

## 第 5 章 戦略目標

### 5.1 新たな光機能や光物性の発現・利活用による次世代フォトニクスの開拓

#### 1. 目標名

新たな光機能や光物性の発現・利活用による次世代フォトニクスの開拓

#### 2. 概要

光の利用技術はこれまで、物質の観察手段としてだけでなく、材料加工や情報通信、医療等の幅広い分野における横断的技術として活用されてきた。近年では、レーザー技術をはじめとする精密制御・高感度計測技術の飛躍的な進展に伴い、新物質の創製・新機能発現から量子状態の制御に至るまで、知のフロンティア開拓を先導する先端科学技術として現代に欠かせない社会インフラの一翼を担っている。他方で、物質と光の相互作用における多彩な非線形光学現象や素励起物性など光の作用の本質については未解明の点も多く、さらなる分野深化や応用展開に向けては新たな系統的・体系的知見の獲得が不可欠となっている。

そのため、本戦略目標では、新たな光機能や光物性の解明・利活用・制御等を通じて従来の光科学技術を横断的かつ重層的に集積・発展させることにより、将来の社会・産業ニーズに応える新たなフォトニクス分野の進展を加速させるとともに、新技術シーズの創出を支える基礎的な原理の解明にも併せて取り組むことで、新たな光機能物質の人工生成や革新的な光通信技術の開発・活用、微細構造の高時空間分解可視化、先端数理論科学との融合による複合光基盤技術・システムの創出等を目指す。

これにより、環境・エネルギー・ものづくり・情報通信・医療等の広範な分野を更に横断的かつ有機的に支えていくことで、精度・感度・容量・消費電力等の様々な点で社会的要請に応える高次な社会・産業インフラの形成につなげる。

#### 3. 達成目標

本戦略目標では、結晶構造や素励起の動的挙動等に関する物性解明からナノデバイスの開発、生体組織深部の非侵襲観察から電子の超高速動態の捕捉に至るまで、多様な目的に応じた最適な光源や光検出システムの開発を通じて広範な社会・産業ニーズに機動的に応える次世代のフォトニクス分野を開拓することを目的とする。具体的には、以下の達成を目指す。

- ①様々な光応答物性の精密制御による新たな光機能物質やナノ構造体の創製及び高機能光デバイスの開発
- ②非線形・有機フォトニクスの応用による生体やソフトマテリアル内部の非侵襲in vivo観察・イメージング手法の高度化
- ③物質中の多彩な素励起と光の相互作用に関する基盤的研究の推進
- ④超高密度・高電磁場科学やアト秒レーザー技術、超高精度の光周波数コム技術など極限フォトニクスの開拓

#### 4. 研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

3. 「達成目標」に記載した事項の達成を通じ、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- 未開拓の光機能物質や先端光源等を用いたフォトニクス技術が環境・エネルギー問題など重要な社会的課題の解決・緩和に貢献し、ものづくり産業の革新や新たな基幹産業の構築が可能となった結果、我が国の知的基盤及びグローバル産業競争力が強化された社会。
- 新たな光通信技術やセンシング技術など光の利用・制御に関するフォトニクス技術の進展により、情報社会・空間の捉え方が変わり、情報通信基盤の高度化・高セキュリティ化が進むとともに、実世界とITを緊密につなげるCPS(サイバー・フィジカル・システムズ)やモノのインターネット(IoT)が実現している社会。
- 人や環境に配慮した光源や光検出器等の開発及びその制御技術の確立により、生命科学や医療システム等の高度化が促され、短時間・低コスト・低負担なストレスフリー診断など先端医療・診断を可能とする先端機器開発等が進展している社会。

## 第 5 章 戦略目標

### 5. 具体的な研究例

#### ①様々な光応答物性の精密制御による新たな光機能物質やナノ構造体の創製及び高機能光デバイスの開発

誘電率・透磁率が人工制御されたメタマテリアル等を先行例として、従来の光科学技術では扱われなかった新たな原理に基づく光機能物質の開発やその幅広い利活用に向けた研究開発を行う。具体的には、光の波長よりも小さな構造物を用いた光波の制御や光の回折限界を超えた分解能の実現、ナノスケール領域における微細光加工・計測技術の開発、新物質創製に向けた研究等を行う。今後の課題とされる基礎的な原理の解明や将来的な大量製造技術の確立に向けては、シミュレーションを含む理論的アプローチから新機能の発現過程や新物質の生成過程、従来知られていない物性の解明に向けた研究を行うとともに、特定の屈折率や透明度、誘電率等を持つ物質・材料を自在に設計・作製する手法やそのための装置開発等を行う。

#### ②非線形・有機フォトニクス応用による生体やソフトマテリアル内部の非侵襲in vivo観察・イメージング手法の高度化

幅広い先端生命科学等への応用展開に向け、分子～個体レベルの生体機能を組織深部に至るまで非侵襲的かつリアルタイムで観察可能な光イメージング技術の開発や、そのために必要な小型かつ安定な実用的なコヒーレント光源の開発、生体関連物質(検出対象)と非生体物質(プローブ)との光照射下での相互作用機構の解明に向けた研究等を進める。これにより、生体分子やソフトマテリアル内部の直接観察・分析が可能な高品質・高分解能顕微鏡の開発等につなげる。

#### ③物質中の多彩な素励起と光の相互作用に関する基盤的研究の推進

幅広い基礎研究や産業応用に必要な固体基礎物性の解明・理解深化や、次世代の高機能光デバイスの実現に向け、固体内部や表面における準粒子(集団励起)のダイナミクスや固体からの電子放出等の超高速動的過程を観測・制御可能な手法を開発し、極短パルス幅コヒーレント光の制御技術など様々な光応答や光化学反応に関する制御技術を確立する。具体的には、時間・空間の両次元で高分解能な電子状態の観察手法や、プラズモン・フォノン等の振動・伝搬制御技術の高度化研究等を行う。例えばプラズモニクスに関しては、光の回折限界を下回るサブ波長サイズの光機能素子や表面プラズモン回路・干渉計等のナノ光学素子の開発を目指す。

#### ④超高密度・高電磁場科学やアト秒レーザー技術、超高精度の光周波数コム技術など極限フォトニクスの開拓

超高強度レーザーと物質の相互作用により発生する相対論的高密度プラズマを利用した研究や、アト秒パルス波の発生・制御技術、高強度任意電場の整形技術、究極の時空間計測に向けた光周波数コム技術、レーザー加速技術など、極限環境・条件下における先端光科学技術を開拓する。これにより、先端レーザー科学等に関する知見の集積や基礎的な原理の解明につなげ、原子物理や材料物性の理解深化に寄与するとともに、超高精度・超高安定な光格子時計の高度化・実用化に向けた研究開発や、化学反応等における電子の超高速運動の捕捉、物質中電子のアト秒精度での自在操作等を可能にする技術の開発等につなげる。

以上の各達成目標について、光の状態(位相、パルス、強度、波長等)の高度制御技術を共通項としつつ、計算科学や複雑系の数理科学等の知見に基づく予測的手法など多角的なアプローチからフォトニクス技術の先鋭化及び広範な利活用を図るとともに、これらの技術に基づくシステムの構築・最適化に向けた開発・実証につなげていく。

### 6. 国内外の研究動向

#### (国内動向)

我が国では、センター・オブ・イノベーション(COI)プログラム等の他、「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」等の光科学技術が関連する利用研究が展開されている。具体的には、従来の動作原理を越える画期的な半導体レーザーを実現するフォトニック結晶に関する要素技術やレーザー加速システムの確立、その応用による超小型X線自由電子レーザーの開発など新しい研究開発が進められている。

#### (国外動向)

欧州では、第7次研究枠組み計画(FP7)に引き続き、新しいイノベーション指向の研究開発スキームである「Horizon 2020」が立ち上げられ、情報通信ネットワークの革新や産業競争力の強化を目的とした光科学技術の強化が進められている。また、独国では、フラウンホーファー研究機構を通じて生産技術に関わる光科学技術の研究開発が国策として進められている。さらに、米国では、2014年4月

## 第 5 章 戦略目標

にNSFの光・フォトンクスにおける優先課題委員会より報告書(「Building a Brighter Future with Optics and Photonics」)がまとめられ、今後米国として、イメージングや微弱フォトンクス技術に注力していくことが謳われている。

### 7. 検討の経緯

「戦略的な基礎研究の在り方に関する検討会 報告書」(平成 26 年 6 月 27 日)に基づき、以下の通り検討を行った。

(サイエンスマップ及び科学研究費助成事業データベースを用いた国内外の研究動向に関する分析資料の作成)

「サイエンスマップ 2012&2010」(平成 26 年 7 月 31 日科学技術・学術政策研究所)及び科学研究費助成事業データベースにおける情報を用いて、国内外の研究動向に関する分析資料を作成した。

(分析資料を用いた専門家へのアンケートの実施及び注目すべき研究動向の作成)

「科学技術振興機構研究開発戦略センター」や「科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センターの専門家ネットワークに参画している専門家」に対し、作成した分析資料を用いて今後注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。その後、アンケートの結果の分析等を行い、注目すべき研究動向として「光の超精密制御による新たなフォトンクス分野の開拓」を特定した。

(ワークショップの開催及び戦略目標の作成)

注目すべき研究動向「光の超精密制御による新たなフォトンクス分野の開拓」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、特に注目すべき国内外の動向、研究や技術開発の進展が社会的・経済的に与え得るインパクトやその結果実現し得る将来の社会像、研究期間中に達成すべき目標などについて議論を行い、ワークショップにおける議論等を踏まえ、戦略目標を作成した。

### 8. 閣議決定文書等における関係記載

科学技術イノベーション総合戦略 2014(平成 26 年 6 月 24 日閣議決定)

#### 第 2 章第 1 節 I. 3. (4)①

モーターや情報機器等の消費電力を大幅に低減する超低消費電力パワーデバイス(SiC、GaN等)、超低消費電力半導体デバイス(三次元半導体、不揮発性素子等)、光デバイス等の研究開発及びシステム化を推進し、電力の有効利用技術の高度化を図るとともに、当該技術の運輸・産業・民生部門機器への適用を拡大することで、エネルギー消費量の大幅削減に寄与する。(中略)これにより、エネルギーの効率的な利用と国際展開をねらう先端技術を有する社会を実現する。

#### 第 2 章第 2 節 1. 基本的認識

分野横断技術を下支えする数理科学やシステム科学、光・量子科学の活用を十分に図る必要がある。

### 9. その他

- 平成 20 年度戦略目標「最先端レーザー等の新しい光を用いた物質材料科学、生命科学など先端科学のイノベーションへの展開」では、これまで各分野で個別に行われてきた光利用開発を融合し、「物質と光の関わり」に関する光科学技術の基礎研究や、波及効果の大きな技術シーズの創出を目指してきた。ここで創出された優れた研究シーズを、本戦略目標の下で行われる研究により集中的に伸ばしていくことで、最先端光科学技術の実用化を加速していくことが重要である。
- 「光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発」事業では、光・量子科学技術分野のシーズと各重点分野や産業界のニーズとを融合した、最先端の光源、ビーム源、ビーム制御法、計測法等の研究開発等を目的としている。ここで開発された新規光源や要素技術が本戦略目標の下で行われる研究開発の基礎となる。
- 「先端計測分析技術・機器開発プログラム」では、革新的な先端計測分析技術の要素技術や機器及びその周辺システム等の開発が進められており、検出器や新規光源の開発が行われている。本戦略目標の下で行われる研究と連携することで、先端装置の実用化、特に光センシングにおいて迅速な成果創出が期待できる。

### 5.2 微小エネルギーの高効率変換・高度利用に資する革新的なエネルギー変換機能の原理解明、新物質・新デバイスの創製等の基盤技術の創出

#### 1. 目標名

微小エネルギーの高効率変換・高度利用に資する革新的なエネルギー変換機能の原理解明、新物質・新デバイスの創製等の基盤技術の創出

#### 2. 概要

自然界の中で未利用のエネルギーは数多くあり、これらを電気エネルギーに変換して利用する技術が盛んに研究されている。その中でも、微小なエネルギーから $\mu\text{W}$ ～ $\text{mW}$ 程度の出力ができる電気エネルギーへの変換技術の開発が欧米諸国で注目を集め、環境に存在するエネルギーを常に利用可能とすることで、社会の中で数億～数兆と利用されることが想定されるセンサーや、更には系統電源からの電源供給が不可能な環境下で用いることが想定されるモビリティ用デバイスや生体用デバイス等の自立的な電源として活用することを目的とした投資が強化されている。

一方、自然界の中で未利用の微小エネルギーを電気エネルギーに高効率に変換するための新原理と、それに基づく新たな物質の創製が必要とされている中で、我が国は、新しい原理(一例として、スピンゼーバック効果など)や、新物質創製(一例として、高 ZT 物質、マルチフェロイック物質など)に関する革新的な研究シーズを有している。

そのため、本戦略目標では、我が国の強みを活かし、微小エネルギーの高効率変換・高度利用に資する革新的なエネルギー変換機能の原理解明及び新物質・新デバイスの創製等の基盤技術の創出に取り組むことで、大量のエネルギーを必要としないセンサー等の様々な環境への普及を加速し、世界に先駆けた Internet of Things (IoT)、ビッグデータの活用による次世代型の環境保全・ものづくりの実現を目指す。

#### 3. 達成目標

本戦略目標では、基本的な原理の解明や新物質・新構造デバイスの創製だけでなく、基盤的解析・設計技術や理論的アプローチを含めて戦略的に研究を推進することで、現在ある原理や変換材料を凌駕する、微小なエネルギーから電気エネルギーへの変換技術を創出することを目的とする。具体的には、以下の達成を目指す。

- ①微小エネルギーの高効率変換・高度利用技術に資する新原理の解明及び革新的な物質・デバイスの創製
- ②微小エネルギーの高効率変換・高度利用技術創出のための理論及び基盤的解析・設計技術の開発

#### 4. 研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

3. 「達成目標」に記載した事項の達成を通じ、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

○微小エネルギーからの電気エネルギー創出が可能となることにより、系統電源への接続による電源供給には適さないものの大量のエネルギーを必要としないセンサー、モビリティ向けデバイス、生体デバイス等の普及が加速し、IoT、ビッグデータの活用による次世代型の環境保全・ものづくりが実現している社会。

#### 5. 具体的な研究例

##### ①微小エネルギーの高効率変換・高度利用技術に資する新原理の解明及び革新的な物質・デバイスの創製

熱、光、電波、振動、生体やフォノン、スピン等のエネルギーを電気エネルギーに高効率に変換または高度に利用するための基盤技術の構築とその源となる基本的な原理の解明を行い、従来の特性や機能を飛躍的に凌駕する、優れた物性を有する新物質・デバイスを創生する。具体的には、スピンとトポロジーの相関等革新的なエネルギー変換に資する原理の解明及びそれらを活用した新物質の創製や、無機化合物や有機化合物または無機・有機ハイブリッド化合物による機能性物質の創製、環境負荷の軽減を考慮した革新的なエネルギー変換に資する新物質の創製等を行う。

##### ②微小エネルギーの高効率変換・高度利用技術創出のための理論及び基盤的解析・設計技術の開発

新原理の解明や革新的な材料創製のために必要な、エネルギー変換時における物理現象(材料物性、界面、輸送現象等)の解析基準や新しい解析技術を創出する。具体的には、新原理・新物質創製に貢

## 第 5 章 戦略目標

献する理論計算・計算機シミュレーション手法の確立や、新原理や新物質に基づいた革新的なデバイスの原理や設計指針の創成を行う。また、2つのエネルギー形態(例えばフォノンとスピン流の輸送)を独立に制御するなど相互作用の制御や、電子とフォノン、マグノンとフォノンの分離による解析等を行う。

### 6. 国内外の研究動向

#### (国内動向)

我が国では微小エネルギーの活用に注目した大型プロジェクトは実施されておらず、研究投資は大幅に出遅れている。一方で、我が国は、強誘電体等の物理分野や熱電変換をはじめとした変換材料等の基礎的研究開発に強みを持っていることから、異分野の融合、基礎分野と応用分野の融合により、革新的技術を創出するポテンシャルを有している。

#### (国外動向)

欧州では、多数の微小エネルギーの活用に関連する事業が進行中である。2014年、英国ではエマージング・テクノロジー7分野に対し、4年間で5,000万ポンド(約89億円)のファンディングを決定している。7分野にはエナジー・ハーベスティングが含まれており、ワイヤレスセンサーや自立電源等の商品化を目指している。また、米国では、2013年にFairchild Semiconductor、University of California、Berkley校等が、毎年1兆規模のセンサーを使う社会を目指すプロジェクト「Trillion Sensors Universe」を立ち上げ、産学連携の取組が加速している。

### 7. 検討の経緯

「戦略的な基礎研究の在り方に関する検討会 報告書」(平成26年6月27日)に基づき、以下の通り検討を行った。

(サイエンスマップ及び科学研究費助成事業データベースを用いた国内外の研究動向に関する分析資料の作成)

「サイエンスマップ 2012&2010」(平成26年7月31日科学技術・学術政策研究所)及び科学研究費助成事業データベースにおける情報を用いて、国内外の研究動向に関する分析資料を作成した。

(分析資料を用いた専門家へのアンケートの実施及び注目すべき研究動向の作成)

「科学技術振興機構研究開発戦略センター」や「科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センターの専門家ネットワークに参画している専門家」に対し、作成した分析資料を用いて今後注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。その後、アンケートの結果の分析等を行い、注目すべき研究動向として「小型・分散型電源構築に向けた高効率エネルギー変換・利用に係る基盤的技術の創出」を特定した。

(ワークショップの開催及び戦略目標の作成)

注目すべき研究動向「小型・分散型電源構築に向けた高効率エネルギー変換・利用に係る基盤的技術の創出」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、特に注目すべき国内外の動向、研究や技術開発の進展が社会的・経済的に与え得るインパクトやその結果実現し得る将来の社会像、研究期間中に達成すべき目標などについて議論を行い、ワークショップにおける議論等を踏まえ、戦略目標を作成した。

### 8. 閣議決定文書等における関係記載

第4期科学技術基本計画(平成23年8月19日閣議決定)

#### Ⅲ. 2. (2) i)

付加価値率や市場占有率が高く、今後の成長が見込まれ、我が国が国際競争力のある技術を数多く有している先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術、高機能電子デバイスや情報通信の利用、活用を支える基盤技術など、革新的な共通基盤技術に関する研究開発を推進するとともに、これらの技術の適切なオープン化戦略を促進する。

## 第 5 章 戦略目標

科学技術イノベーション総合戦略(平成 26 年 6 月 24 日閣議決定)

### 第 2 章第 1 節 I. 3. (7)①

さらなるエネルギー利用効率の向上のため、熱と電気を併産するコージェネレーションの活用や、これまで利用されていなかった低温排熱等のエネルギーを活用する技術の向上に取り組む。

#### 9. その他

○以下の関連する研究開発と本戦略目標下で行われる研究の連携を確保しながら、微小エネルギーの高効率変換・高度利用に資する基盤技術の創出及び成果の実用化を目指すことが重要である。

- ・平成 23 年度戦略目標「エネルギー利用の飛躍的な高効率化実現のための相界面の解明や高機能界面創成等の基盤技術の創出」、平成 24 年度戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」、平成 25 年度戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」の下で行われている一部の研究では、エネルギー変換・輸送に関わる基盤的科学技術の創出に取り組んでいる。また、平成 26 年度戦略目標「二次元機能性原子・分子薄膜による革新的部素材・デバイスの創製と応用展開」の下で行われている一部の研究では、トポロジカル絶縁体を用いたデバイス設計技術の創出に取り組んでいる。その他、平成 25 年度戦略目標「情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創成」の下で行われている研究では、新機能性材料・電子デバイス・システム最適化を連携・融合することに取り組んでいる。
- ・平成 23 年度戦略目標「エネルギー利用の飛躍的な高効率化実現のための相界面の解明や高機能界面創成等の基盤技術の創出」、平成 24 年度戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」、平成 25 年度戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」の下で行われている一部の研究では、エネルギー変換・輸送に関わる基盤的科学技術の創出に取り組んでいる。また、平成 26 年度戦略目標「二次元機能性原子・分子薄膜による革新的部素材・デバイスの創製と応用展開」の下で行われている一部の研究では、トポロジカル絶縁体を用いたデバイス設計技術の創出に取り組んでいる。その他、平成 25 年度戦略目標「情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術
- ・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創成」の下で行われている研究では、新機能性材料・電子デバイス・システム最適化を連携・融合することに取り組んでいる。

### 5.3 多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製

#### 1. 目標名

多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製

#### 2. 概要

世界では、石油に依存する化学産業が急激に変容しつつある。米国では、シェール革命を受け、安価な天然ガス原料のエタンを使用して製造するエチレンが強い競争力を持ち始めている。中国でも、石炭を用いたメタノールの合成等が行われている。一方で、天然ガスに豊富に存在するメタンや低級アルカンを効率良く活性化する画期的な触媒の創製は非常に難度が高く、実現できれば、国際的にもインパクトが非常に高い。特に、二酸化炭素排出(エネルギー投入)が少ない製造技術に期待が高まっており、極めて高い技術の醸成が急務である。

そのため、本戦略目標では、日本が誇る触媒研究の高い競争力を活かして、メタン( $\text{CH}_4$ )や、低級アルカン( $\text{C}_n\text{H}_x$ :  $n = 2, 3$ )等の多様な資源を、化成品原料やエネルギーとして活用するための革新的触媒を創製する。最先端の物質合成・計測・計算技術とデータ科学を利活用した物質探索を共通基盤として、原理解明と触媒創製を戦略的に推進し、多様な天然炭素資源を高効率に活用する社会を切り拓く。

## 第 5 章 戦略目標

近年進化している、計算・計測技術を駆使することで画期的な触媒を設計及び創製することができれば、新たな触媒研究の基盤を確立することができるだけでなく、ナノテクノロジー・材料研究における新たな方法論を切り拓くことも期待でき、我が国のさらなる競争力強化につながる。

### 3. 達成目標

本戦略目標では、天然ガスの大半を占めるメタン( $\text{CH}_4$ )や、低級アルカン( $\text{C}_n\text{H}_x$ :  $n = 2, 3$ )等の多様な天然炭素資源を、化成品原料やエネルギーとして活用するための革新的触媒を創製することを目的とする。具体的には、以下の達成を目指す。

- ①メタンを化成品原料やエネルギーへ変換するC1化学を実現する触媒の創製
- ②低級アルカンを化成品原料やエネルギーへ高効率に変換する触媒の創製
- ③物質創製、計測・解析、理論計算、実験・計算データを利活用した物質探索の連携による、触媒反応の指導原理解明へ向けた共通基盤の確立

### 4. 研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

3. 「達成目標」に記載した事項の達成を通じ、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- 天然ガスに豊富に含まれるメタンや低級アルカン等、石油以外の多様な炭素資源を化成品や燃料に変換して利活用することが可能となり、我が国の根幹を支える基幹産業が形成されている社会。
- 石油に依存しない多様な原料・エネルギー源活用型社会を構築することで資源リスクを減少するとともに、将来的にメタンハイドレードの利用が実現した場合、資源立国への道が拓けている社会。

### 5. 具体的な研究例

- ①メタンを化成品原料やエネルギーへ変換するC1化学を実現する触媒の創製  
メタンを反応基質とし、メタノール等の高付加価値化成品への直接合成反応を実現する高活性・高選択性反応触媒を開発する。
- ②低級アルカンを化成品原料やエネルギーへ高効率に変換する触媒の創製  
エタン/プロパン等を反応基質とし、エチレングリコールや酢酸、プロパノールやアクリル酸等の高付加価値化成品への反応を実現する革新的な高活性・高選択性反応触媒を開発する。
- ③物質創製、計測・解析、理論計算、実験・計算データを利活用した物質探索の連携による、触媒反応の指導原理解明へ向けた共通基盤の構築  
触媒反応の実作動条件・その場での動的表面計測を実現する。大規模理論計算による触媒反応のマルチスケール、マルチフィジックス解析を実現する。マテリアルズインフォマティクスの活用による実験・計算データを利活用した物質探索を実現する。

### 6. 国内外の研究動向

#### (国内動向)

我が国の触媒研究は国外に対して高い競争力を有しており、バイオマスからの可溶化・糖変換、化成品触媒、太陽光を使った水分解・水素生成、二酸化炭素を燃料・原料へ変換する人工光合成等については、研究開発が鋭意進められている。一方で、メタン・低級アルカンを化成品原料やエネルギーとして利活用する研究は未踏の領域である。最近になり、従来の触媒研究とは異なる発想で常温アンモニア合成を可能としたエレクトライド触媒の研究(細野ら、2012)など、メタン・低級アルカンからの原料・エネルギー変換に資する可能性がある研究が活発化している。これらの周辺研究領域の知見や、計測・計算・データ科学の急速な進展を取り込み、メタン・低級アルカンからの原料・エネルギー変換へ取り組む体制を早期に構築する必要がある。

#### (国外動向)

シェール革命を受けて、メタンや低級アルカンを利活用する技術開発は各国の産業競争力へ直接的な影響を及ぼすこととなったため、欧米を始めとする各国で研究開発が進められている。

例えば、露国では、亜酸化窒素を用いてメタン⇒メタノールの選択合成で160°Cにおいて最大96%を達成したとの報告がなされている。また、米国では、米エネルギー省における挑戦的な先端研究へのファンディングプログラム・ARPA-Eにおいて、2013年からメタン資化性微生物を使って、メタンを液体燃料に変換する小規模プロセスを開発するプロジェクトの支援が行われている。加えて、ベンチャー企業が、微生物を利用したメタンからの化成品製造へ取り組んでいる。

## 第 5 章 戦略目標

### 7. 検討の経緯

「戦略的な基礎研究の在り方に関する検討会 報告書」（平成 26 年 6 月 27 日）に基づき、以下の通り検討を行った。

（サイエンスマップ及び科研費 DB を用いた国内外の研究動向に関する分析資料の作成）

「サイエンスマップ 2012&2010」（平成 26 年 7 月 31 日科学技術・学術政策研究所）及び科学研究費助成事業データベースにおける情報を用いて、国内外の研究動向に関する分析資料を作成した。

（分析資料を用いた専門家へのアンケートの実施及び注目すべき研究動向の作成）

「科学技術振興機構研究開発戦略センター」や「科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センターの専門家ネットワークに参画している専門家」に対し、作成した分析資料を用いて今後注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。その後、アンケートの結果の分析等を行い、注目すべき研究動向として「エネルギー高効率変換に向けた革新的触媒の創製」を特定した。

（ワークショップの開催及び戦略目標の作成）

注目すべき研究動向「エネルギー高効率変換に向けた革新的触媒の創製」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、特に注目すべき国内外の動向、研究や技術開発の進展が社会的・経済的に与え得るインパクトやその結果実現し得る将来の社会像、研究期間中に達成すべき目標などについて議論を行い、ワークショップにおける議論等を踏まえ、戦略目標を作成した。

### 8. 閣議決定文書等における関係記載

科学技術イノベーション総合戦略 2014(平成 26 年 6 月 24 日閣議決定)

#### 第 2 章 第 1 節 I. 3. (3)①

シェールガス、非在来型原油や二酸化炭素等多様な原料から効率的にエネルギー・化学品の生産を図る革新的触媒技術等及び微生物やバイオマスによるエネルギー資源の生産技術を研究開発する。

### 9. その他

- 触媒がカバーする研究領域は幅が広く、プロジェクトごとにターゲットとしている領域が異なる。大型プロジェクトの主な対象は以下の通りである。
  - ・平成 24 年度戦略目標「環境、エネルギー、創薬等の課題対応に向けた触媒による先導的な物質変換技術の創出」の下で行われている研究では主に二酸化炭素を変換する化成品触媒や太陽光を使った水分解・水素生成を対象としている。
  - ・科学技術振興機構の先端的低炭素化技術開発(ALCA)ではバイオマスからの可溶化・糖変換や、化成品触媒を対象としている。
  - ・経済産業省では人工光合成化学プロセス技術研究組合(ARPCHEM)において、太陽光と光触媒を使った水分解反応により生成した水素を用いて、二酸化炭素を原料へ変換する人工光合成へ取り組んでいる。
  - ・平成 24 年度戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」、平成 25 年度戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」の下で行われている一部の研究では、バイオマスからの可溶化・糖変換や、化成品触媒を対象としている。
- このように、本戦略目標で対象とするメタンや低級アルカンからの化成品原料やエネルギーへの変換は重要な領域であるにも関わらず、現在までに対象としているプロジェクトがない未踏領域であり、本戦略目標の下で行われる研究に関して、他機関とも連携した体制を構築していくことが期待される。



### 5.4 気候変動時代の食料安定確保を実現する環境適応型植物設計システムの構築

#### 1. 目標名

気候変動時代の食料安定確保を実現する環境適応型植物設計システムの構築

#### 2. 概要

気候変動等の環境変化に適応する農作物の開発・栽培技術の確立は、日本を含む世界的な食料問題の解決に不可欠である。これを実現するためには、我が国のモデル植物の研究で得られた基礎植物科学の知見を農作物の開発や栽培につなげることが重要であり、植物科学における生物的データを工学や情報科学等の異なる分野の技術も含めた新たな視点で収集・解析することで、育種開発や栽培技術の高度化につなげていくことが必要である。

そのため、本戦略目標では、植物科学で蓄積されたゲノム、トランスクリプトーム、メタボローム等のオミクスデータと、最先端の測定技術を活用して取得するフェノーム等の定量的データ、さらには数値化された環境要因等を情報科学的に統合解析することで、植物の生育・環境応答の予測モデルを構築し、さらに予測モデルをもとにした環境適応力が向上した植物体の作製と実環境における栽培実証を行い、植物の「生育・環境応答予測モデル」を基盤とする「環境適応型植物設計システム」を構築する。

これにより、様々な環境条件下で生育可能な農作物の設計・作製及び栽培を可能とし、食料の安定確保の実現を目指す。

#### 3. 達成目標

本戦略目標では、植物体に関わる様々な要因と環境条件等の定量的データをもとに植物体の生育・環境応答を予測し、環境適応性を向上した植物の設計・作製及び栽培を可能とする「環境適応型植物設計システム」を構築することを目的とする。具体的には、以下の達成を目指す。

- ①植物の生育・生理状態・環境応答を詳細に把握可能な定量的計測技術の開発
- ②表現形質の変動に対応する対象植物ごとの生物的指標(バイオマーカー)の同定
- ③植物科学や工学等の異分野技術の融合を活用したバイオインフォマティクスによる「生育・環境応答予測モデル」の構築
- ④「生育・環境応答予測モデル」を基にした環境適応性を向上した植物体の設計・作製と実証

#### 4. 研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

3. 「達成目標」に記載した事項の達成を通じ、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- 急激な気候変動により、現在の農作物の栽培好適地域が栽培不適地域となる懸念が高まる中、「生育・環境応答予測モデル」による予測をもとに開発されてきた作物・品種によって、現在の農作物では農耕不適地となる地域でも安定した食料生産量を確保できる社会。
- 我が国で開発された「生育・環境応答予測モデル」、作物改良技術、環境モニタリング技術、統合オミクス解析技術等を基盤とした「環境適応型植物設計システム」が総合的な農業技術パッケージとして海外へ技術移転され、国土の大半が現在の農作物では農耕不適地となっている国や気候変動の影響で収量が減少した国においても安定した農作物栽培が可能となり、人口増や環境悪化による食糧不足の解決に貢献している社会。

#### 5. 具体的な研究例

##### ①植物の生育・生理状態・環境応答を詳細に把握可能な定量的計測技術の開発

植物の表現型を定量的に把握可能なフェノーム解析技術の高度化を行う。また、植物の生理状態を精密に把握可能なセンシング技術及びイメージング技術の開発と農業現場展開に向けた高度化等を行う。

##### ②表現形質の変動に対応する対象植物ごとの生物的指標(バイオマーカー)の同定

表現形質の変動に対応するバイオマーカーの同定に関する研究を行う。また、野外及び制御環境など、様々な環境条件下における植物の表現形質とリンクした遺伝子発現及び代謝変動情報の蓄積に関する研究等を行う

##### ③植物科学や工学等の異分野技術の融合を活用したバイオインフォマティクスによる「植物の生育・環境応答予測モデル」の構築

## 第 5 章 戦略目標

想定環境における植物の生育や開花等の表現形質の予測に係る研究を行う。また、環境ストレスに対する応答性の予測とストレス耐性を向上させる遺伝子及び関連形質の予測に係る研究等を行う。

- ④「生育・環境応答予測モデル」を基にした環境適応性を向上した植物体の設計・作製と実証  
「生育・環境応答予測モデル」を基に環境応答性を向上するように設計した植物体を作製するための植物体改変技術の開発と高度化を行う。また、「生育・環境応答予測モデル」を基に設計・作製された植物体の野外及び制御環境における栽培検証を行い、栽培期間における表現形質や生理状態変化のデータ化と「植物の生育・環境応答予測モデル」へのフィードバック等を行う。

### 6. 国内外の研究動向

#### (国内動向)

近年、日本の植物科学分野ではゲノム、トランスクリプトーム、代謝産物などのビッグデータを基盤とした数理解析が進み、生態レベルでの個体差、気象変動なども取り込んだ発現解析などがトレンドとなっている(日本学術振興会 平成 25 年度学術研究動向に関する調査研究 報告概要(生物学専門調査班))。一方で植物科学分野における日本の研究水準は極めて高く、イネゲノムプロジェクトの成果に見られるように、欧米に匹敵するものであるが、その応用としての技術開発水準、産業技術力の何れにおいても欧米に劣っていると報告されている(科学技術振興機構研究開発戦略センター ライフサイエンス分野 科学技術・研究開発の国際比較 2009 年版)。

#### (国外動向)

米国ではPlant Genome Initiativeのもとに、シロイヌナズナの遺伝子解析が進められてきたが、近年では実用作物に対する遺伝子解析研究も進んでいる。一方で、欧州ではシステムバイオロジーによる統合的な理解をある特定の系に基づいて行ってきており、近年ではCrop Performance and Improvementという形で実用作物を指向した研究開発を実施している(科学技術振興機構研究開発戦略センター ワークショップ報告書 2009「フィールドにおける植物の環境応答機構と育種技術」)。海外ではDNAマーカー技術・遺伝子解析技術を独自開発できるバイオメジャーが中堅規模の種苗メーカーを吸収し、野菜の種苗開発へ進出する動きが目立つ。さらに次世代型シーケンサーの普及により、非モデル作物のゲノム解読が欧米及び中国で急速に進んでいる(科学技術振興機構研究開発戦略センター 研究開発の俯瞰報告書ライフサイエンス・臨床医学分野 2013 年版)。

### 7. 検討の経緯

「戦略的な基礎研究の在り方に関する検討会報告書」(平成 26 年 6 月 27 日)に基づき、以下の通り検討を行った。

(サイエンスマップ及び科学研究費助成事業データベースを用いた国内外の研究動向に関する分析資料の作成)

「サイエンスマップ 2012&2010」(平成 26 年 7 月 31 日科学技術・学術政策研究所)及び科学研究費助成事業データベースにおける情報を用いて、国内外の研究動向に関する分析資料を作成した。

(分析資料を用いた専門家へのアンケートの実施及び注目すべき研究動向の作成)

「科学技術振興機構研究開発戦略センター」や「科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センターの専門家ネットワークに参画している専門家」に対し、作成した分析資料を用いて今後注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。その後、アンケートの結果についての分析等を行い、注目すべき研究動向として「植物の生命現象解明を加速するインシリコ植物デザインシステムの開発」を特定した。

(ワークショップの開催及び戦略目標の作成)

注目すべき研究動向「植物の生命現象解明を加速するインシリコ植物デザインシステムの開発」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、特に注目すべき国内外の動向、研究や技術開発の進展が社会的・経済的に与え得るインパクトやその結果実現し得る将来の社会像、研究期

## 第 5 章 戦略目標

間中に達成すべき目標などについて議論を行い、ワークショップにおける議論等を踏まえ、戦略目標を作成した。

### 8. 閣議決定文書等における関係記載

「第 4 期科学技術基本計画」(平成 23 年 8 月 19 日閣議決定)

#### Ⅲ. 2. (1) ii)

我が国の食料自給率の向上や食品の安全性向上、水の安定的確保に向けて、安全で高品質な食料や食品の生産、流通及び消費、更に食料や水の安定確保に関する研究開発を、遺伝子組換え生物(GMO)等の先端技術の活用や産業的な観点も取り入れつつ、推進する。

#### Ⅲ. 2. (5) i)

先端計測及び解析技術の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、シミュレーションや e-サイエンス等の高度情報通信技術、数理科学、システム科学技術など、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進する。

「科学技術イノベーション総合戦略」(平成 26 年 6 月 24 日閣議決定)

#### 第 2 章第 1 節Ⅳ. 3. (1)①

ターゲット市場や国際的な技術競争等を踏まえ、ゲノムや代謝産物等の解析、データベース構築等の情報基盤の整備、有用遺伝子の特定、DNA マーカーの開発、バイオインフォマティクスや工学技術、ゲノム編集技術の活用等において、基礎と実用化研究の双方向の連携を図りつつ、画期的な商品提供を実現する新たな育種技術の開発等を戦略的に推進する。

### 9. その他

- 本戦略目標においては、基礎植物科学以外の情報科学・工学・農学等の異分野の研究者が積極的に参入し、実質的に協働するための取り組みが不可欠である。特に、人材不足が指摘されるバイオインフォマティクス分野の人材の参画と養成が重要である。また、我が国におけるライフサイエンス分野の研究データ及び成果が効率的に活用されるためには、科学技術振興機構バイオサイエンスデータベースセンター(JST-NBDC)等を最大限に活用することが求められる。
- 実証を伴う課題設計のためには、農作物の実地的栽培環境と同等の条件で植物を栽培・管理する環境を備える機関の参画が期待される。また、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「次世代型農林水産業創造技術」等の出口戦略と有機的に連携し、本戦略目標の下で行われる研究の成果が着実に展開されることが期待される。

## 5.5 社会における支配原理・法則が明確でない諸現象を数学的に記述・解明するモデルの構築

### 1. 戦略目標名

社会における支配原理・法則が明確でない諸現象を数学的に記述・解明するモデルの構築

### 2. 達成目標

社会における諸現象のうち、現時点で支配原理・法則が明確でなく、数理モデル化ができれば社会に対して大きなインパクトが見込まれる現象について、数学・数理科学の研究者と応用分野の研究者などによる異分野協働などを通じて、数学がもつ抽象性・普遍性を活用し、諸現象に潜む複雑な構造の「本質」部分を数学的に見いだすことにより、以下の実現を目指す。

○現象を数学的に記述するモデルの導出

○導出された数理モデルの実証・検証及び評価のための数学的理論等の構築

### 3. 将来実現し得る重要課題の達成ビジョン

本戦略目標を実施し、2. 「達成目標」に記載した研究成果が得られることで、現時点で支配原理・法則が明確ではない現象について、数理モデルを導出することができる。

## 第 5 章 戦略目標

また、数理モデルを実証、検証及び評価するための新たな数学的理論が構築される。さらに、検証された数理モデルは、その普遍性によって、対象や時代の変化を受けることなく、様々な状況下において利用可能となることが期待される。

対象となる現象と応用分野は、例えば以下が想定される。

- ・社会現象(経済変動、感染症の伝播、交通流、電力・通信ネットワークの変動、災害時の住民行動、各種社会インフラの老朽化 等)
- ・自然現象(気候変動、集中豪雨・地滑り・竜巻・津波等の突発的な自然現象 等)
- ・生命現象(遺伝子間の相互作用メカニズム、脳内の知覚認識・情報処理メカニズム 等)

上記のような現象について数理モデルを導出することで、例えば以下のことが将来に期待される。

○諸現象に潜む複雑な構造の「本質」部分の抽出、数学的に裏付けられた処理の効率化

複雑な構造の現象をモデル化する際の様々な困難(モデルの複雑化等)を回避するため、その「本質」部分を数学的に見だし、数理的な根拠をもって簡略化した記述を行うことで、情報量が多く計算機の処理負荷が高い作業を著しく効率化することができる。例えば、比較的単純で安定な構造によって新たな機能発現を期待する新材料の創成が、その構造の「本質」部分を数学的に見だし精密に制御することにより可能となることや、画像解析処理時間の大幅な短縮、データ分析に要する時間の大幅な短縮などが期待される。

○リスクが顕在化する前の「兆し」の解明、スマートな未然の対応や効果的の制御

現象をネットワーク構造の変化と捉えて数理モデル化することで、例えば、ネットワーク構造を有する、電力供給システム、経済システム、製造のプロセス、各種情報サービス等に対して、不安定になる「兆し」等の検出が可能となり、事前の対策や効果的な制御につながることを期待される。

また、限られたデータだけによる経験的モデルでは想定できなかった、まだ発生していない現象の「兆し」の検出が可能になることが期待される。

### 4. 具体的内容

(背景)

近年、社会の情報化・複雑化や計測機器の発達、計算機性能の飛躍的向上等に伴い、生命現象や自然現象、社会現象などに関する情報を得ることが可能となり、これらの現象の複雑さがよく分かるようになってきた。しかし、これらの現象については、支配原理・法則が不明確でモデルを作れないため、なぜそのような現象が起こるのかは十分に分からないまま、うまく対処した経験知の積み重ねによって現象を理解しているものも多い。また、経済やエネルギー、防災などにおいては既に何らかのモデルが用いられていても、個別分野固有の理論的枠組みに基づくモデルだけでは捉えきれないものが増えており、現象の「本質」を理解する上で不可欠な数学・数理科学研究者との連携は必ずしも十分とは言えない。さらに、近年の数学の発展により、これまで応用されたことのない現代数学の理論がこのような現象の「本質」を理解する手掛かりを与え、画期的な成果をもたらす可能性が残されている。

このような状況の中、我が国では平成 19 年度に戦略目標「社会的ニーズの高い課題の解決へ向けた数学／数理科学研究によるブレークスルーの探索」を設定し、数学・数理科学研究者と諸科学分野の研究者の連携を促進している。この取組からは、純粋数学の手法を現象解明に適用したことで課題解決に発展したこと、特に、様々な現象を記述する数理モデルの構築が連携による注目すべき成果として報告されている。

これらの状況を踏まえ、本戦略目標では、従来の科学技術の延長では解決が困難な社会的課題に取り組み、ブレークスルーを起こすために、純粋数学の研究者が現実社会の課題の中から数学的問題を取り上げ参加することを期待するとともに、数学・数理科学の力が発揮できる「現象の数理モデリング」に注力する。また、数理モデルの導出には、既存のモデルの枠組みを超えて、異なる数学分野の技法を融合することや全く新しい定式化を行う必要もあることから、数学内の様々な分野の研究者間の連携や、異なる数理モデリングにかかわる理論研究者間の連携も不可欠である。

(研究内容)

#### 1) 現象を数学的に記述するモデルの導出

## 第 5 章 戦略目標

社会現象や工学分野などにおける既存のモデル化技術と、現象の「本質」を理解する上で不可欠な数学・数理科学的知見や理論とを融合することで、諸現象に潜む複雑な構造の「本質」部分を見いだし、データが十分にある現象だけでなく、不足している現象についても、それを記述する数理モデルを導出する。

対象となる現象と応用分野としては、例えば社会現象においては、経済変動、感染症の伝搬、交通流、電力・通信ネットワークの変動、災害時の住民行動、各種社会インフラの老朽化等、自然現象においては、気候変動、集中豪雨・地滑り・竜巻・津波等の突発的な自然現象等、また、生命現象においては、遺伝子間の相互作用メカニズム、脳内の知覚認識・情報処理メカニズム等が想定される。

これらの現象を記述する数理モデルの枠組みの例としては、以下のようなものがある。

- 1: 電力網、通信網、神経網、人の接触関係などの現実の複雑なネットワークにおける構造とダイナミクスを表現するネットワークモデル
- 2: 時空間的に異なるスケールのサブシステムが階層を構成するようなシステムを統合的に扱うためのマルチスケールモデルやマイクロモデルとマクロモデルの中間に位置づけられるメゾスコピックモデル
- 3: 連続変数と離散変数を含む電子回路や物理的作用と化学的作用を含む生物の組織形成などのように異質なシステムが相互作用するシステムを記述するための、ハイブリッドモデルやマルチフィジックスモデル

また、導出された数理モデルの普遍性を活用し、当初対象としていた現象とは異なる現象に応用することで、様々な分野に横断的に応用可能なモデリング技術へ発展することを目指す。

### 2) 数理モデルの実証・検証及び評価のための数学的理論等の構築

上記 1) で導出される数理モデルや既存の数理モデルについて、実際の課題や現象を記述していることを実証・検証するとともに、モデル評価のための数学的理論や技術の構築を目指す。

### 5. 政策上の位置付け(政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等)

第 4 期科学技術基本計画(平成 23 年 8 月 19 日閣議決定)では、「III. 我が国が直面する重要課題への対応」の「(5) 科学技術の共通基盤の充実、強化」において、「数理科学」は「複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術」として位置付けられ、それに関する研究開発を推進することが明記されている。

また、数学イノベーション戦略(中間報告)(平成 24 年 8 月科学技術・学術審議会先端研究基盤部会)においては、「複雑な現象やシステム等の構造の解明」、「リスク管理」、「将来の変動の予測」等につながる課題が、数学・数理科学の活用による解決が期待される課題として整理されている。

### 6. 他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

戦略目標「社会的ニーズの高い課題の解決へ向けた数学／数理科学研究によるブレークスルーの探索」(平成 19 年度設定)に基づいて発足した科学技術振興機構(JST)「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」研究領域で、純粋数学をはじめとする幅広い分野の研究者の協働により、新たな数理モデルをはじめ、優れた成果が出始めている。本戦略目標では、同領域と連携しつつ、純粋数学をはじめとする幅広い分野の研究者を取り込みながら、数学と諸分野の協働により社会課題の解決を図る取組を加速していく。

また、平成 23 年度より文部科学省が大学等と共催している「数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワークショップ」(平成 23 年度、24 年度は合計 57 件、参加者合計 3,211 名)や、文部科学省委託事業「数学・数理科学と諸科学・産業との協働によるイノベーション創出のための研究促進プログラム」(平成 24 年度開始)においては、諸科学・産業における数学・数理科学的知見の活用による解決が期待できる課題を積極的に発掘して諸科学・産業との協働による研究テーマを具体化し、具体的な研究へとつなげるための活動を行っている。これらの活動を通じて議論が深められた課題や研究テーマが本戦略目標での研究に発展することが期待される。

## 第 5 章 戦略目標

### 7. 科学的裏付け(国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等)

JST 研究開発戦略センター(CRDS)の報告書※1によると、我が国におけるモデリングや解析技術の研究は、各大学の数理工学科や複雑理工学科、内閣府最先端研究開発支援プログラムの最先端数理モデルプロジェクトなどにおいて進められており、基礎研究の水準は高いと考えられる。今後は、生物医学におけるゲノム情報などのハイスループットデータの蓄積、脳科学における多計測脳波データの取得、地理情報学におけるリアルタイムの交通・輸送情報データの計測など各分野において大量のデータ取得が可能となってきている中、これらのデータから実際のシステムの本質を抽出し数理モデリングを行う技術の確立が課題となっている。

また、同報告書では、米国の NSF、NIH、USDA、及び英国の BBSR が共同で、約 15 億円を投じて 2012 年から 5 年間のプロジェクト「感染症の生態学と進化」を発足しており、その目標の一部として、感染症抑制のための生態学的、進化的、社会生態学的原理の数理モデリングを掲げていること、米国 DOE は、応用数学分野のプロジェクト編成の枠組みにおける指針において、今後どのような数理モデリング研究やアルゴリズム研究にファンディングを配分していくのかを示していることが記載されている。

数理モデリングを中核に据えた本戦略目標を設定することで、各応用分野の研究者、数理学研究者、数学研究者等を集めて数理モデリング研究に注力させ、国際競争力の更なる向上を図る必要がある。

※1 科学技術振興機構研究開発戦略センター、『研究開発の俯瞰報告書 システム科学技術分野(2013 年)』

### 8. 検討の経緯

平成 21 年度の文科省委託調査(委託先：九州大学ほか)において、大学の数学・数理学研組織(175 組織)、他分野研究者(5,000 名)、企業(1,000 社)へのアンケート調査及び国内外有識者(65 名)へのヒアリング調査を踏まえた調査報告がされ、JST 戦略的創造研究推進事業で実施中の「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」研究領域の発展的継続が提言された。

数学イノベーション戦略(中間報告)においては、「複雑な現象やシステム等の構造の解明」、「リスク管理」、「将来の変動の予測」等につながる課題が、数学・数理学の活用による解決が期待される課題であるとされた。

平成 25 年に出された CRDS の報告書において「先端的数理モデリング」が 5 つの研究開発領域の 1 つとして取り上げられた。その中において、数理モデリングは、現象や行動のモデル化プロセス自体を対象とする横断的学術領域であること、また、対象の適切なモデル化は、現象の制御、将来予測、科学的意思決定の前提であり、多くの学術的、社会的課題は、パラメータなどモデルの要素の条件付最適化を通じて達成されること、等が指摘されている。

本戦略目標はこれらの検討の結果を踏まえて作成したものである。

### 9. 留意点

本戦略目標に基づく研究の実施に当たっては、数理モデリングに関わる本領域の研究者や関連する国内外の応用分野の研究者等が一定期間集まり、社会における数理モデル化を目指すべき現象や数理的アプローチなどについて集中的に議論し、世界の社会的な重要課題、研究動向を把握できるような場を設け、新たな展開へつなげていくことも重要である。

## 5.6 情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製

### 1. 戦略目標名

情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創成

### 2. 達成目標

従来のシリコンデバイスによる微細化、集積化が限界を迎える中、現在より 2 桁以上低い消費電力と 2 桁以上高速の情報デバイスを開発することを共通目標とし、将来のエレクトロニクス産業の基盤

## 第 5 章 戦略目標

を確立するため、新規機能性材料の適用可能性の追求等による素材技術(先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術)の創出、新材料・新原理・新構造の論理素子・記憶素子の動作検証等によるデバイス技術の構築、先進的なナノテクノロジー等の実装に向けたナノシステム\*最適化技術の創出、そしてそれら技術の融合に取り組むことにより、以下の目標を達成することを目指す。

- 革新デバイスを下支えする新規機能性材料の創製及び適用可能性の追求による素材技術の創出
- 超低消費電力、超高速、超大容量等を可能にする新材料・新原理・新構造の論理素子・記憶素子等による革新デバイス技術の創出
- 異分野の要素技術を集積・統合・融合することによるナノシステムの最適設計に向けた基盤技術の創出

※本戦略目標においては、ナノテクノロジーを基軸として他分野の要素技術を集積・統合・融合し、全体として重要課題の解決に資する高度な機能を提供することが可能で、かつ社会的に認知される部品・装置・システムのことと定義する。

### 3. 将来実現し得る重要課題の達成ビジョン

本戦略目標において「2. 達成目標」に記載した研究成果を企業等の実用化研究につなげることにより、その諸技術を活用した革新的なデバイスが開発され、情報通信機器やシステム構成機器の超低消費電力化、高機能化や多機能化の実現が可能となる。

これにより、具体的には以下のような社会の実現につなげ、第4期科学技術基本計画(平成23年8月19日閣議決定)に掲げられた「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」、「産業競争力の強化に向けた共通基盤の強化」、「領域横断的な科学技術の強化」等の達成に貢献することを目指す。

- (1) あらゆる情報通信端末、情報デバイス等が超低消費電力化されることにより、省エネルギー時代に適合した持続可能な高度情報通信ネットワーク社会の形成に大きく貢献する。
- (2) 新たな動作原理に基づくデバイスの融合による、タッチパネル、フレキシブルディスプレイ、太陽電池、バイオセンサ等、多方面での応用が可能となり、真のユビキタス社会が実現される。
- (3) 知識基盤社会、低炭素社会、高度情報化社会等に対応した社会的付加価値を有する最終製品を生み出すことにより、我が国の国際競争力を堅持し、新たな産業構造を切り拓(ひら)く基幹産業が育成される。

### 4. 具体的内容

#### (背景)

現在、半導体産業は世界的に厳しい競争に直面しているが、最近の予測<sup>\*1</sup>では、2012年の市場規模は2,899億ドルと過去最高であった前年度をわずかに下回ったものの、今後も緩やかな成長を継続していくと予想されており、その位置付けについては、例えば「半導体産業は「見えるインパクト」と「見えざるインパクト」を通して、日本の社会、経済、環境に大きな影響を与えている」と紹介<sup>\*2</sup>されるなど、産業競争力の基盤としての役割を果たしている。また、今後の本格的なIT化に伴い、我が国の情報量は爆発的に増大(情報爆発)し、試算では2025年には現在の100~200倍もの情報がインターネット上を行き交う時代となり、こうした情報爆発に対応すべく、情報を処理するIT機器の台数が大幅に増加するとともに、各機器の情報処理量が急増し、今後のIT機器による消費電力量の急増が深刻な課題になると指摘されている(消費電力量が2025年には2006年比で約5.2倍、2050年には2006年比で約12倍になると推計されている。)<sup>\*3</sup>。また、民間調査機関の推計<sup>\*4</sup>によれば、世界の情報量は、2020年には約40ゼタバイト(2010年度時の約50倍)へ拡大する見込みであり、この増え続ける情報を処理するために、現在のシリコンデバイスの集積化、微細化は今後も必須の流れとなっている。しかし、現状のシリコンデバイスでは、集積化に伴う素子の消費電力増大、微細化の物理的限界、特性ばらつき増大等が喫緊の課題となっている。これらの制約を突破する方策として、近年、世界的に進展の著しいナノエレクトロニクス技術を駆使して、従来のCMOS(相補性金属酸化膜半導体)技術に沿って新たな機能を持った材料及びデバイスを付加し性能向上を図る方向と、従来のCMOSを超える新しい動作原理に基づくデバイス及びシステムの実現を目指す方向とが模索されている。

#### (研究内容)

このような現状において、本戦略目標では、微細化・高速化や低消費電力・多機能化を個別に追及するのではなく、先進的なナノテクノロジー等の要素技術を糾合することにより、革新的なシーズを創出し、将来のエレクトロニクス産業の基盤を確立することを目的として、具体的には、以下のよう

## 第 5 章 戦略目標

な研究を行う。なお、本戦略目標では、材料、デバイス、システム等、それぞれの分野の専門家がプロジェクトの早期の段階から連携・協働できる体制を構築し、現在より 2 桁以上低い消費電力と 2 桁以上高速の情報デバイス(携帯電話、パソコン、ストレージ等をはじめとする ICT 機器全般)を開発するという共通目標の達成に向け、戦略的かつ機動的な研究を実施することが求められる。具体的には、以下の研究を想定する。

- ① 革新デバイスを下支えする新規機能性材料の創製及び適用可能性の追求による素材技術の創出
  - ・新規機能性材料の構造や物性に関する計測・解析・加工プロセス技術の創出
  - ・革新デバイスになることが期待されるグラフェン等の原子薄膜の結晶実現・機能解明・学理構築に関する研究
- ② 超低消費電力、超高速、超大容量等を可能にする新材料・新原理・新構造の論理素子・記憶素子等による革新デバイス技術の創出
  - ・優れた物性を有する新物質・新規機能性材料をデバイスに応用する技術に関する研究
  - ・異種材料の接合等による新機能デバイスの提案と原理実証
  - ・微細化・高集積化を可能とする革新的なデバイス・アーキテクチャ技術の創成
- ③ ①、②をはじめとする要素技術を集積・統合・融合することによるナノシステムの最適設計に向けた基盤技術の創出
  - ・デバイス機能を発現・最適化するための物質構造及びデバイス構造の設計及び計算機シミュレーション技術の創出
  - ・素材、回路等の様々な階層の連携・協調による超低消費電力化技術の創出

※1 世界半導体市場統計(WSTS: World Semiconductor Trade Statistics), “WSTS Semiconductor Market Forecast Autumn 2012”, 2012. 11

※2 一般社団法人半導体産業研究所(Semiconductor Industry Research Institute Japan), 「半導体産業が日本の社会・経済・環境に与えるインパクトの社会科学分析 最終報告書」, 2009. 7

※3 経済産業省「情報通信機器の省エネルギーと競争力の強化に関する研究会」

※4 IDC, “Big Data, Bigger Digital Shadows, and Biggest Growth in the Far East”, 2012. 12

### 5. 政策上の位置付け(政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等)

「第 4 期科学技術基本計画」では、エネルギー利用の高効率化及びスマート化に向け、「情報通信技術は、エネルギーの供給、利用や社会インフラの革新を進める上で不可欠な基盤的技術であり、次世代の情報通信ネットワークに関する研究開発、情報通信機器やシステム構成機器の一層の省エネルギー化、ネットワークシステム全体の最適制御に関する技術開発を進める」こととされ、また、産業競争力の強化に向けた共通基盤の強化のため、「付加価値率や市場占有率が高く、今後の成長が見込まれ、我が国が国際競争力のある技術を数多く有している先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術、高機能電子デバイスや情報通信の利用、活用を支える基盤技術など、革新的な共通基盤技術に関する研究開発を推進するとともに、これらの技術の適切なオープン化戦略を促進する」こととされている。

総合科学技術会議においても、「平成 25 年度科学技術重要施策アクションプラン」(平成 24 年 7 月 19 日総合科学技術会議 科学技術イノベーション政策推進専門調査会)において、「大幅なエネルギー消費量の削減を目指す「エネルギー利用の革新」」が政策課題として掲げられ、「技術革新によるエネルギー消費量の飛躍的削減」が重点的取組とされた。また、「平成 25 年度重点施策パッケージの重点化課題・取組」(同上)では、我が国で発見されたカーボンナノチューブやグラフェン等のナノカーボン新材料を、世界に先駆け様々な部材・製品(熱交換器、電池、エレクトロニクスデバイス、複合材料等)へ応用することにより、幅広い産業で部材、部品及び製品の産業競争力を高めるとともに、新たな成長産業を創出することなどから、我が国の産業競争力の強化に向けた重点的取組として、「ナノカーボン新材料(CNT(Carbon Nano Tube)・グラフェン等)の様々な分野への応用/商用技術の開発」が提示された。

以上のとおり、「グリーンイノベーションの推進」や「我が国の産業競争力の強化」に向け、革新的な材料による省エネデバイスの開発が政策的にも求められているところである。

### 6. 他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

大学等におけるこれまでの取組や既存の戦略的創造研究推進事業等の成果を積極的に活用するとともに、関連するプロジェクト間と緊密な連携を確保し、速やかに成果の実用化を図る。具体的には、



## 第 5 章 戦略目標

本戦略目標において創出される成果については、将来のエレクトロニクス産業の基盤を確立する観点から、研究期間中であっても、知的財産を適切に確保した上で、研究成果の実用化を目指す産学連携事業等や民間企業のプロジェクトへ速やかに展開する。特に、幅広い産学官の研究者が集結する TIA(つくばイノベーションアリーナ)やその他の研究開発拠点等の枠組みを最大限に活用し、本戦略目標における基礎研究の成果を、我が国の産業競争力の強化に直結させる体制を構築する。

### 7. 科学的裏付け(国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等)

米国では 2011 年 2 月に改定された「米国イノベーション戦略」において重点項目として「ナノテクノロジーを加速化する」との表現が盛り込まれ、特にナノエレクトロニクスへの投資の必要性が謳(うた)われている。また、欧州においては、長期的かつ多額の資金が必要なハイリスク研究で、産業界の支援が明確な領域を優先的に支援する「ジョイント・テクノロジー・イニシアティブ(JTI)」を立ち上げており、その中に、「ナノエレクトロニクス」が含まれている。中国においては、国家中長期科学技術発展計画綱要(2006～2020 年)に基礎研究分野の重点科学研究のテーマとしてナノテクノロジー研究が盛り込まれており、具体的な重点課題として「コンセプト及び原理段階のナノデバイス、ナノエレクトロニクス、ナノバイオ・医学」が挙げられている。

一方、我が国の現状については、「ナノエレクトロニクスでは日本は総じて高い水準を保つが、世界のアクティビティと比較すると必ずしも楽観できるものではない。特にナノエレクトロニクスを牽引(けんいん)するナノ CMOS 技術においては、世界的に研究開発の拠点化とアライアンスが進む中、日本メーカーの研究開発アクティビティは大幅に低下している。深刻なのはアカデミアの基礎研究・開発も他国に遅れ始めたことであり、今後、長期的観点に立った人材育成策や産学協同体制の構築を図らない限り、やがては韓国あるいは中国に追い抜かれることは避けられないだろう」と、諸外国との国際比較に基づき分析している\*。

このような状況を踏まえ、本戦略目標を通じて、ナノエレクトロニクスに関わる研究開発が進展することで、大幅な低消費電力化、小型化、新機能を有するデバイスが実現し、ビッグデータ時代に不可欠な省エネシステムを達成するとともに、エレクトロニクス産業等の競争力強化を実現することが求められる。

※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・材料分野 科学技術・研究開発の国際比較 2011 年版』, 2011

### 8. 検討の経緯

科学技術振興機構研究開発戦略センター(JST/CRDS)が開催した科学技術未来戦略ワークショップ「次世代を拓くナノエレクトロニクス～2030 年の先を求めて」(平成 21 年 3 月)において、①微細化、集積化の限界を突破又は回避するためのナノエレクトロニクス基盤技術の研究開発、②ナノエレクトロニクスデバイスのための新材料探索とデバイス適用可能性の実証の推進の重要性が改めて確認された。上記ワークショップの議論も踏まえ、JST/CRDS 戦略プロポーザル「ナノエレクトロニクス基盤技術の創成－微細化、集積化、低消費電力化の限界突破を目指して－」(平成 21 年 7 月)が策定され、新原理、新構造、新材料の探索と、それらを用いたデバイスの研究開発に対する長期にわたる取組が必要であることが提言された。グラフェンを始めとする二次元薄膜が注目を集めている中、JST/CRDS 科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜/分子薄膜の創生と展開」(平成 24 年 2 月)が開催され、エレクトロニクス動作に際してのエネルギーロス最小化には、究極的に薄い膜、つまり原子薄膜、分子薄膜が理想的であることが指摘された。上記ワークショップの議論を踏まえ、JST/CRDS 戦略プロポーザル「二次元機能性原子薄膜による新規材料・革新デバイスの開発」が策定され、「アプリケーションニーズに応える機能性原子薄膜による革新デバイス基盤技術の創出」と「シーズ技術の先鋭化に資する新構造原子薄膜の機能研究とデバイス設計学理の創出」が、具体的な研究開発課題として提言された。

以上の議論も踏まえ、科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会が取りまとめた「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策について<中間取りまとめ>」(平成 23 年 7 月)において、「エレクトロニクスの省エネルギー化、多機能化」が課題解決に向けた重点研究開発課題とされ、省エネルギー性能の向上やグローバルな競争環境を注視しながら研究開発を加速することが重要であるとされた。また、情報科学技術委員会が取りまとめた「情報科学技術に関する推進方策(中間報告)」(平成 23 年 9 月)において、情報科学技術に今後求められる方向性

## 第 5 章 戦略目標

として、「IT システムの超低消費電力化(グリーン化)」が挙げられた。以降、両委員会において継続的に議論が重ねられた。

本戦略目標は、これらの検討の結果を踏まえて作成したものである。

### 9. その他

世界各国がしのぎを削る中、我が国としてもこれまでの学術的・技術的・人的蓄積を最大限生かし、TIA などの世界的な産学官集中連携拠点等とも連携して、本戦略目標における基礎研究の成果を、我が国の産業競争力の強化に直結させる体制を構築させることが重要である。そのため、本戦略目標では、大学等におけるこれまでの取組や既存の戦略的創造研究推進事業等の成果を積極的に活用するとともに、関連するプロジェクト間と緊密な連携を確保し、速やかに成果の実用化を図ることが求められる。

## 5.7 分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理工法手法の創出・高度化・体系化

### 1. 戦略目標名

分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理工法手法の創出・高度化・体系化

### 2. 達成目標

情報科学・数理科学分野とビッグデータの利活用により大きな社会的インパクトを生むような様々な研究分野(アプリケーション分野)との協働により研究を進め、アプリケーション分野での課題解決を通じてビッグデータから新たな知識や洞察を得ることを可能とする次世代アプリケーション技術を創出し、高度化すると同時に、様々な分野のビッグデータを統合解析することを可能とする共通基盤技術の構築を目指す。そのため、以下の目標の達成を目指す。

- 各アプリケーション分野においてビッグデータの利活用を推進しつつ様々な分野に展開することを想定した次世代アプリケーション基盤技術の創出・高度化
- 様々な分野のビッグデータの統合解析を行うための次世代基盤技術の創出・高度化・体系化

### 3. 将来実現し得る重要課題の達成ビジョン

本戦略目標を実施し、「2. 達成目標」に記載した研究成果が得られることで、様々な分野のビッグデータを統合解析するための共通基盤技術を構築することができ、分野を超えたビッグデータの利活用を実現することができる。構築された技術を用いることで、ビッグデータの利活用が有効な研究分野の論文データ、実験・シミュレーションデータ、観測データ等の高度利用が可能となり、社会科学・人文科学等を含む複数の分野が連携した異分野融合領域のイノベーション創出を加速させることができる。

本事業終了後、アカデミア・企業等が様々な分野のビッグデータを統合解析できる共通基盤技術を活用して、研究開発や実用化を推進することで、例えば

- ・ ライフサイエンス分野では、診療情報と関連づけられた 10 万人規模の全ゲノムデータ(30 億塩基対)を活用した、疾患関連遺伝子の効率的な探索技術等による、オーダーメイド医療や早期診断、効果的治療法の確立
- ・ 地球環境分野では、様々な要因が複雑に絡み合う地球規模課題の解決に貢献し持続可能な社会を構築するため、地球温暖化、森林や水などの自然循環、生態系、地理空間等の異なるデータ間の関係性を高度につなぎ合わせる基盤的情報技術の確立
- ・ 防災分野では、災害・事故から得られた気象、地理空間等のデータを容易に分析可能な形に蓄積・構造化する技術等による精緻な災害の予測や防災機能強化の推進、都市の最適設計手法の高度化等

の実現を目指す。これらの実現によって、イノベーションによる新産業・新市場の創出や、国際競争力の強化を推進し、第 4 期科学技術基本計画(平成 23 年 8 月 19 日閣議決定)の「我が国の産業競争力の強化」、 「研究情報基盤の整備」の達成に貢献することを目指す。

## 第 5 章 戦略目標

### 4. 具体的内容

#### (背景)

高度情報化社会の進展に伴い、デジタルデータが爆発的に増大するビッグデータ(情報爆発)時代が到来した。世界のデジタルデータの量は、民間調査機関の推計<sup>\*1</sup>によれば、2020年には、約40ゼタバイト(2010年度時の約50倍)へ拡大する見込みである。また、情報通信政策研究所の調査<sup>\*2</sup>によると、日本における平成21年度の流通情報量は7.61E21ビット(一日あたりDVD約2.9億枚相当。例えば、E18ビットは10の18乗であることを示している。)であるが、消費情報量は2.87E17ビット(一日あたりDVD約1.1万枚相当)であり、流通に対して消費された情報量は0.004%にしかすぎない、と言われている。

その質的・量的に膨大なデータ(ビッグデータ)には新たな知識や洞察を得られる可能性があるが、様々なデータ(バイオ、天体観測等の自然科学のデータから社会科学的な人の観測データまで多様)を組み合わせて、大規模な処理を実行しようとする、想定外のデータや正常に分析できないデータが大きくなることが多く、現況においてはその多くのデータが整理・構造化されておらず、有効に活用できていない状況である。

このため、ビッグデータを効果的・効率的に収集・集約し、革新的な科学的手法により知識発見や新たな価値を創造することの重要性が、国際的に認識されてきている。第一の科学的手法である経験科学(実験)、第二の科学的手法である理論科学、第三の科学的手法である計算科学(シミュレーション)と並び、データ科学(data centric science =e-サイエンス)は第四の科学的手法と言われ<sup>\*3</sup>、ビッグデータ時代における科学の新たな地平を拓(ひら)く方法論として注目されている。

#### (研究内容)

本戦略目標では、ビッグデータの解析を円滑に実行するための革新的な方法論等の創出等のため、2つの達成目標の実現を目指す。具体的には以下の研究を想定する。

#### ① 各アプリケーション分野においてビッグデータの利活用を推進しつつ様々な分野に展開することを想定した次世代アプリケーション基盤技術の創出・高度化

個別のアプリケーション分野の課題解決とともに、固有技術の他分野展開や新規基盤要素技術の導入を強力に推進する。このため、情報科学・数理科学分野とアプリケーション分野の研究者等による協働研究チーム体制を構築することが期待される。具体的には、以下の研究を推進する。

- ・多様かつ大量のアプリケーションデータ(健康・医療データ、地球観測データ、防災関連データ、ソーシャルデータ等)の転送、圧縮、保管等を容易に実現するための研究
- ・画像データや3次元データ等の多様なデータを検索、比較、解析等することで有意な情報を抽出するための研究
- ・アプリケーションデータから新たな課題の発見や洞察をより正確に行うための研究(疾患要因の解明、気候変動予測、リアルタイム解析による減災、人のニーズの予測等)
- ・定量データから生体、自然現象等に係る多様な数理モデルを構築し、実測データと組み合わせることで新たな知見を得るような、発見的探索スタイルの研究アプローチ推進のための研究基盤創出

#### ② 様々な分野のビッグデータの統合解析を行うための次世代基盤技術の創出・高度化・体系化

情報科学・数理科学分野や人文科学の研究者による、独自の新規基盤要素技術の創出や複数のアプリケーション分野に展開する新規要素技術の創出を行う。具体的には、以下の研究を推進する。

- ・データクレンジング技術(ノイズ除去、データの正規化、不要なデータ変動の吸収等)やデータに対して自動的に意味や内容に係る注釈を付与する技術
- ・高度な圧縮技術、圧縮したままで検索する技術、秘密性や匿名性を損なわないままマイニングする技術
- ・データマイニング技術や機械学習の高度化(大量・多様なデータからのモデリング技術、異種データから関連性を探索する技術等)
- ・多様なアプリケーションデータの相関や関係性から新たな洞察を導くための可視化技術
- ・ビッグデータを共有・流通するためのシステム技術(データの加工、メタデータ管理、トレーサビリティ、匿名化、セキュリティ、課金等)
- ・課題の本質やビッグデータの構造を見いだすための数理的手法

なお、①の次世代アプリケーション基盤技術の創出・高度化に当たっては、②の研究で得られる次世代基盤技術を取り込みながら推進することが効果的であり、また、②の次世代基盤技術の創出・高

## 第 5 章 戦略目標

度化・体系化に当たっては、①の研究で得られる次世代アプリケーション基盤技術やデータを共有、活用しながら研究を進めることが効果的であることから、①と②の研究が相互に連携することが求められる。

※1 IDC, “Big Data, Bigger Digital Shadows, and Biggest Growth in the Far East”, 2012.12

※2 情報通信政策研究所調査部「我が国の情報通信市場の実態と情報流通量の計量に関する調査研究結果(平成 21 年度)-情報インデックスの計量-」, 平成 23 年 8 月

※3 Tony Hey, Stewart Tansley, and Kristin Tolle, *The Fourth Paradigm: Data-intensive Scientific Discovery*, (Microsoft Research 2009)

### 5. 政策上の位置付け(政策体系における位置付け, 政策上の必要性・緊急性等)

第 4 期科学技術基本計画では、「我が国が直面する重要課題への対応」において、「我が国の産業競争力の強化」として、電子デバイスや情報通信の利用、活用を支える基盤技術等、革新的な共通基盤技術に関する研究開発を推進するとともに、これらの技術の適切なオープン化戦略を促進すると掲げている。また、「科学技術の共通基盤の充実、強化」として、シミュレーションや e-サイエンス等の高度情報通信技術、数理科学等、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進すると掲げている。さらに、「国際水準の研究環境及び基盤の形成」において、「研究情報基盤の整備」として、研究情報基盤の強化に向けた取組を推進するため、研究情報全体を統合して検索、抽出することが可能な「知識インフラ」としてのシステムを構築し、展開すると掲げている。

文部科学省では、全国の大学等の研究者が、サイエンスに活用できる多分野にわたるデータ、情報、研究資料等を、オンラインにより、手軽に利用でき、最新の「データ科学」の手法を用いて、科学的あるいは社会的意義のある研究成果を得ることのできる「アカデミッククラウド環境」について、必要な議論、検討等を進めるため、研究振興局長の下に「アカデミッククラウドに関する検討会」を設置し、平成 24 年 4 月から 6 月に、「データベース等の連携」、「システム環境の構築」、「データ科学の高度化に資する研究開発」の 3 点を検討課題として議論を行い、7 月に提言「ビッグデータ時代におけるアカデミアの挑戦」において、ビッグデータに関する共通基盤技術の研究開発として、ビッグデータ処理の各段階(データ収集、蓄積・構造化、分析・処理、可視化)における基盤技術の研究開発等が必要との方向性を取りまとめた。

### 6. 他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

平成 24 年 10 月に科学技術政策担当大臣及び総合科学技術会議有識者議員による「平成 25 年度科学技術関連予算重点施策パッケージ」の選定が行われ、総務省、文部科学省、経済産業省の 3 省合同で提案した「ビッグデータによる新産業・イノベーションの創出に向けた基盤整備」が資源配分の重点化を行うべき重点施策パッケージとして特定された。この重点施策パッケージでは、3 省が連携して平成 28 年頃までの実現を目指したある一定の分野におけるビッグデータの収集・伝送、処理、利活用・分析に関する基盤技術の研究開発及び人材育成を一体的に進めることとしている。

このうち、文部科学省は「次世代 IT 基盤構築のための研究開発」の一プログラム「ビッグデータ利活用のためのシステム研究等」を、重点施策パッケージの個別施策として位置付け、異分野融合型研究拠点によるデータサイエンティスト等の人材育成や国際連携を進めるとともに、データ連携技術等の技術開発課題やアカデミッククラウド環境(大学等間でクラウド基盤を連携・共有するための環境)構築の在り方に関する検討を行うこととしている。また、科学技術振興機構はビッグデータ活用モデルの構築のため、死蔵されている膨大なデータの掘り起こしやルールの整備を行い、研究機関のデータベース連携や民間等での利活用を推進することとしている。上記施策に加え、分野を超えたビッグデータの利活用を可能にするため、本戦略目標では、中長期的な視野で次世代の課題解決に向けた共通基盤技術の高度化・体系化のための研究を行う。

また、総務省では、平成 24 年 5 月に情報通信審議会 ICT 基本戦略ボードにおいて、「ビッグデータの活用の在り方について」を取りまとめ、情報通信インフラの構築を進めているため、本戦略目標下の研究を推進する際には、当該インフラ(独立行政法人情報通信研究機構(NICT)が構築・運用するテストベッド(JGN-X))も必要に応じて活用する。

## 第 5 章 戦略目標

### 7. 科学的裏付け(国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等)

米国においては、2011年に科学技術に関する大統領諮問委員会(PCAST)が、連邦政府はビッグデータ技術への投資が少ないと結論づけたことに対応し、科学技術政策局(OSTP)が2012年3月29日にビッグデータイニシアチブに関する公告を発表した。このイニシアチブには6機関(NSF, NIH, DOD, DARPA, DOE, USGS)が総額2億ドルを投資し、データへのアクセス、体系化、知見を集める技術を改善、強化するとしている。欧州、アジアにおいても、ビッグデータに対する研究投資を実施しており、今後、激しい国際競争が予想される。具体的には、欧州では2020年までにICTにおける研究開発への公共支出を55億ユーロから110億ユーロへと倍増させ、大規模なパイロットプロジェクトを実施し、公共に利益のある分野における革新的かつ相互運用可能なソリューション(エネルギーや資源を節約するためのICT、持続可能な保険医療、電子政府、インテリジェント輸送システム等)を開発することとしている。また、中国では情報資源を共有するためのセンターを設置し、収集したデータの相互の関係付けのためにメタデータの付与や自動分類等の技術開発を行っている。さらに、韓国ではビッグデータを含む研究データの共有とデータ科学を推進するNational Scientific Data Centerを2013年から構築することとなっている。このことから、官民の役割分担と省庁の枠を越えた連携のもと、科学技術分野におけるイノベーションの推進等に向け、分野を超えたビッグデータの利活用を促進するための研究開発が急務となっている。

我が国は、各種センサー情報が発達していること、ハイパフォーマンスコンピューティング、自然言語処理等、世界的に高い研究水準を有する関連研究領域があることや、遺伝子情報等の地域単位での研究が必要な大規模データを扱う領域にも取り組んでいる。このことから、大規模データの活用において、これらの強みが幅広い分野・領域に展開することで、科学技術における共通基盤の強化や産業競争力の強化が可能な環境である。

### 8. 検討の経緯

文部科学省の研究振興局長の下に設置したアカデミッククラウドに関する検討会においては、平成24年7月4日に提言「ビッグデータ時代におけるアカデミアの挑戦」を取りまとめ、ビッグデータに関する共通基盤技術の研究開発として、ビッグデータ処理の各段階(データ収集、蓄積・構造化、分析・処理、可視化)における基盤技術の研究開発等が必要との方向性や具体的な研究開発事項について取りまとめた。

これを踏まえ、科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会情報科学技術委員会(第77回、第78回)(平成24年7月5日、8月2日)においても、様々な分野における知的活動の成果として生み出されている大量データを効果的・効率的に収集・集約し、革新的な科学的手法により情報処理を行うことにより、新たな知的価値を創造する「データ科学」が重要との共通認識のもと、ビッグデータを利活用するための共通基盤技術の研究開発が必要との見解が示された。

また、科学技術・学術審議会先端研究基盤部会(第5回)(平成24年8月7日)で取りまとめられた「数学イノベーション戦略(中間報告)」においては、ビッグデータを有効に活用するための革新的な手法や技術を開発するには、数学研究者は情報科学分野の研究者や各アプリケーション側の研究者と積極的に連携を図るとともに、数学研究者の多様な知見とポテンシャルを最大限活用し、ビッグデータの有効活用において本質や構造を見いだすための共通基盤的技術の構築に向けて取り組むことが重要と述べられている。

本戦略目標は、これらの検討の結果を踏まえて作成したものである。

### 9. その他

本戦略目標を推進するに当たっては、情報科学・数理学分野とビッグデータの利活用が有効な様々な研究分野の融合により、ビッグデータに関係する研究者に流動的なネットワークを生み出し、新たな人材育成スキームや、イノベーション創出サイクル(常にイノベーションを創出し続ける環境)の構築も目指すことを期待する。

## 5.8 環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築

### 1. 戦略目標名

環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築

### 2. 達成目標

「分子技術(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目的とする機能を創出し、応用に供するための一連の技術)」の構築を目指し、蓄電デバイス、有機薄膜太陽電池等の分子を用いた超低消費電力・超軽量デバイスの実現や、ドラッグデリバリーシステム、機能性医療材料などの革新的な治療方法の確立等の基盤技術となる以下の技術体系を構築する。

- 「設計・創成の分子技術(精密合成技術と理論・計算科学との協働により、新規機能性物質を自在に設計・創成する技術)」に係る技術体系の構築
- 「形状・構造制御の分子技術(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技術)」に係る技術体系の構築

### 3. 将来実現しうる重要課題の達成ビジョン

有機ELディスプレイに代表されるように、既に今日様々な部品や機器が分子素材である“ソフトマテリアル”に移行しつつある。これは、低環境負荷、資源制約への対応、そして、高い生体親和性といった人間社会全体の課題に対して本質的な解決策をソフトマテリアル、すなわち、それを実現する「分子技術」が与えることを示唆するものである。

本戦略目標下において「2. 達成目標」に記載した研究成果が得られることで、分子性物質としての機能設計が可能となり、その結果として幅広い社会ニーズの課題解決に適用することが可能となる。関連する学問分野の研究者と産業界との協力体制を構築することにより、第4期科学技術基本計画に掲げられたグリーンイノベーション、ライフイノベーションの推進に向け、例えば、下記の成果が事業終了後5年程度で得られることを目指す。

#### ●『ソフトマテリアルで構成された電子機器』

既存の半導体や金属に置き換わり、導電性制御が可能となる有機材料が電子機器の素材として使用され、低環境負荷の超低消費電力のコンピュータや超軽量携帯情報端末が創出される。

#### ●『超低消費電力かつ資源再利用に対応した太陽電池フィルム』

分子材料を用いた素材原料や製造プロセスの転換による超低コストかつ低環境負荷の太陽電池が創出される。

#### ●『ドラッグデリバリーシステム等を活用した治療』

感知機能や有効成分の放出を調整できる機能を備えた高度な薬物送達(ドラッグデリバリーシステム)の開発や、組織や臓器の再生に必要な機能性医療材料の3次元での構造化などにより、安全で有効性の高い治療が実現する。

上記の他、脱化石資源、高密度二次電池、高度環境モニタリング、低コスト造水・水浄化といった分野での実用化が考えられる。

### 4. 具体的内容

(背景)分子科学から分子“技術”へ！

近年、例えば、低環境負荷の発電技術として注目されている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、分子の構造や形状をコンピュータ上で設計することにより、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。

このような成果の背景には、分子科学という基礎的学問が存在する。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、コンピュータの急速な性能向上や測定・

## 第 5 章 戦略目標

解析技術等の著しい進展に伴い、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った研究開発事例が見出されるようになってきた。

これらの状況を踏まえ、本戦略目標では、「分子技術」を開発することによって、環境・エネルギー技術や情報通信技術、医療技術等を下支えする一連の材料創製技術に対し、抜本的なブレークスルーをもたらすことを目指すものである。

(研究内容) ライフイノベーション、グリーンイノベーションに共通する基盤技術の確立へ！

本戦略目標では、グリーンイノベーション、ライフイノベーションに関わる革新的成果を創出するために、個別応用課題の研究開発とは“別”に様々な分野への展開が可能な「分子技術」を確固たる土台として築いておくことで、個別施策の研究開発や異分野融合が加速されることを目指す。「分子技術」の研究開発においては、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、分野融合的なアプローチにより、それを克服する体系を構築することが重要である。本戦略目標では、「分子技術」を、分野横断的な「設計・創成の分子技術」、「形状・構造制御の分子技術」、「変換・プロセスの分子技術」と、具体的な応用分野を見据えた「電子状態制御の分子技術」、「集合体・複合体制御の分子技術」、「輸送・移動制御の分子技術」からなる6つの要素技術からなるものと捉え、特に、最も根本的な「設計・創成の分子技術」と、「形状・構造制御の分子技術」に重点を置くこととする。以下、具体的な研究開発課題の例を挙げる。

### ●設計・創成の分子技術

設計・創成の分子技術とは、新規機能性物質を自在に創成することを目指す技術である。すなわち、従来型の勘と経験に大きく頼る手法から踏み出し、合成と理論解析が密接に協力し、目的とする機能を持つ物質を思うがままに設計し、合成する指導原理を与える技術である。

(研究開発課題例)

- ー 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
- ー 分子構造の予測を可能にする分子デザイン手法の開拓
- ー 機能設計・予測に基づく精密合成法の開発
- ー 分子性物質の高純度精製法の開発

### ●形状・構造制御の分子技術

形状・構造制御の分子技術とは、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。

(研究開発課題例)

- ー 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
- ー ナノからマクロ構造への規模拡大技術
- ー マクロ構造を持つ材料における物理的諸現象の観測・解析技術
- ー 計算機シミュレーションによるマクロレベルの構造・機能の設計・解析

## 5. 政策上の位置付け(政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等)

「分子技術」によって創出されるソフトマテリアルは、21世紀の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、国の基盤技術として確固たるものとするのが、本戦略目標の最大の目標である。「分子技術」が生み出す高付加価値産業は、我が国の経済発展を支えるとともに、世界の環境・エネルギー問題、安全・安心、医療・健康問題等の解決に大いに寄与することが期待される。

「第4期科学技術基本計画」(平成23年8月19日閣議決定)では、産業競争力の強化に向けた共通基盤の強化のため、「付加価値率や市場占有率が高く、今後の成長が見込まれ、我が国が国際競争力のある技術を数多く有している先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術、高機能電子デバイスや情報通信の利用、活用を支える基盤技術など、革新的な共通基盤技術に関する研究開発を推進するとともに、これらの技術の適切なオープン化戦略を促進する」こととされ、また、領域横断的な科学技術の強化に向け、「先端計測及び解析技術等の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、シミュレーションやe-サイエンス等の高度情報通信技術、数理科学、システム科学技術など、複数

## 第 5 章 戦略目標

領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進することとされている。さらに、「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策について〈中間取りまとめ〉」（平成 23 年 7 月 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会）においては、「国際的な優位性を保持するためには、革新的な技術の開発が不可欠であることから、社会的課題を設定する際に把握可能な技術のみに重点化するのではなく、中長期的観点から、潜在的可能性をもつ技術の創出に向けた研究開発等の取組も推進すべきである」とされ、課題解決に向けた重点研究開発課題である「物質材料設計及び制御技術」の一つに分子技術が取り上げられている。

### 6. 他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

これまで、「太陽電池」や「蓄電池」、「創薬」といった出口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。しかしながら本戦略目標では、様々な分野において共通してボトルネックとなっている技術的課題を、「分子技術」という横断的技術概念で捉え直し、多様な分野の研究者が協力して研究に取り組むことを意図している。「分子技術」は、我が国がこれまで長年に渡って積み上げてきた基礎科学の成果を発展的に再編し、これまでにはない新たな技術体系を構築するものである。「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、数学の基礎分野のみならず、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求められるとともに、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必要となるものである。

また、平成 24 年度に設定する戦略目標「環境、エネルギー、医療等の課題対応に向けた触媒による先導的な物質変換技術の創出」において、物質変換のための新しい触媒開発を開始することとしているが、当該技術は、「分子技術」を確立する上でも重要な要素技術である「変換・プロセスの分子技術」を補完するものとなり得ることから、必要な連携を図ることが求められる。

### 7. 科学的裏付け(国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等)

本戦略目標は、我が国が環境・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。我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、なかでも本戦略目標に掲げる「分子技術」については強さを保持している。例えば、ディスプレイ製品の中に用いられる分子性物質の多くの市場占有率は、日本が国際的にも圧倒的である。この新しい技術分野の基礎を学問的に深化させて、より革新性を高めるための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、我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。

### 8. 検討の経緯

科学技術振興機構 研究開発戦略センター(CRDS)において、平成 20 年 7 月に「物質・材料分野俯瞰ワークショップ」が開催され、ナノテクの成果、融合の効果、今後の課題について、議論が交わされ、「分子技術」という概念を確立することが提案された。平成 21 年 12 月には、「分子技術」が今後我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ともに、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、「科学技術未来戦略ワークショップ『分子技術』」が開催された。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、課題等について更なる検討が行われ、平成 22 年 3 月に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～」がとりまとめられた。

以上の議論も踏まえ、文部科学省 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会が平成 23 年 7 月に中間とりまとめを行った「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策について」において、課題解決に向けた重点研究開発課題である「物質材料設計及び制御技術」の一つに分子技術が取り上げられた。

本戦略目標は、これらの検討の結果を踏まえて作成したものである。

### 9. 留意点

「分子技術」の開発には、異分野の研究者が積極的に参入し、実質的に協働するための環境が必要である。また、本戦略目標の成果を「分子技術」の構築に向けて発展させていくため「分子技術」を前競争領域における共通基盤技術として捉え、つくばイノベーションアリーナ等、産学官協働のための「場」を積極的に活用することが重要である。