

ATTAATC A AAGA C CTAAC TCTAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
CTCGCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTAAC TCTAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAAC
TGA C CTAAC TCTAGACC

戦略イニシアティブ 分子技術

“分子レベルからの新機能創出”
～異分野融合による持続可能社会への貢献～

STRATEGIC INITIATIVE

Molecular Technology 0 1 0 1 0 0 0 1 1 1 0 1 0 1 0 0 0 0 1

0 0 1 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 1 1 0

0 1 0 1 1 1

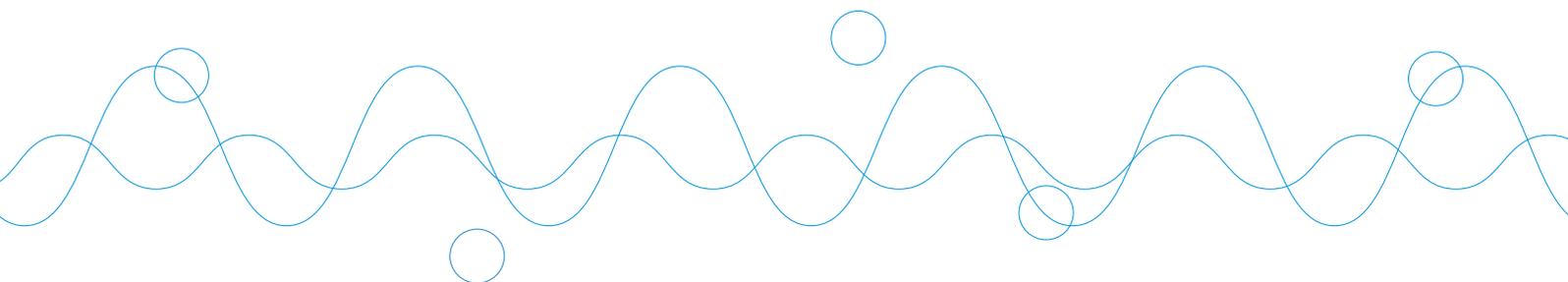
“The creation of novel functions from molecular levels” 1 1 0 1 0 1 0 0 0 0 1

-To assure sustainable society by fusing multi-disciplinary fields-

0 0 1 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 1 1 0

0 1 0 1 1 1

0 0 1 1 0 1 1 1 1 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 1 1



研究開発戦略センターでは、国として重点的に推進すべき研究領域や課題を選び、以下3種類いずれかの戦略プロポーザルとして発行している。

戦略イニシアティブ

国として大々的に推進すべき研究で、社会ビジョンの実現に貢献し、科学技術の促進に寄与する

戦略プログラム

研究分野を設定し、各チームが協調、競争的に研究することによって、その分野を発展させる

戦略プロジェクト

共通目的を設定し、各チームがこれに向かって研究することによって、その分野を発展させると同時に共通の目的を達成する

エグゼクティブサマリー

「分子技術」とは、物理学・化学・生物学・数学等の科学的知見を基に、分子を設計・合成・操作・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するための一連の技術である。それにより、新材料、新デバイス、新プロセス、有用物質等の創出に資することを意図した、分子の自在制御を目的とする技術の総称である。なお、「分子技術」に対比する言葉として「分子科学」があるが、分子科学とは広く分子及び分子集合体の構造や物性を分子のレベルで解明し、化学反応や分子間の相互作用及びその本質を、理論と実験の両面から明らかにすることを目的とする学問である。従って、分子科学が与える知見・理解は、「分子技術」を構築する上で基盤となるものである。本イニシアティブは、このような「分子技術」を総合的に研究開発することを提案する。

従来の分子科学では、自然界を観察し、探索することによって、様々な分子を発見・解析し、天然の分子を人工的に模倣することで、同様の機能を得てきた。しかし近年の新たな流れとして、このように自然界にモデルを求めずとも、目的とする機能を設計し、それに合った物質を得るという研究開発事例が見出されるようになってきた。その背景には、分子設計や反応シミュレーション等に用いるコンピュータの急速な性能向上や、X線・電子線等により化学反応過程をリアルタイムに測定・解析する *in situ* のプロセスモニタ技術等の著しい進展がある。

本イニシアティブでは、このような背景のもとで「分子技術」全体を分子の特性から機能創出に至るプロセスを通して分析した結果、「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る6つの横断的技術概念で捉えなおし、研究開発を推進することを提案する（図1-1参照）¹。これにより、様々な応用分野、専門分野で各々活動している接点の少ない研究者が、「分子技術」という共通の土台に立って、互いの研究・技術を見つめ直すことができるようになり、新たな展開が期待できる。

これまでの研究投資では、「太陽電池」や「創薬」等といった応用テーマ毎に分かれて課題を解決しようとする施策が主流であった。しかしながら本イニシアティブでは、応用においてボトルネックとなっている技術的課題を、上記6つの横断的技術概念に立脚した考え方で捉え直し、多様な分野の研究者が共通の科学的概念を持って研究に取り組めるよう意図している。これを実行して行くためには、化学・物理学・生物学・数学の研究者が連携するような、学術分野間の融合が必要である。更に、このような研究開発の成果を、各応用方面へ「分子技術」として進展させていくためには、基礎科学者と工学者、更には産業界との協力体制が重要である。

1 分子の特性から機能創出に至るプロセスで「分子技術」を捉えると、①分子の設計や創成に関係する技術に加え、②分子を変換して別の分子に変換する技術（反応制御）、分子の構成要素である③電子の状態を制御する技術、④分子の3次元構造に由来する形状や構造を制御する技術、分子が集合することにより新たな機能が創出できるため、⑤集合体・複合体の制御に関係する技術、更に⑥分子あるいはイオン状態の分子を輸送・移動させる技術、が考えられ、このような6つの技術概念を提唱するに至った。



図 1-1 「分子技術」を構成する技術概念

本イニシアティブは、文部科学省、経済産業省等が連携して推進する必要がある、また関連諸学会、すなわち、日本化学会、日本物理学会、応用物理学会、日本薬学会、日本分子生物学会等が連携し、学会間の壁を取り払って異分野融合を促進する活動が求められる。

以上のような「分子技術」の研究開発は、従来の化学や物理学、生物学、数学といった学術分野単独の知見では推進が困難であり、応用課題上のボトルネックを共通の課題として分野融合的に取り上げて、それを克服する体系を構築することが重要である。諸外国ではまだ積極的に意識されていないこのような戦略を、世界に先駆けて推進することで、国際的にリードできる可能性がある。

本イニシアティブの概念を図 1-2 に示す。

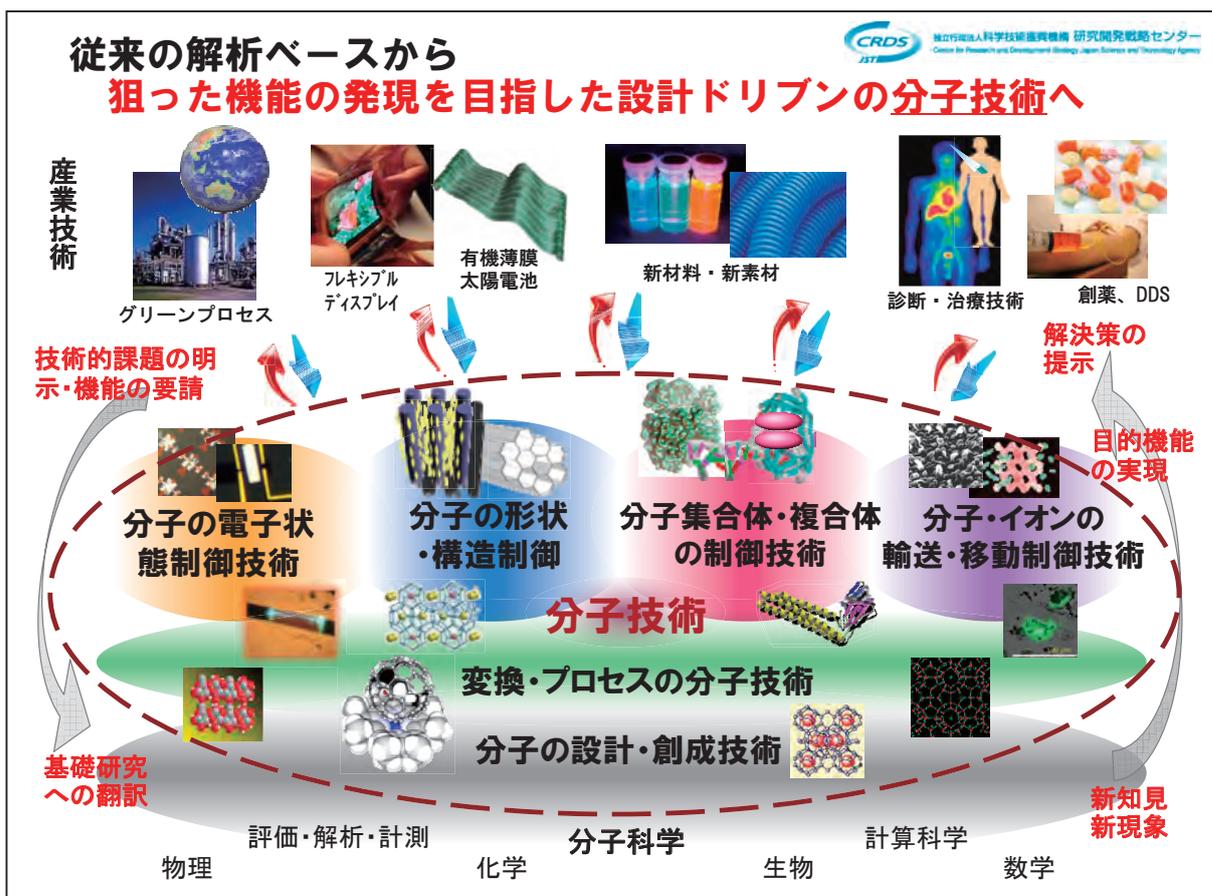


図 1-2 「分子技術」の概念 (イメージ図)

Executive Summary

“Molecular technology” is a series of techniques to exploit fully features of molecules to create the desired functions by designing, synthesizing, operating, controlling, and integrating molecules on the basis of scientific findings in fields of physics, chemistry, biology and mathematics. Molecular technology is a general term of technologies aiming at free control of molecules in intent to create new materials, new devices, new processes, and useful materials, etc. This initiative proposes promotion of research and development by embracing “Molecular technology” from the cross-cutting perspective and by providing the comprehensive framework. Furthermore, this initiative leads to a noble development because researchers of various fields without any connections can reconsider mutual works on the common basis of “Molecular Technology”.

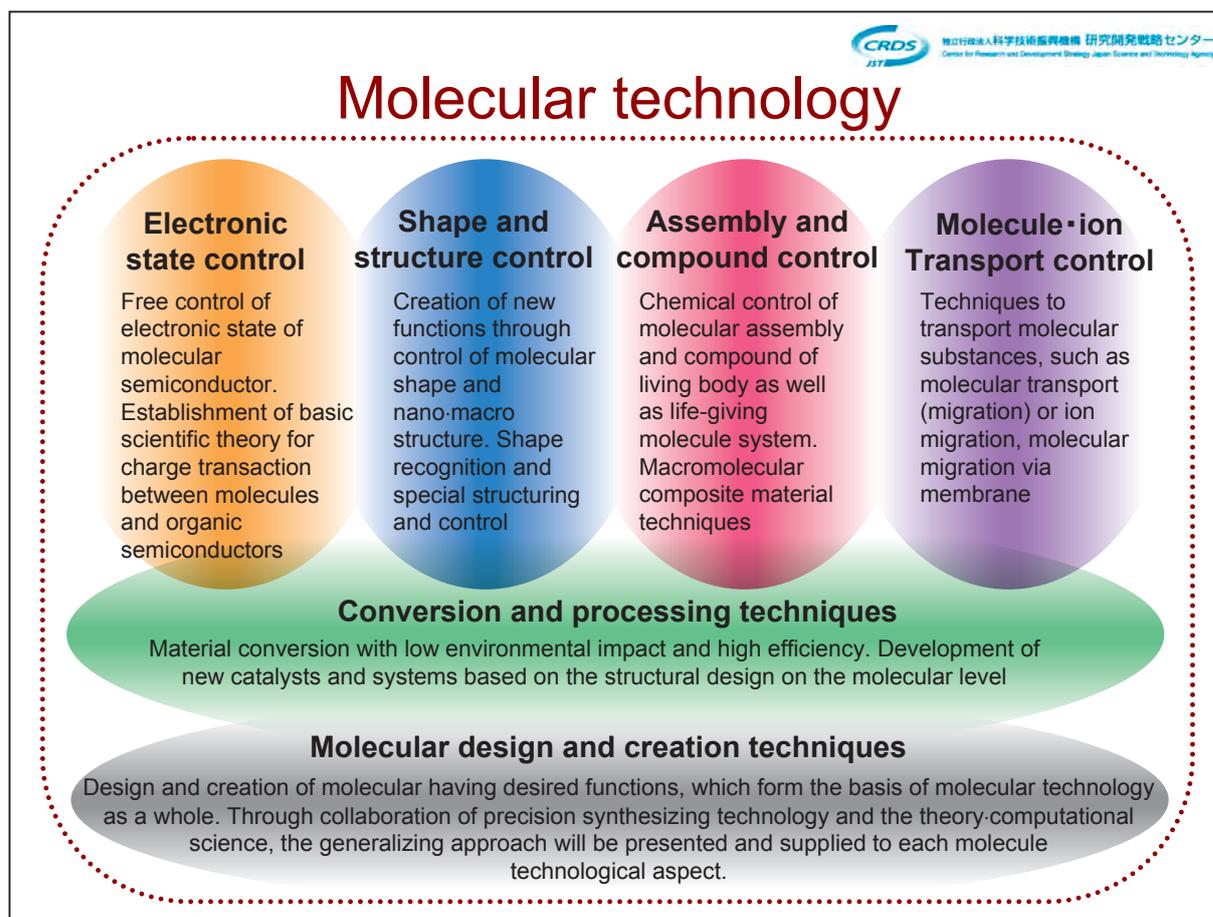
In the conventional molecular science field, the similar functions were obtained by copying artificially natural molecules identified through discovery and analysis of various molecules in the course of observing and exploring through the nature. Recent new trend, however, is not to seek a model in the nature, but is to design the target functions first, followed by obtaining the substance compatible with such functions, as is observed in several research and development cases. Behind such a trend are the rapid performance upgrade of computers used in molecular designing and reaction simulation, the rapid progress of *in situ* process monitoring technologies for real-time measurement and analysis of chemical reaction process by means of X-rays and electron beams.

We propose here for funding the review of rapidly-advancing molecular technology as a whole from six cross-cutting technical aspects. They are the molecular design and creation techniques, molecular conversion and processing techniques, molecular electronic state control techniques, molecular shape and structure control techniques, molecular assembly and complex control techniques, and molecule · ion transport control techniques (see the following table).

The mainstream is “funding” to solve issues separately in fields, each with individual application theme, such as “solar cell”, “drug discovery”, etc. Funding is intended to review technical issues presenting bottlenecks for application according to the concept based on above six cross-cutting aspects, thereby allowing researchers of various fields to challenge the study while being equipped with common scientific concepts. For such purpose to be achieved, it is essential to take the interdisciplinary approach. Namely, researchers from chemistry, physics, biology and mathematics are to coordinate and interlink.

If these R & D achievements are to be developed into “Molecular Technology” in each

Table “Molecular Technology”



application field, it is important first to establish the cooperation system between the engineers engaged in device realization and in application fields (drug development, etc.) and the industries in charge of mass production and marketing. Through merging of cross-cutting technical fields in the established cooperation system, R & D achievements must be established as individual molecular technology.

This initiative must be cooperatively driven by both MEXT and METI. Moreover, related scientific societies such as The Chemical Society of Japan, The Physical Society of Japan, Japan Society of Applied Physics, The Pharmaceutical Society of Japan, The Molecular Biology Society of Japan, etc. are needed to promote the interdisciplinary fusion by the removal of walls existing among societies.

As described so far, R & D in the molecular technology is difficult to move forward solely by the independent findings of conventional scientific fields, such as chemistry, physics, biology and mathematics. What is important is to take up and overcome the bottlenecks in applications as common issues based on the interdisciplinary merged fields. Note that cross-cutting funding covering the whole of molecular technology has

not yet been implemented inside and outside Japan. It may be that, by implementing funding early in Japan, we may take the leadership of the world in this field.

In conclusion, the contents of this initiative must be started as early as possible and implemented within the medium- to long-term scope.

目 次

エグゼクティブサマリー

1. 提案の内容	1
2. 研究投資する意義	6
3. 具体的な研究開発課題	7
4. 研究開発の推進方法	9
5. 科学技術上の効果	11
6. 社会・経済的効果	12
7. 時間軸に関する考察	13
8. 検討の経緯	14
専門用語説明.....	18
参考文献.....	21

1 提案の内容

「分子技術」とは、物理学・化学・生物学・数学等の科学的知見を基に、分子を設計・合成・操作・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するための一連の技術である。それにより、新材料、新デバイス、新プロセス、有用物質等の創出に資することを意図した、分子の自在制御を目的とする技術の総称である。なお、「分子技術」に対比する言葉として「分子科学」があるが、分子科学とは広く分子及び分子集合体の構造や物性を分子のレベルで解明し、化学反応や分子間の相互作用及びその本質を、理論と実験の両面から明らかにすることを目的とする学問である。従って、分子科学が与える知見・理解は、「分子技術」を構築する上で基盤となるものである。本イニシアティブは、このような「分子技術」を総合的に研究開発することを提案する。

環境・エネルギーや医療・健康分野等における社会的な課題の解決には、物質・材料あるいは素材のイノベーションが不可欠である。例えば、低環境負荷な発電技術として注目されるようになってきた有機太陽電池の開発では、フラーレンという分子からなる薄膜の n型半導体としての導入が大きな進展に繋がっている。また、創薬の世界では病因となるタンパク質等を特異的に阻害する分子の構造や形状がコンピュータ上で設計できるようになり、副作用が大幅に軽減され、疾患部をピンポイントで狙う分子標的薬が可能になってきた。従来の分子科学では、自然界を観察し、探索することによって、様々な分子を発見・解析し、天然の分子を人工的に模倣することで、同様の機能を得てきた。しかし近年の新たな流れとして、このように自然界にモデルを求めずとも、目的とする機能を設計し、それに合った物質を得るという研究開発事例が見出されるようになってきた。その背景には、分子設計や反応シミュレーション等に用いるコンピュータの急速な性能向上や、X線・電子線等により化学反応過程をリアルタイムに測定・解析する in situ のプロセスモニタ技術等の著しい進展がある。

本イニシアティブでは、このような背景のもとで「分子技術」全体を分子の特性から機能創出に至るプロセスを通して分析した結果、「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る6つの横断的技術概念で捉えなおし、研究開発を推進することを提案する（図1-1参照）¹。これにより、様々な応用分野、専門分野で各々活動している接点の少ない研究者が、「分子技術」という共通の土台に立って、互いの研究・技術を見つめ直すことができるようになり、新たな展開が生れることが期待できる。

これまでの研究投資では、「太陽電池」や「創薬」等といった応用テーマ毎に分かれて

（注）下線は、巻末の専門用語説明で解説していることを示す。

1 分子の特性から機能創出に至るプロセスで「分子技術」を捉えると、①分子の設計や創成に関係する技術に加え、②分子を変換して別の分子に変換する技術（反応制御）、分子の構成要素である③電子の状態を制御する技術、④分子の3次元構造に由来する形状や構造を制御する技術、分子が集合することにより新たな機能が創出できるため、⑤集合体・複合体の制御に関係する技術、更に⑥分子あるいはイオン状態の分子を輸送・移動させる技術、が考えられ、このような6つの技術概念を提唱するに至った。



図 1-1 「分子技術」を構成する技術概念

課題を解決しようとする施策が主流であった。しかしながら本イニシアティブでは、応用においてボトルネックとなっている技術的課題を、上記 6 つの横断的技術概念に立脚した考え方で捉え直し、多様な分野の研究者が共通の科学的概念を持って研究に取り組めるよう意図している。これを実行して行くためには、分子を合成する化学、分子の物性・理論を研究する物理学、生体分子・生命システムを研究する生物学、計算理論・モデルを研究する数学の研究者が連携するような、学術分野間の融合が必要である。更に、このような研究開発の成果を、各応用方面へ「分子技術」として進展させていくためには、デバイス構築や医薬品開発等の各応用分野に応じた工学者と量産・市場化等を担う産業界との協力体制を構築し、設計技術や分析技術等の技術分野間の融合によってそれぞれの「分子技術」として確立していくことが重要となる。

本イニシアティブは、文部科学省による基礎基盤的な研究やイノベーションに向けた研究開発、経済産業省による産業化に直結する研究開発、そして両省・両機関の連携による推進が望まれる。また、関連諸学会、すなわち、日本化学会、日本物理学会、応用物理学会、日本薬学会、日本分子生物学会等が連携し、学会間の壁を取り払って異分野融合を促進する活動が求められる。

以上のような「分子技術」の研究開発は、従来の化学や物理学、生物学、数学といった

学術分野単独の知見では推進が困難であり、応用課題上のボトルネックを共通の課題として分野融合的に取り上げて、それを克服する体系を構築することが重要である。諸外国ではまだ積極的に意識されていないこのような戦略を、世界に先駆けて推進することで、国際的にリードできる可能性がある。

本イニシアティブの概念を図 1-2 に示す。

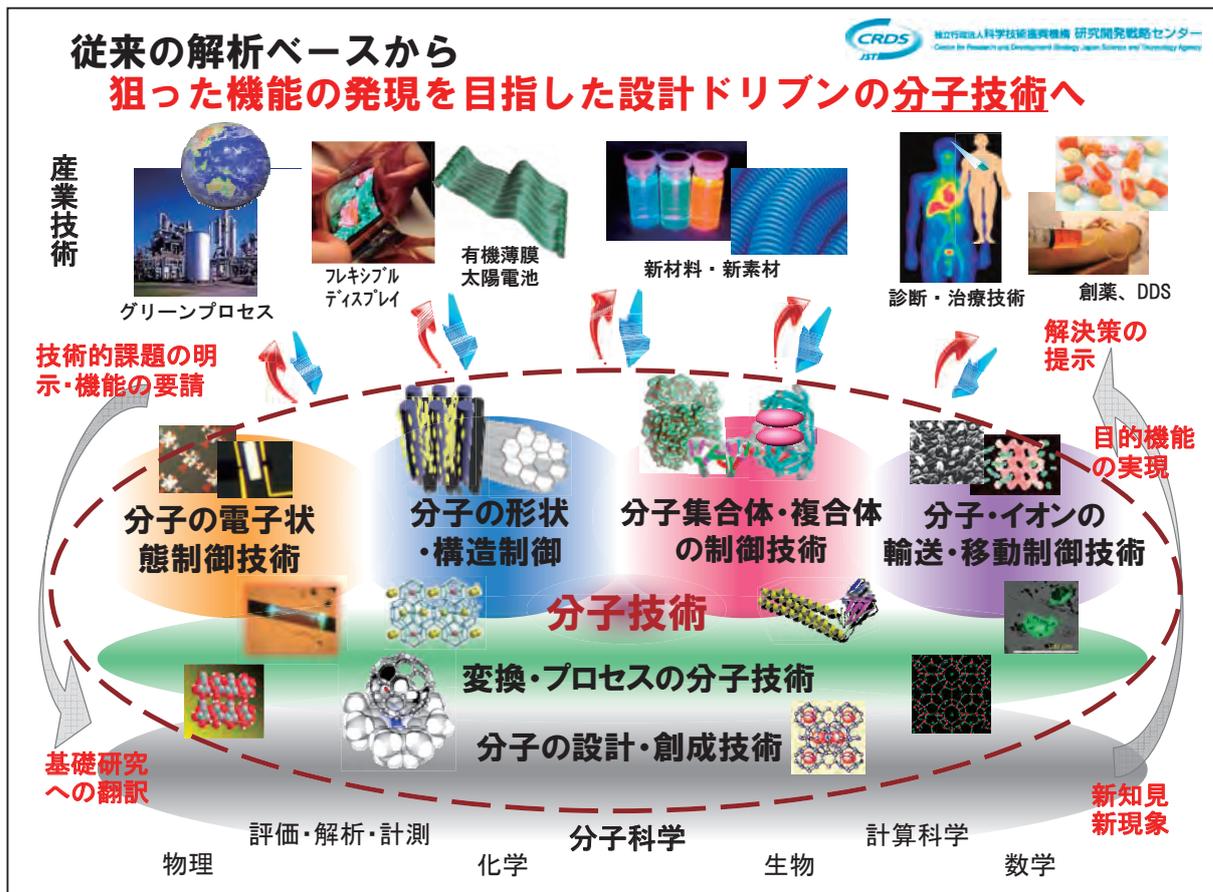


図 1-2 「分子技術」の概念 (イメージ図)

(コラム)

+++++

分子技術への流れ (エレクトロニクスを例に)

20 世紀のエレクトロニクスは、シリコンを中心とする半導体技術が牽引した。しかし 21 世紀に入って、以下のような問題が指摘されている。

- ・ 微細化の限界
- ・ 製造工程の高環境負荷
- ・ 製造設備の巨大化、巨額化
- ・ 半導体材料の使用元素多様性の限界

分子は、現在約 3000 万種が既知であり、しかも設計により無限の分子が入手可能であるため、合目的物質の入手が可能である (高い多様性)。また、分子材料の場合、常温・常圧で製造できる可能性があり (低環境負荷製造)、印刷等の安価で小型な製造設備がデバイス製作に適用できる。しかし、分子材料に懸念されるのが、信頼性や寿命の問題であるが、要求される機能をいくつかに分離することにより、既に有機感光体や有機 EL 等で実現しているように、高信頼性・長寿命が達成されている。

更に分子材料ならではのメリットとして、フレキシブルなデバイスの製作を挙げることができる。高い柔軟性、軽量性等を備えたフレキシブルデバイスが開発されれば、従来のシリコンテクノロジーでは成し得なかった応用分野 (ウェアラブル、軽量・超薄型デバイス等) が拓けてくることが期待される。

このような次世代のエレクトロニクスを進展させるためには、要求される機能に応じた新しい分子の設計・創成が必要であり、その分子を自在に制御して目的とする機能が発現できるようにしなければならない。これこそが、正に「分子技術」であり、「分子技術」は 21 世紀の基幹的技術の一つに成り得ると言えるだろう。

+++++

(コラム)

+++++

「分子技術」の視点で捉えた DDS 開発

DDS (Drug Delivery System : 薬剤輸送システム) とは、体の中における薬物の動きを精密に制御して、標的とする部位 (臓器、組織等) に高濃度にしかも時間も制御して薬物を送達することにより、有効且つ安全な治療を実現する薬物投与の方法論である。より一般化して言うと、人体の中に様々な物質・物体をその動きあるいは場所を制御して導入し機能を発揮させる技術であり、その意味で DDS 技術は、物質移動の視点から体のシステムの特性を解析し工学的に制御する技術と位置付けることもできる。また、化合物の構造と動態の相関解析 (QSAR) やスーパーコンピュータを用いた体内における薬物動態シミュレーション等、情報科学的なアプローチとも密接に関連する分野である。

現在、DDS という概念のもとに様々な技術が開発され、一部は実用化されている。体内における薬物の動態をいかに制御し、またその機能を評価するかは、体と病気と薬物の三者の関係の中で議論され、学問分野としては医学、薬学、工学 (ナノテク) が基盤である。薬剤を包含する材料分子の創成、効率良く輸送するための輸送技術の開発等、薬剤輸送制御を中心とする「分子技術」と深く関わっている。

+++++

2 投資する意義

本研究分野に投資する意義は、以下の2つに集約される。

第一に、環境・エネルギー、医療・健康等に関する社会ニーズに対応して諸問題の解決に貢献し、持続性社会の実現に資することである。「分子技術」により、要求される機能から目的とする分子が創出され自在に制御できるようになると、その結果として幅広い社会ニーズや産業分野での課題解決に適用することが可能となる。それは最終的には、持続性社会の実現に大きく寄与するところとなる。この過程において日本の技術的な強みが一層向上し、「分子技術」を日本が先導することで産業の国際的優位性を確保できる。

例えば、以下のような分野での実用化・製品化が考えられる。

- ①情報：超低消費電力のコンピュータ、ウェアラブル情報端末
- ②エネルギー：超高効率の太陽電池、人工光合成、脱化石資源、高密度二次電池
- ③環境：高度環境モニタリング、低コスト造水・水浄化
- ④医療：再生医療材料、高機能 DDS

第二に、「分子技術」という新しい技術分野が確立されることである。また、「分子技術」を展開・体系化する過程において、物理学、化学、生物学、数学の学術分野及び工学分野の融合が促進され、更に材料設計やプロセス技術等の技術融合が促進されることである。これは、「分子技術」の研究開発には様々な基礎科学が必要であり、技術として確立するために工学分野の貢献と技術融合が必須になることを意味している。諸外国ではまだ積極的に意識されていないこの戦略を、世界に先駆けて推進することで、本技術分野で国際的にリードすることが期待できる。

3 具体的な研究開発課題

本イニシアティブでは、包括的な取り組みによって「分子技術」を技術として確立し、目的とする機能を発現する分子の創出と自在制御を目指している。具体的には、分子の特性から機能を生み出すプロセスを6つの技術概念で捉え、様々な応用分野からの要請に応える研究開発が可能な技術領域として醸成していく。そして個々の「分子技術」で重要な基盤的研究課題を実施することが必要である。以下に具体的な研究開発課題の例を挙げる。

(1) 「分子の設計・創成技術」

分子の設計・創成技術とは、様々な分子技術概念の基盤をなす技術であり、主として非天然・人工による新規機能性物質の創成を目指す技術である。それはすなわち、「目的とする機能を持つ物質を思うがまま（希望するがまま）」に設計し、合成する指導原理を与える技術である。従来型の「勘」と「経験」に大きく頼る手法から踏み出し、合成と理論が密接に協力し、効率的に新たな一般化手法を提供するための「分子技術」である。以下のような研究課題例が考えられる。

- ・機能から分子を創出するための理論創成とシミュレーション技術の開発
- ・分子構造の予測を可能にする分子デザイン手法の開拓
- ・機能設計・予測に基づく精密合成法の開発
- ・分子性物質の高純度精製法の開発

(2) 「変換・プロセスの分子技術」

変換・プロセスの分子技術とは、低環境負荷・高効率物質変換のための新しい触媒開発等を通じて、限られた地球資源の徹底活用を成し得る物質の変換・プロセスを構築する技術である。具体的には、以下のような研究課題例が挙げられる。

- ・酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング触媒の開発
- ・金属フリー有機合成触媒の開発
- ・触媒・生成物の *in situ* キャラクターゼーション法の開発
- ・マイクロ反応装置等によるシステムケミストリーの開拓
- ・原料転換プロセスの開発（未利用化石資源、バイオマス等の利用）
- ・室温稼働化学プロセスの開発

(3) 「分子の電子状態制御技術」

分子の電子状態制御技術とは、半導体等の電子デバイスにおける電子状態制御に関係する技術であり、分子を用いた電子デバイスの実現に深く関わってくる。以下のような研究課題例が挙げられる。

- ・電極—有機分子間（電荷注入）、有機分子同士（電荷輸送）の電荷授受の機構解明
- ・高純度化によるキャリアトラップの解消

- ・ 分子性物質の純度測定評価技術の開発
- ・ デバイス上での分子配列技術・階層性構築制御技術の確立
- ・ 液体半導体等による自己修復可能なデバイスの開発
- ・ 分子性物質・分子材料の劣化機構の解明

(4) 「分子の形状・構造制御技術」

分子の形状・構造制御技術とは、分子合成、分子変換、分子相互作用、分子認識、分子配列、分子集積、自己組織化等に基づいて創成される分子レベルのナノ構造から、実用材料を構築するための1次元、2次元、3次元のマクロ構造を自在に創成する技術であり、分子の形や構造を厳密に制御することにより、新たな機能の創出に繋げるための技術である。形状認識や特殊構造構築・制御に関係する「分子技術」が包含される。以下のような研究課題例が挙げられる。

- ・ 自己組織化等ビルドアップ及びトップダウン手法による空間空隙構造形成技術
- ・ ナノからマクロ構造への規模拡大技術、高強度化、高速合成、低コスト化
- ・ マクロ構造を持つ材料における物理的諸現象（貯蔵、物質・エネルギー変換等）の観測・解析技術
- ・ 計算機シミュレーションによるマクロ構造の合成および構造・機能の設計・解析

(5) 「分子集合体・複合体の制御技術」

分子集合体・複合体の制御技術とは、分子集合体・複合体の形成や機能解析・化学制御等に関係する技術である。以下のような研究課題例が挙げられる。

- ・ 電子デバイス表面における分子集合体の精密配置技術の開発
- ・ 創薬開発を目指した分子集合体の動的構造変化と機能制御の解析
- ・ タンパク質への非天然アミノ酸導入による人工酵素の構築
- ・ 液体分子の構造と機能制御の解析とシミュレーション

(6) 「分子・イオンの輸送・移動制御技術」

分子・イオンの輸送・移動制御技術とは、分子やイオン等の輸送（移動）に関係する技術である。膜物質を介した分子の輸送速度や選択性の向上等が主要な課題となる。以下のような研究課題例が挙げられる。

- ・ 電極への効率的なイオンの挿入・移動を可能にする有機蓄電材料の開発
- ・ 不純物の選択的移送と捕捉を目指した超高性能分離膜の開発
- ・ 高効率の薬物輸送を実現する高度 DDS の開発

4 研究開発の推進方法

本提案は、環境・エネルギー、医療・健康等に関する分野への広範な応用が期待できる戦略イニシアティブであり、関係する文部科学省、経済産業省等による一体的な取り組みが望まれる。この中では、人材育成も研究開発成果と見なす観点、さらにはNOE (Network of Excellence) の形成も必要である。広範囲に展開するため、日本化学会、応用物理学会、日本物理学会、日本薬学会、日本分子生物学会等が連携し、学会間の壁を突破する活動につなげることが重要である。これは会員数の低下に直面し停滞気味の学会活動を活性化する上でも必須である。

基礎研究が最終的な実用化に結びつくまで、比較的長期間を有するテーマも多いことから、基礎から出口へつなげていくシームレスな研究投資の仕組みを考える必要がある。例えば、純粋基礎研究、目的基礎研究、応用・実用化研究、産業化の4つのステージの間にステージゲートを設け、それぞれのステージゲートをクリアした研究には、次のステージのファンディングを用意する等の方法が考えられる。ただし具体的な研究課題を設定する際には、将来必要な技術テーマに関して、できる限り産業界の意見にも耳を傾け、それを反映させることも必要である。例えば、研究課題を設定する前に、そのテーマに関して産業界の専門家の意見を聞くワークショップ等を開催して広く意見を求めること等は有効であろう。

「分子技術」がわが国の将来を左右する基幹技術であることを強く意識し、戦略性のある研究開発投資を実施するとともに、若い研究者に夢と希望を与える挑戦的なテーマの設定、さらには面や線としてつながるような形のファンディングシステム、研究開発が予想外の進展を見せたり、順調に推移しない場合に柔軟に予算を見直す等のフレキシブルなファンディングシステムの構築も求められる(図4-1参照)。

なお、本イニシアティブは、「分子技術」という横断的で大きな体系の構築を目指した提案であるが、具体的なプロジェクトにブレークダウンする場合は、第3章の研究開発課題に記載されている6つの技術概念をベースに、具体的なテーマを切り出して研究開発領域を設定する必要がある。

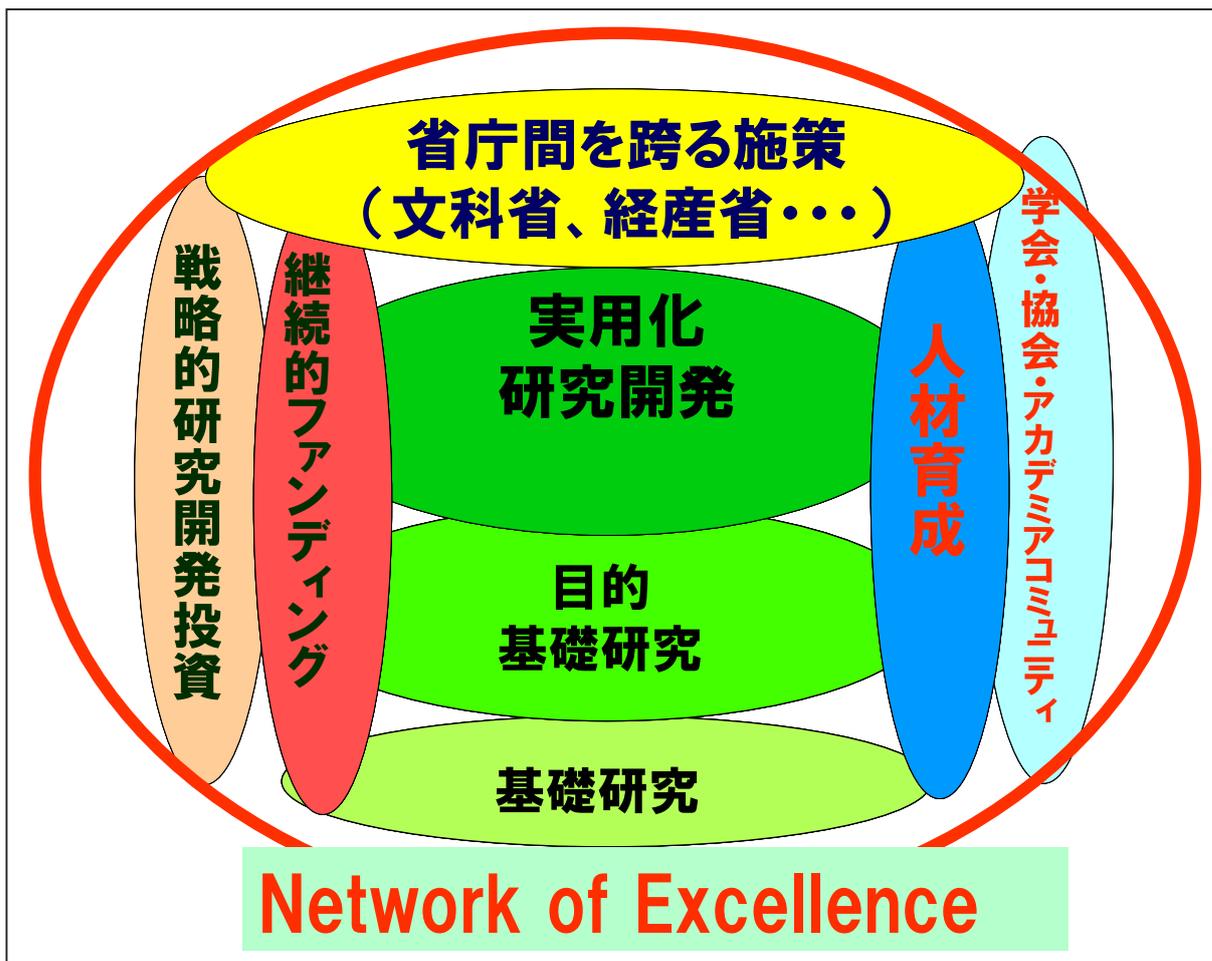


図 4-1 「分子技術」の研究開発推進方法

5 科学技術上の効果

(1) 分子科学の知見を基に、分子を設計・合成・操作・制御・集積することによって、「分子技術」という新しい技術分野を確立することができる。この技術により、様々な応用分野で必要とされる機能を有した「分子」を自由自在に創出し制御することが可能になる。このような視点による戦略的かつ総合的な研究投資はまだ国内、海外ともに実施されておらず、わが国が先駆けて推進することにより、世界をリードできる可能性がある。

(2) 「分子技術」を展開・体系化する過程においては、物理学、化学、生物学、数学の学術分野のみならず、ナノテクノロジー、情報技術、バイオテクノロジー等の工学分野の寄与が不可欠であり、これらの学問領域での融合が促進される。それぞれの学問分野の界面に、真の創造的な持続性科学・技術の芽があることが多く、この点から知の統合と異分野融合が強く望まれる。更に、こうした学問領域での融合の促進に加え、各種の技術を複合的に活用することが必要となるため、材料設計技術やプロセス技術といった技術レベルでの融合も促進される。

本イニシアティブが、産学官融合を促進する研究体制の下で実現されれば、環境・エネルギー等の諸問題の解決に貢献するだけでなく、新物質を設計・創成するという、学際的な新しい学問領域の誕生にもつながると期待される。

6 社会・経済的効果

本提案は、わが国が環境・エネルギー問題、医療・健康等に関する諸問題の解決に率先して貢献するための、新たな材料技術戦略である。米国はバイオテクノロジーが強く、それに基づくバイオ産業では他国の追随を許さない状況にある。また、情報技術でも米国は世界を牽引しているが、近年中国・インドの猛追・急成長があり、米国と共にこれらの国々はグローバルな産業構造の形成をリードしている。わが国はナノテクノロジー・材料技術に基づく部素材産業が強く、なかでも本提案に掲げる「分子技術」の各個別要素技術では強さを保持している。分子が持つ特徴の最たるものは多様性であり、その多様性を活かす多様な技術によって、多様な製品が育つ。例えば、ディスプレイ製品の中には数十種もの分子性物質が用いられ、そのいずれにおいても日本の国際的なシェアは現時点において圧倒的である。

将来にわたっても現在の経済的水準を維持するためには、産業の国際的優位性を今後も確実なものとするのが不可欠であり、そのために部品や材料およびその強みを活かした製品・システムで世界に貢献し続けなければならないことはいうまでもない。同時にそれが、上述の全地球規模的な課題や、安全・安心な社会を実現するための諸課題を前に、新たな材料・素材を生み出し、国際展開することによって応えていくことこそが直接的な解決につながっている。

「分子技術」によって創出される分子材料は、21世紀的課題である低環境負荷、省エネ・省資源、低コスト、人間・社会との親和性・柔軟性等に応え得る多様な能力を備えている。これらを実現する「分子技術」を、国の基盤たる一大技術集積とし、確固たるものとするのが、本イニシアティブの最大の目標である。「分子技術」を鍵とする高付加価値産業は、わが国の経済を支えるとともに、世界における環境・エネルギー問題、安全・安心、医療・健康問題等に応え、持続性社会の実現に幅広く寄与することが期待される。

7 時間軸に関する考察

「分子技術」は、わが国がこれまで長年に渡って積み上げてきた基礎科学・学術分野の支えのもとで初めて成り立つものであり、これまでにはない新たな技術体系を構築しなければならない。そのためには中長期的視野に立って、技術の集積を着実且つ戦略的に進めていく必要がある。大きな意味でいえば、「分子技術」の技術としての概念を確立するまでには10～20年の期間を要すると考えられる。これは、これまでの分子科学や分子を扱う基礎研究者らが持つ「分子の科学的側面に注目する」という問題意識から、そこで得られた知見をもとに、目的とする機能を実現するべく「技術として捉え確立する」というような、着目する概念の変更を求めるものである。諸外国ではまだ積極的に意識されていないこの目標を、世界に先駆けて抽出することで国際的にリードすることが期待でき、本イニシアティブは早急に着手することが必要である。

本イニシアティブでは、「分子技術」を6つの横断的技術概念に分類しているが、そこで取り込まれるべき研究開発課題は第3章に示されるように多岐に渡り、一概に研究開発に要する時間を特定することは適切ではない。しかしながら、いずれの技術概念においても、文部科学省での競争的資金等で概ね5～10年程度の集中的な研究投資が必要であり、また、そこで確立された技術集積をもって産業界の要請に直接的に応える研究投資が、経済産業省によって継続的に実施されることが望ましい。

また、研究課題によって要する時間は異なり、例えば、「変換・プロセスの分子技術」に含まれる各研究課題は、化学産業におけるプロセスの将来的な変革を求めるものであり、産業界が現在から見据える20～30年程度先の国際的状況を、大学・独法研究者と企業研究者らが議論し、共有しながら推進しなければならない。「分子の電子状態制御技術」についていえば、エレクトロニクス産業が抱えている微細化限界やエネルギー多消費等の本質的課題に対しての解決策を提示する「分子技術」として、産業構造の変遷・推移を常にフィードバックしながら、新しい製品・システムに求められる機能を実現していく必要がある。

本イニシアティブは、初期段階では異分野の研究者が参入するための環境・ネットワーク構築が必要であり、そのためには関連諸学会を通じた学会間の連携（シンポジウムや研究会の共同開催等）や、共同研究体制の構築等が求められる。また、学生やポストク等の若手研究者こそが、これからの「分子技術」を築く真の中心的存在であって、彼らが意欲を持って取り組めるだけの雰囲気醸成等、普及活動も当初の数年間では重要になる。強固な研究者間のネットワークが構築されれば、わが国発の技術領域として、国際的な認知を獲得し、後の中長期にわたる自発的な発展・展開に繋がることを期待される。

8 検討の経緯

過去数年間の日本化学会、日本物理学会、応用物理学会、日本薬学会、日本分子生物学会での学会発表から抽出した分子に関する研究開発テーマ（表8-1）を基に、分子の特性から機能創出に至るプロセスを分析した結果、図8-1に示すような「分子技術」の俯瞰図が作成され、6つの技術概念が浮かび上がってきた。

表8-1 分子に関する研究開発テーマ

各種反応触媒	有機エレクトロニクス	分子プローブ
熱電変換	フォトクロミズム	分子認識
人工光合成	分子エレクトロニクス	DNA折り紙
グリーンプロセス	エレクトロクロミズム	分子触媒
バイオリファイナリー	分子レジスト	多層構造制御
インターカレーション	ケミカルコミュニケーション	分子設計
モレキュラーインプリンティング	分子磁石	精密合成
MOF	DDS	高純度精製
浄化膜	リポソーム	精密計測・分析
逆浸透膜	DNAアプタマー	自己組織化理論
モニタリング	分子イメージング	
センシング	イオン液体	

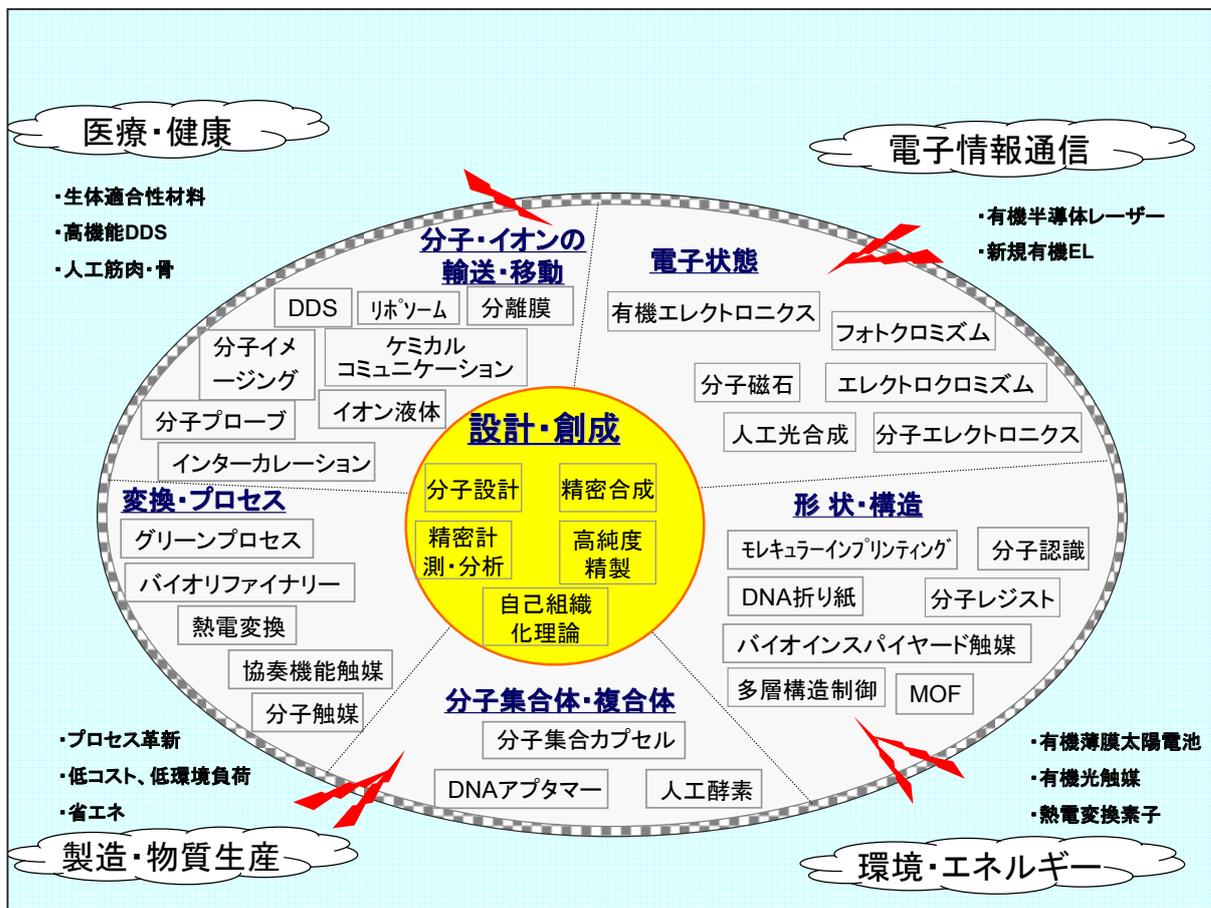


図8-1 「分子技術」の俯瞰図

これを踏まえ JST 研究開発戦略センター（CRDS）では、本イニシアティブの策定に先立ち、平成 21 年 12 月 17 日に、『科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」』を開催した（コーディネーター 中村栄一 東京大学教授）。ワークショップでは、「分子技術」が今後わが国にとって重要な基幹的技術に成り得るかどうかを、専門家間の集中議論によって検証すると共に、今後の方向性や具体的な研究開発課題を抽出する目的で開催された。

分子科学は、実用に供されつつある有機 EL、分子標的薬、近年研究開発が盛んな有機太陽電池、有機エレクトロニクス等で既に大きなポテンシャルを示している。今後はさらに、医療、情報通信、環境・エネルギー等幅広い応用分野からの要請が高まる中において、それらに的確に応えていける「分子技術」の体系を構築し、要素となる技術や有効な分子材料の設計指針を取り揃えておくことが、関連産業の国際的優位性を構築し、持続可能な社会と両立していく上で重要と考えられる。またそのためには、化学、物理学、数学、生物学、情報学、工学等、学術分野・技術分野間の連携・融合が必須であり、その象徴とも言えるナノテクノロジーの進化が重要と考えられる。これがワークショップの参加者間で共有された認識である。ワークショップでは、「分子技術」を「設計・創成」、「電子状態制御」、「集合体・複合体」、「形状・構造制御」、「変換・プロセス」及び「物質輸送」の 6 つに分類し、それぞれについて議論がなされ、以下の仮説を検証することが試みられた。

- 〈仮説 1〉 所望の機能を持つ材料やデバイス・プロセス等が、「分子技術」をベースにすることで数多く実現できるようになる。
- 〈仮説 2〉 「分子技術」を取り上げて、国家的に大きく推進するだけの科学的・技術的諸条件は整ってきたと言える。
- 〈仮説 3〉 20 世紀は半導体技術等の産業を牽引した基幹技術があったが、「分子技術」は 21 世紀を代表する基幹技術に成り得る。

ワークショップでは各々の「分子技術」ごとに二人ないし三人の有識者が発表し、議論を深めた。また、個々の事象や物質ではなく、分析法・設計法・製造法等のような「技術プラットフォームの形成」を目標とすべきであることが提案された。「分子技術」を推進する上では、基礎研究に重点をおいた研究投資を行うべきであり、分子科学に造詣の深い研究者を育成し社会との接点を誘導することが重要であることも確認された。更に、過去の事例を分析した上で未来予測を行い、一過的ではない継続的な研究推進が求められることも合意された。「分子技術」は、このように広い範囲の科学が関係するため、関係諸学会の連携が必須となる。日本化学会や応用物理学会、日本物理学会、日本薬学会、日本分子生物学会等が連携し、横断的な取組みによって異分野の研究者が参加することが望まれる。CRDS ではワークショップにおける議論を踏まえ、今後重点的に推進すべき研究領域、課題等について検討し、本戦略イニシアティブ「分子技術」をまとめた。

ワークショップ参加者一覧（敬称略、所属・役職は開催時点）

◎：コーディネーター ○：副コーディネーター *：コメンテーター σ：コーディネーター補佐

- ◎ 中村 栄一 東京大学大学院理学系研究科 教授
- 魚崎 浩平 北海道大学大学院理学研究院 教授
- 笠原 二郎 北海道大学触媒化学研究センター 特任教授
- 相田 卓三 東京大学大学院工学系研究科 教授
- 安達 千波矢 九州大学未来化学創造センター 教授
- 岩澤 康裕 電気通信大学電気通信学部 教授
- * 北川 進 京都大学大学院工学研究科 教授
- 菅 裕明 東京大学先端科学技術研究センター 教授
- * 瀬戸山 亨 (株)三菱化学科学技術研究センター R&D 部門合成技術研究所 所長
- 中條 善樹 京都大学大学院工学研究科 教授
- 塚越 一仁 (独)物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主任研究者
- * 筒井 哲夫 (独)科学技術振興機構 さきがけ「物質と光作用」領域 研究総括
- * 長洲 毅志 エーザイ(株) 理事・CSO 付担当部長
- 永瀬 茂 自然科学研究機構分子科学研究所 教授
- 長野 哲雄 東京大学大学院薬学系研究科 教授
- * 錦谷 禎範 新日本石油(株) 研究開発本部中央技術研究所 副所長
- 橋田 充 京都大学大学院薬学研究科 教授
- 平本 昌宏 自然科学研究機構分子科学研究所 教授
- 福岡 淳 北海道大学触媒化学研究センター 教授
- 福山 秀敏 東京理科大学理学部 教授
- 辺見 昌弘 東レ(株)地球環境研究所 所長
- 村井 眞二 奈良先端科学技術大学院大学 理事・副学長
- σ 唯 美津木 自然科学研究機構分子科学研究所 准教授
- σ 田中 一生 京都大学大学院工学研究科 助教
- σ 辻 勇人 東京大学大学院理学系研究科 准教授
- σ 森田 靖 大阪大学大学院理学研究科 准教授
- 曾根 純一 (独)科学技術振興機構 研究開発戦略センター シニアフェロー

ワークショップの詳細内容・結果は、下記の報告書にまとめられている。

科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」報告書
 2009年3月発行 科学技術振興機構研究開発戦略センター
 CRDS-FY2009-WR-07 下記 URL よりダウンロード可
<http://crds.jst.go.jp/output/rp.html>

また、本ワークショップの他、以下の研究者による事前検討会及びインタビューを実施した。

〈事前検討会〉

相田 卓三	東京大学大学院工学系研究科	教授
長田 義仁	(独) 理化学研究所基幹研究所	副所長
玉尾 皓平	(独) 理化学研究所基幹研究所	所長
中村 栄一	東京大学大学院理学系研究科	教授
魚崎 浩平	北海道大学大学院理学研究院	教授 (CRDS 特任フェロー)
村井 眞二	奈良先端科学技術大学院大学	理事・副学長 (CRDS 特任フェロー)

〈インタビュー〉

明石 満	大阪大学大学院工学研究科	教授
藤本 健造	北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科	教授
福山 透	東京大学大学院薬学系研究科	教授
谷口 彬雄	信州大学	名誉教授
長谷川 美貴	青山学院大学理工学部	准教授
山元 公寿	慶応義塾大学理工学部	教授

(敬称略)

専門用語説明（本文中でアンダーラインした用語の説明）

[p.1]

有機太陽電池：半導体特性を示す有機物を使った太陽電池。薄膜構造を持つため、有機薄膜太陽電池と呼ばれることも多い。

[p.1]

フラーレン：炭素で構成されているサッカーボール状の分子。炭素数が60の分子が一般的で、 C_{60} と呼ばれているが、 C_{70} や C_{76} 等も見出されている。

[p.1]

n型半導体：電荷を運ぶキャリアとして電子が用いられる半導体のこと。これに対し、電荷を運ぶ担体として正孔（ホール）を用いる半導体をp型半導体と呼ぶ。n型とp型の半導体を組み合わせるとpn接合ができ、ここに光を照射すると電位差が生じるものが太陽電池である。

[p.1]

分子標的薬：体内の特定の分子を狙い撃ちして、その機能を抑えることにより病気を治療するために使用される薬剤のこと。主に抗ガン剤で知られる。

[p.1]

in situ：「その場で」という意味のラテン語。ある現象が起きている場合に、正にその起きている瞬間のことを指す。

[p.5]

QSAR：Quantitative Structure-Activity（またはAffinity）Relationshipの略。日本語では、定量的構造活性相関と呼ばれる。化合物の構造と生物活性との間に成り立つ定量的な関係のこと。

[p.5]

動態シミュレーション：コンピュータを用いて、生体高分子の構造、機能、陽子の運動軌跡、および生体分子間の相互作用に対して行う予測のこと。

[p.6]

ウェアラブル情報端末：体に装着できる情報端末のこと。コンピュータやセンサ、電源等の部品から成る。柔軟性のあるプラスチック基板等が用いられる。

[p.6]

人工光合成：光触媒を使って、光合成を模倣した反応を起こさせて、水から水素を生成するプロセス。更に進めて、二酸化炭素固定まで人工的に実現しようとする試みもある。

[p.6]

脱化石資源：石炭や石油等の化石資源に頼らないエネルギー政策・研究のこと。

[p.6]

高度環境モニタリング：多様化する環境中のモニタリング対象に対応する高度センサを開発し、常時監視を可能にするモニタリングシステムの構築を開発すること。

[p.6]

再生医療材料：皮膚や骨、軟骨等を再生する際に必要となる生体適合材料のこと。体内に埋め込んだ場合に自然に吸収されてしまう材料が望ましい。

[p.7]

酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング：酵素分子をモデルにした鑄型重合法の一種。認識対象分子（鑄型分子）を含む溶液で重合反応を行い、重合終了後に鑄型分子を除去することで、鑄型分子を選択的に認識する触媒が作製できる。

[p.7]

in situ キャラクターゼーション：触媒等の作製過程で、その場で (*in situ*) 構造・特性解析を行うこと。

[p.7]

マイクロ反応装置：微小流路を利用した反応装置のこと。反応効率や反応時間の大幅な向上が見込まれる。少量多品種生産向けの製造プロセスとしても注目されている。

[p.7]

システムケミストリー：化学の現象をシステムとして捉える学問。

[p.7]

原料転換プロセス：従来の石油化学を脱却し、異なる原料から種々の製品を生産するためのプロセス開発。バイオマスやリサイクル原料、CO₂ 利用等が考えられる。

[p.7]

室温稼働化学プロセス：省エネルギーな製造プロセスの一つ。加温の必要ない化学反応を利用する。

[p.7]

キャリアトラップ：有機半導体等でキャリア（電子及び正孔）が捕捉されてしまう現象。

[p.8]

液体半導体：液体でありながら、半導体特性を示す物質。例えば、アンチモンと硫化アンチモンの組み合わせ等が検討されている。

[p.8]

分子性物質・分子材料：電荷を持たない状態の分子からなる物質・材料。

[p.8]

人工酵素：人工的に合成した酵素。天然の酵素と同じような特性を持つように設計・合成された触媒。

[p.8]

有機蓄電材料：有機ラジカル高分子のように、有機物でありながら蓄電特性を示す材料。

[p.8]

超高性能分離膜：孔径を厳密に制御することにより、高効率で低消費エネルギーな分離を可能にする膜のこと。造水や空気浄化等に用いられる。

参考文献

[JST-CRDS WS] 「物質・材料分野」俯瞰ワークショップ報告書
(CRDS-FY2008-WR-05) 2008年12月

[JST-CRDS WS] 科学技術未来戦略ワークショップ「空間空隙制御・利用技術」報告書
(CRDS-FY2009-WR-05) 2010年2月

[JST-CRDS WS] 「ナノテクノロジー分野」俯瞰ワークショップ報告書
(CRDS-FY2009-WR-06) 2010年3月

[JST-CRDS 戦略プロポーザル] 戦略プログラム「空間空隙制御材料の設計利用技術—
異分野融合による持続可能社会への貢献—」
(CRDS-FY2009-SP-05) 2010年3月

[JST-CRDS WS] 科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」報告書 (CRDS-
FY2009-WR-07) 2010年3月

■戦略イニシアティブ作成メンバー■

曾根 純一	シニアフェロー	(ユニットリーダー)	(ナノテクノロジーユニット)
石森 義雄	フェロー		(ナノテクノロジーユニット)
永野 智己	フェロー		(ナノテクノロジーユニット)
河村 誠一郎	フェロー		(ナノテクノロジーユニット)
中山 智弘	フェロー		(物質・材料ユニット)

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2009-SP-06

戦略イニシアティブ

分子技術

“分子レベルからの新機能創出”

～異分野融合による持続可能社会への貢献～

STRATEGIC INITIATIVE

Molecular Technology

“The creation of novel functions from molecular levels”

-To assure sustainable society by fusing multi-disciplinary fields-

平成 22 年 3 月 March 2010

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター ナノテクノロジーユニット
Nanotechnology Unit, Center for Research and Development Strategy
Japan Science and Technology Agency

〒 102-0084 東京都千代田区二番町 3 番地

電 話 03-5214-7481

ファックス 03-5214-7385

<http://crds.jst.go.jp/>

© 2010 JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.