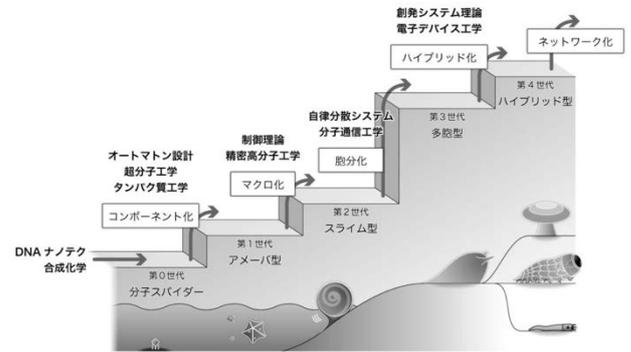


## 分子ロボティクス・イニシアティブ

### ① 計画の概要

本計画では、様々なデバイスを分子レベルで設計し、さらにそれらを組み合わせて自律的なシステムを構築する学術分野「分子ロボティクス」の発展のため、世界最先端研究を先導する研究ネットワークを形成し、応用展開のベースとなる分子ロボットの標準プロトタイプを開発するとともに、分子ロボットの応用を目指す研究者・技術者に対して様々な開発支援サービスを提供する。

現在、DNA などのプログラマブルな生体高分子を材料とする分子ナノテクノロジーが目覚ましい展開をみせており、すでに数万塩基の配列を設計して、複雑な形状の分子の創成や、分子間反応を利用した情報処理が可能になりつつある。分子ロボティクスでは



これらのデザインされた「分子パーツ」を集めてシステム化し、生物をも凌駕する機能をもつ人工分子システムを構築することを目的とする。分子ロボットは構成要素が分子にまで極小化された究極の人工システムであり、応用可能性は計り知れない。

分子ロボティクスは我が国が世界に先駆けて提唱した学術分野である。分子デバイスを自在に操り、その自己組織化能力も最大限に活用してシステムを構築するためには、化学をはじめとする物質科学の知識に加えて、情報学の原理と技術が必須であり、実際にこの分野は情報学とその関連分野であるシステム工学やロボット工学の研究者が牽引してきた。たとえば分子ロボティクスの根幹にある高分子の配列設計技術はその典型例であり、情報学的なアプローチなくしては考えられないものである。本計画では分子ロボティクスのこれまでの成果をもとに、素材分子をDNA から RNA、ペプチドや人工高分子などさまざまな非 DNA 分子に広げ、応用を目指す研究者・技術者に対しても開かれた研究開発環境を提供することで、これらの分子デバイスを統合し、汎用性の高い「システムレベル」の分子ナノテクノロジーを実現する。

### ② 学術的な意義

分子ロボティクスにより、化学的なシステムにより実現できる機能の階層は、個別の分子レベルからシステムのレベルに上がる。分子ロボティクスをオープンに発展させることで、さまざまなニーズをもつ研究者・技術者が、提供される分子パーツ群をシステムとして自在に統合可能になり、多様な応用を試すことができる。たとえば、ドラッグデリバリーに分子ロボティクスを応用する場合、体内の生化学物質の濃度や活性を入力情報として診断を行い、その結果に応じて適切な薬物の組み合わせを放出するマイクロカプセルが実現できる。あるいは、細胞内外の物理化学環境や細胞間の相互作用に応じて iPS 細胞の分化を制御する分子ロボットも可能になる。さらに、電場や磁場に応答する分子デバイスを組み込んだ人工神経細胞ロボットと半導体デバイスの組み合わせにより自己組織化・学習能力をもつ新しい原理の非ノイマン型コンピュータの構築や知能を持つ分子システムの創出ができる可能性もある。このように、分子ロボティクスは、様々な機能分子をシステム化することのできる技術であり、あたかも生物の進化におけるカンブリア爆発のように、実現できる機能の爆発的拡大をもたらすと考えられる。学術的には、分子ロボティクスは化学および生物学関連分野とシステム工学や情報学などの工学関連分野の学際領域にあり、これらの分野に対して研究手段あるいは応用の場を提供することで、きわめて広範な影響を及ぼすと考えられる。このような分子ロボティクスの大きな波及効果については、日本化学会の策定した「30年後の化学の夢ロードマップ」や JST-CRDS 俯瞰報告書にも取り上げられ、各種の生体計測・医療への応用と細胞との融合、人工細胞の実現などが予想されている。

### ③ 実施機関と実施体制

#### 中核拠点機関

東北大学

全体の統括、バーチャルラボ環境の管理運営、分子ライブラリおよび共用設備の管理運営

#### 拠点機関

東京大学

分子設計ソフト開発、設計支援

東京工業大学

DNA 計算、分子シミュレータ開発、高分子化学、設計支援

大阪大学・中央大学

生体分子応用、MEMS 開発、設計支援

名古屋大学

分子設計ソフト開発、核酸化学、生体分子応用、設計支援

九州工業大学・九州大学・電気通信大学

反応系設計、分子シミュレータ開発、DNA 計算、設計支援

京都大学

DNA・RNA デバイス開発、細胞応用、設計支援

北海道大学

生体分子応用、設計支援

北陸先端大学

核酸化学、生体分子応用、設計支援

関西大学

核酸化学、高分子設計、設計支援

鳥取大学

ペプチド工学、設計支援

産総研

高分子設計、設計支援

東京農工大学  
埼玉大学  
慶應義塾大学  
甲南大学

電気化学、ナノポア工学、設計支援  
分子進化学、ペプチド工学、設計支援  
反応系設計、マイクロリアクタ、設計支援  
ペプチド工学、タンパク質工学、設計支援

#### ④ 所要経費

総経費 100 億円

内訳

人件費 30 億円

各研究拠点への研究者配置（特任准教授、助教、PD 20 名×10 年間雇用）＝15 億円

ソフトウェア開発のための技術者配置（特任准教授、助教、PD 3 名×10 年間雇用）＝3 億円

ソフトウェア外注費 1 億円×10 年＝10 億円

計測技術員（助教クラスを3名×10 年間雇用）＝2 億円

大型測定装置等整備費 20 億円

中核機関の共用装置整備（TEM、CryoEM 等とその維持費）＝5 億円

拠点機関の研究環境整備＝5 億円

分子ロボット設計支援クラウド構築（1000 ノード GPU マシン）＝10 億円

経常経費 50 億円

スペース課金、事務経費、旅費等 年間1 億円×10 年＝10 億円

消耗品費（ライブラリ整備費含む） 年間4 億円×10 年＝40 億円

#### ⑤ 進捗状況

##### ○予算措置

科研費では、基盤 S × 1 件、基盤 A × 5 件、基盤 B × 5 件等が実施されており、また、NEDO 人工筋肉プロジェクトや、JST 分子ロボティクス倫理プロジェクトも実施中である。JST A-Step による人工核酸開発や、NEDO の支援によるペプチド分子デザインのベンチャー設立もある。今後のさらに大型で集中的な予算措置によってさらなる発展が見込める段階にきている。

##### ○年次計画

###### 第 I 期（3 年）

中核研究拠点、各研究拠点の研究者体制および設備の拡充を行い、分子ロボット開発のベースとなる DNA を主な分子材料とする「標準プロトタイプ」を開発するとともに、主要パーツの供給体制を確立し、応用を目指す研究者・技術者に公開する。また、分子設計やシミュレーションのためのソフトウェアの継続的な開発ができる体制とソフトウェアを使った設計支援体制を整える。分子ロボットの応用を目指す研究者・技術者に対する導入障壁を下げ、応用開発への流れを作る。

###### 第 II 期（4 年）

第 I 期の標準プロトタイプに加えて、非 DNA 素材に設計可能な分子種を拡大し、順次 RNA、ペプチド、高分子等を素材とする互換分子パーツ群の供給を開始する。分子設計、合成、シミュレーションなど各方面から、具体的ニーズをもった研究者・技術者の応用システム開発を支援する。拠点外にも研究公募を行い、手薄な分野の補強や応用に向けた技術の多様性を確保する。

###### 第 III 期（3 年）

第 II 期の事例をもとに、特に有用性・汎用性の高い機能を抽出し、機能モジュールとしてパッケージ化することで、高度な機能をもつ分子システムの実装を効率的にできるようにし、本格的な応用へ向け大規模なシステム開発を支援する。プロジェクト全体として得られた知見を分子ロボティクスの技術体系としてわかりやすくまとめ、さらに次の段階への橋渡しとする。

#### ⑥ 社会的価値

核酸、タンパク質など情報をもった高分子の配列の組み合わせを改変することで生物は驚くべき進化を遂げた。この原理を体系的・階層的にスケールアップするのが分子ロボティクスである。ここでは、分子の性質や相互作用ももちろん重要であるが、無限ともいえる配列の組み合わせをいかに望みの機能を持つように最適化するかという情報の観点がより本質的であり、情報学の原理と技術なくしては成立しない。生物が 30 億年かけて試行錯誤で進化したのに対し、合理設計で分子からシステムを構築する分子ロボティクスのインパクトは大きく、人工物のあり方そのものの根本的な見直しにつながる。また、新規産業の創出や健康を増進するための新規技術を通して SDGs への貢献も期待できる。近年は、具体的な応用を見据え、分子ロボティクス倫理綱領に関する議論も始まっている。本計画の目標は、分子ロボティクスの基盤を確立することで、新しいテクノロジーを担う人材を育成し、新産業の創生へ向けた流れを生み出すことにある。こうしたシステムレベルのナノテクノロジーは、限界に近いといわれる半導体に代わる次世代の産業基盤となる可能性が高く、国を挙げた取り組みが望まれる。

#### ⑦ 本計画に関する連絡先

瀧ノ上 正浩（東京工業大学・情報理工学院）

