、それこそが新しい事を行うための原動力なのではないかと気がつきました。基礎研究の役目は新しい可能性を追求することですから、実はこれはわれわれに常に要求されている事に他なりません。

挑戦を行うために最も大事なことは、新しい重要な問題を設定することです。この新学術領域研究を提案するにあたり、総括班の 5 人は何度も集まって今いったい何をやるべきかという事を真摯に議論しました。そして到達した考えが分子の視点に立脚した複雑分子系の研究という方向性です。

物質は単一の分子から細胞に至る階層構造を成しますが、この中で現在の化学のフロンティアは複雑系の機能の解明と創出にあると言えます。生体分子系に代表される高い機能を有する複雑系の本質は、大きい内部自由度を持ち、系が状況に応じて柔軟に変化して最適な機能を発現する、という点にあります。われわれはこのような特質をもつ複雑分子系を「柔らかな分子系」と定義し、この「柔らかな分子系」の機能の理解と利用が現在の物質科学の最も重要な問題の一つだという考えに至りました。そして、その理解と制御に向

けて、分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算科学を統合した研究を行いたいと考えました。

「柔らかな分子系」の研究は実は多体問題である複雑な現実系をどのように分子の立場で取り扱うかという問題に他なりません。その為には、例えばフェムト秒での局所的な刺激がどのようにミリ秒～秒の分子応答を引き起こすのか、あるいは数個の原子団の量子状態の変化がいかに巨大分子の機能発現につながるのかを解明しなければなりません。つまり、これまでに無い広い時間・空間スケールを俯瞰する新しい総合的な視点に立脚した研究が必要です。また、現象の観測や理解だけでは駄目で、それらに基づいて新しい機能を生み出し、利用することが必須です。このような総合的な研究はまさに言うは易く行うは難し、一つの研究グループではもちろんのこと、一方面からのアプローチでは到底達成することはできません。したがって必然的に複雑で高機能な柔らかな分子系を包括的に研究する新しい研究領域の創成が必要です。

以上のような考えに基づいて、生体分子、超分子、分子集合体、界面等に代表される柔らかな分子系とその要素過程に対して、理論計算、先端計測、機能創成の 3 つを融合した複雑系に対する新しい「分子の科学」のための学術領域の創成を提案しました。具体的には、以下の 3 つの研究グループを設け、理論計算、先端計測、機能創成が三つ巴になって「柔らかな分子系の科





学」を推進するというものです。

(1) 解析班：分子系が柔らかさを活かして機能を発現する機構を、超高速計算機の開発を背景にした革新的な分子理論による理解と予測によって明らかにする。

(2) 計測班：柔らかな分子系のもつ多様な準安定状態とダイナミクスを時間分解分光や単一分子計測などの最先端計測によって観測・解明する。また柔らかさに基づく現象の観測のための新しい手法を開発する。

(3) 創成班：合成化学・遺伝子工学を駆使して、超分子やタンパク質などの柔らかさを有する分子系の新規な機能を創成する。

考えを同じくする強力なメンバーの参加を得て行った申請は幸いにも採択され、ここに新しい挑戦を始めることができることになりました。これからさらに 30 人の公募班員の方々にこの新学術領域研究に参加していただけることになっていますが、メンバーの一人一人がおのおの時代を切り拓く気概に燃えて研究が推進できる、そんな自由闊達な新学術領域を皆さんと作り上げたいと思っています。

この新学術領域研究の志は高く、理論・計算科学、先端計測、物質創成というこれまで異なる分野として発展してきた研究領域を統合・融合し、我が国の学術研究に新しい潮流を創らんとするものです。一番大事なものは“人”ですから、この理念を実現するためには異なる分野で活躍する優れた研究者に集っていただき、その間に相互理解に基づく信頼関係を構築してもらうことが大切だと思っています。そして何にも増して、基礎研究では個人の視点、価値観、美意識が本質的に重要です。多くの異なる個性がぶつかる学術研究、**curiosity-driven research** を本気で行き、将来を拓く新しい知の創造を皆で行っていきたいと思っています。

それでは 5 年間、どうぞよろしく願いいたします。