

## 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、さまざま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各種の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、生物をも凌駕するような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、その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、その応用の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 目的と実施内容

本計画の目的は、「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、分子ロボットの標準プロトタイプを開発するとともに、分子ロボットを応用しようとする研究者・技術者に対しても様々な開発支援サービスを提供することである。

#### 1) 研究ネットワーク形成と運営体制

各拠点をシステム・情報系の研究者が先導する研究組織として、標準プロトタイプ分子ロボットの開発に臨む。多様な分野から結集する研究者が緊密に連携することのできる風通しのよい研究環境として、分子設計環境、シミュレーション環境や実験結果を共有するための「クラウド研究環境」を構築する。また、必要に応じて研究者を公募し、オールジャパン体制で分子ロボティクスの研究ネットワークをつくる。

#### 2) 分子ロボットの開発支援サービスの提供

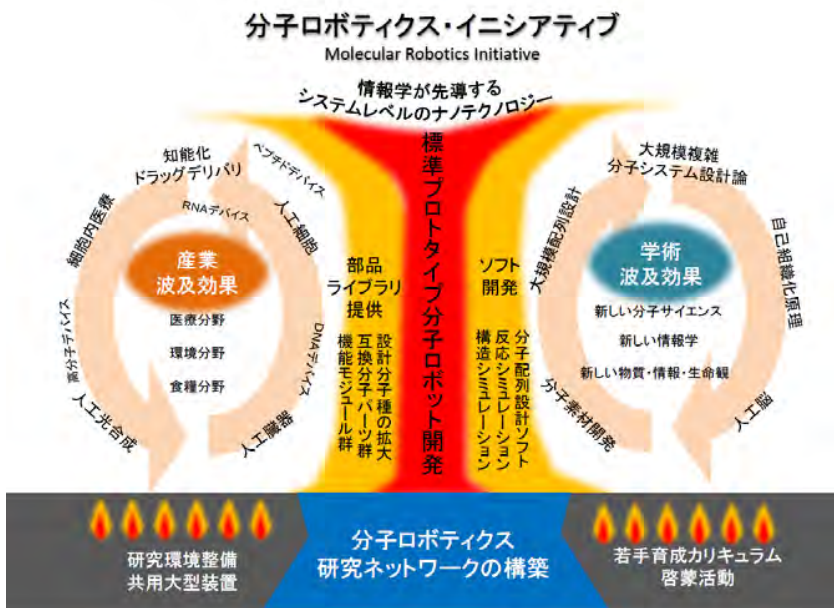
- i) ソフトウェア開発と設計支援サービス：分子設計ソフトウェアとシミュレーションソフトウェアの開発を専門に行う組織を置き、開発したソフトを利用する研究者・技術者に設計支援サービスを提供する。
- ii) 分子パーツライブラリの整備：標準プロトタイプ分子ロボットを基本として、組み合わせやすい（互換性のある）分子部品群をライブラリとして整備し、分子ロボットの応用を目指す研究者・技術者に提供する。
- iii) 大型共用装置と研究環境整備：分子ロボティクス研究に不可欠である透過型電子顕微鏡（TEM）等の大型装置を共用装置として中核拠点到整備し、各拠点においても研究設備の拡充を図る。

#### 3) 若手研究者の育成と啓蒙活動

分子ロボティクスでは、関連諸学の広くかつ深い理解が必要とされるため、研究ネットワーク全体で教育カリキュラムを構築し、若手や初学者の学習を支援する。また、分子ロボティクスの啓蒙普及のため、広く社会へ向けた情報発信を行う。

### ③ 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が構築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。

#### ④ 国内外の動向と当該研究計画の位置づけ

1980年代にはじまった DNA ナノテクは、DNA オリガミの発明を契機に飛躍的に研究者人口が増え、欧米を中心に急速に進展している。分子形状のデザインや分子計算の原理を検証する段階を越え、どこまで複雑なシステムを作れるかという大規模化・高機能化へ研究の前線が移ってきている。分子ロボットは、その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、テクノロジーの根幹の革新をもたらすものとして、その注目度は極めて高い。

わが国においても、新学術領域「分子ロボティクス」を中心に活発に研究が行われている。そこでは DNA ナノテクに加えて、核酸化学、高分子化学、生物物理学、機械工学など、幅広い分野の研究者が結集して、多様な分子材料のシステム化を目指している点に特色がある。本研究計画の提案は、この強みを生かし、情報学的原理と技術を駆使して無限の分子配列空間を自在に操ることにより、大規模かつ複雑な分子システムの構築を目指す。

#### ⑤ 実施機関と実施体制

中核拠点機関：東北大学（全体の統括、クラウド研究環境・分子ライブラリ・共用設備の管理運営）

拠点機関：東京大学、大阪大学、名古屋大学、東京工業大学、九州大学、九州工業大学、京都大学、北海道大学、北陸先端大学、関西大学、鳥取大学、産総研（反応系設計、高分子設計、設計支援、分子設計ソフト・シミュレータ開発、DNA・RNA デバイス開発、MEMS 開発、核酸化学、ペプチド工学、細胞・生体分子応用）

#### ⑥ 所要経費

総経費 100 億円：内訳 人件費 30 億円（特任准教授・助教・PD×23 名×10 年、計測技術員 3 名×10 年、ソフトウェア外注費）、大型測定装置等整備費 20 億円（TEM, CryoEM 等とその維持費、研究環境整備、設計支援クラウド構築（1000 ノード GPU マシン））、經常経費 50 億円（スペース課金、事務経費、旅費等、消耗品費（含ライブラリ整備費）×10 年）

#### ⑦ 年次計画

第 I 期（3 年）：第 I 期においては、まず、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、その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について、継続的な開発ができる体制を確立し、これらのソフトウェアを使った設計支援体制を整える。これらの基盤構築により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 期で開発された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、具体的な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。あわせて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、研究者・技術者の本格的な応用へ向けた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。

#### ⑧ 社会的価値

DNA、RNA、たんぱく質など生体を構成する分子は、いずれも配列をもつ高分子であり、その配列を改変することで生物は驚くべき進化を遂げた。この原理を人工的に応用するのが DNA ナノテクであり、それを体系的、階層的にスケールアップしようとするのが分子ロボティクスである。ここでは、ケミストリーが扱う分子そのものの性質や分子間の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して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えない。生物が 30 億年の時間をかけて試行錯誤で進化したのに対し、合理設計で分子レベル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、人工物のありかたの根本的な見直しにつながるものである。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、新しい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、限界が近いといわれるシリコン半導体にかわって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。

#### ⑨ 本計画に関する連絡先：村田 智（東北大学大学院工学研究科）