戦略目標一覧(第4期科学技術基本計画) 平成24年度

資料 6-5 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 (第41回) H24.7.11

| グリーンイノベーション | 重要課題、共通基盤 | ライフイノベーション | |
|---|--|---|--|
| 再生可能エネルギーをはじめとした多様なエネルギーの需給の最適化を可能とする、分散協調型エネルギー管理システム構築のための理論、数理モデル及び基盤技術の創出 | 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 | 先制医療や個々人にとって最適な診断・治療 法の実現に向けた生体における動的恒常性の 維持・変容機構の統合的解明と複雑な生体反 応を理解・制御するための技術の創出 | |
| | 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 | 多様な疾病の新治療・予防法開発、食品安全性向上、環境改善等の産業利用に資する次世代構造生命科学による生命反応・相互作用分子機構の解明と予測をする技術の創出 | |

平成23年度

| グリーンイノベーション | 重要課題、共通基盤 | ライフイノベーション |
|---|-----------|---|
| 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現象の解明や 高機能界面創成等の基盤技術の創出 | | 疾患の予防・診断・治療や再生医療の実現等 に向けたエピゲノム比較による疾患解析や幹細 胞の分化機構の解明等の基盤技術の創出 |
| 二酸化炭素の効率的資源化の実現の ための植物光合成機能やバイオマスの 利活用技術等の基盤技術の創出 | | 生命現象の統合的理解や安全で有効性の 高い治療の実現等に向けたin silico/in vitro での細胞動態の再現化による細胞と細胞集団 を自在に操る技術体系の創出 |
| 海洋資源等の持続可能な利用に必要な 海洋生物多様性の保全・再生のための 高効率な海洋生態系の把握やモデルを用いた海 洋生物の変動予測等に向けた基盤技術の創出 | | |

戦略目標一覧(第3期科学技術基本計画)

| | 環境 | ナノテクノロジー・ 材料 | 情報通信 | ライフサイエンス | その他 |
|----|---|--|--|--|---|
| | 超高靱性等の等 制御等のナノス | ー材料の実用化及び超高保磁力・ 新規目的機能を目指した原子配列 トケール物質構造制御技術による 新的機能の創出 | メニーコアをはじめとした超並列 計算環境に必要となるシステム 制御等のための基盤的ソフトウェア 技術の創出 | 炎症の慢性化機構の解明に 基づく、がん・動脈硬化性疾患・ 自己免疫疾患等の予防・診断・ 治療等の医療基盤技術の創出 | |
| 22 | 水生・海洋藻類等による石油代替 等のパイオエネルギー創成及び エネルギー生産効率向上のための ゲノム解析技術・機能改変技術等を 用いた成長速度制御や代謝経路 構築等の基盤技術の創出 | | | | |
| 21 | 気候変動等により深刻化する 水問題を緩和し持続可能な水利用 を実現する革新的技術の創出 | | 人間と調和する情報環境を実現す る基盤技術の創出 | 神経細胞ネットワークの形成・動作の制御機構の解明 | |
| | 異分野融合による自然光エネルギー変 | 合による自然光エネルギー変換材料及び利用基盤技術の創出 | | | |
| | 持続可能な社会に向けた温暖化 抑制に関する革新的技術の創出 | 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 | 多様で大規模な情報から『知識』を 生産・活用するための基盤技術の 創出 | 運動・判断の脳内情報を利用する ための革新的要素技術の創出 | |
| 20 | | 先端科学のイノベーションへの展開 | | 細胞リプログラミングに立脚した 幹細胞作製・制御による革新的医 療基盤技術の創出 | |
| | | プロセスインテグレーションによる次世 創製 | 代ナノシステムの | 花粉症をはじめとするアレルギー性 疾患・自己免疫疾患等を克服する 免疫制御療法の開発 | |
| 19 | | 新原理・新機能・新構造デバイス実現の ナノプロセス開発 | | 精神・神経疾患の診断・治療法開発 に向けた高次脳機能解明によるイ ノベーション創出 | 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 |
| | | | 高信頼・高安全を保証する大規模 集積システムの基盤技術の構築 | | ブレークスルーの探索 (幅広い科学技術の研究 分野との協働を軸として) |

再生可能エネルギーをはじめとした多様なエネルギーの需給の最適化を可能とする、分散協調型エネルギー管理システム構築のための理論、数理モデル及び基盤技術の創出

概要

- ○再生可能エネルギーの本格的な系統導入と新しい分散型エネルギーシステムの構築が希求されている。
- 〇分散型EMSの予測に基づく連携協調によるエネルギー需給管理システムの理論構築と基礎研究(制御方式、評価方式等)により、異なる視点(電力品質、コスト、効率、CO2削減量など)での評価の有効性を担保し、様々な規模や地域性に基づく制約に対応可能なシステムの基本モデル手法の創出を目標とする。

具体的内容

- ①分散協調型エネルギー管理システムの安定化、最適化のため の理論及び基盤技術に関する研究
- 〇最先端の再生可能エネルギー発電量予測シミュレーションや予測推定理 論を組み込んだ分散協調型の予測制御研究
- 〇停電が波及しにくく、自己修復を可能にするための電力ネットワークのトポロジー制御研究
- ○分散協調型エネルギー管理システムに最適化手法を応用するための研究。
- ②人間行動を考慮したエネルギー消費モデルの構築と、それに 基づくエネルギー需給バランスの最適化メカニズムの設計
- ○情報収集と制御が可能な知能化した次世代システムを利用した需要誘導 による分散型エネルギーシステム全体の最適化方式の研究
- 〇メカニズムデザイン理論やゲーム理論等を取り入れた消費電力・供給電力の安定かつ最適な配分決定のための動的な電力価格決定メカニズム研究
- ③衛星データや地域気象観測、地理情報、過去の需給実績から 学習して予測性能を向上させる手法等により、精度の高い需要 予測と再生可能エネルギー発電予測を可能にする研究
- ④計算機シミュレーションや模擬シミュレータの開発及びそれを用いた上記理論やシステム技術の統合分析・評価研究



先制医療や個々人にとって最適な診断・治療法の実現に向けた生体における動的恒常性の維持・変容機構の統合的解明と複雑な生体反応を理解・制御するための技術の創出

┃背景・概要

- ○生体内には、外界からの様々な刺激や外部ストレスに適応応答を起こし、内部環境である体内を、安定した状態(恒常性)に維持する機構が存在。糖尿病等の生活習慣病や老いは、恒常性維持機構の変容ととらえることができる。
- ○近年の<u>生物学上の知見の蓄積や、バイオインフォマティクスの進展、スーパーコンピュータの性能向上等により、個別の臓器に焦点を当てた研究から、</u>神経系、内分泌、免疫系、脈管系等の構造ネットワークと電気信号や種々の伝達物質を介した機能ネットワークの時空間的変化を捉えて、恒常性維持機構の解明に迫る研究が可能となりつつある。
- ○学術コミュニティでも、恒常性維持機構の統合的な理解と制御を目指す研究分野の振興について、「多臓器円環のダイナミクス」と題 して学術シンポジウムを開催するなど、新しい学術分野創出の動きが出てきている。
- 〇生体レベルでの恒常性維持・変容機構を解明することにより、<u>先制医療(早期医療介入)の実現、近年有病者が急速に増加している</u> 糖尿病等の生活習慣病等の革新的な診断・治療法の開発などの政策課題への解決への貢献が期待される。

達成目標

- 〇多臓器間ネットワークや生体レベルでの恒常性維持機構 の解明と解析技術の創出
- 〇発達から老化までの時間軸を考慮した恒常性維持機構の ダイナミクス解明と解析技術の創出
- 〇恒常性維持機構破綻の理解による疾患メカニズムの解明 **例** 、と治療法、予防・早期診断技術への応用

- ・脂肪組織や肝臓等からの求心性神経を介した多臓器での代謝活性 の調節機構の解明
- →レプチン抵抗性による代謝活性低下が原因の慢性肥満等の予防、 治療法の開発
- ・血管系疾患の治療と認知症抑制の関係に関するコホート研究結果 を踏まえた、認知症発症における血管・免疫系細胞の関連解明
- →時間軸を考慮した、若年からの神経変性疾患の予防法の確立

政策的課題への対応

- ○平成24年度科学技術重要施策アクションプラン(平成23 年7月科学技術政策担当大臣 総合科学技術会議有識者 議員)等に掲げられた政策課題の解決への貢献
- ・先制医療(早期医療介入)の実現による発症率の低下
- 生活習慣病等の革新的な診断・治療法の 開発による治癒率の向上 健康長寿社会

システム改革に向けて

- 〇総合医学を実現するためのシステム改革に向けて、以下 の課題の解決の必要性が指摘されている。
 - ・コアファシリティとしての研究支援の必要性
 - ・新領域・融合領域の確立を目指した大学における 医学教育のあり方、医学研究体制の見直し
 - 長期的な人材育成を促すための新領域・融合領域における新しい評価制度の確立等

多様な疾病の新治療・予防法開発、食品安全性向上、環境改善等の産業利用に資する次世代構造生命科学による生命反応・相互作用分子機構の解明と予測をする技術の創出

背景•意義

- ○これまでに我が国において構造生命科学研究が推進され、すべての生命現象の源である分子認識機構を解明するとともに、<u>国のプロジェクト</u> 等で整備された基盤や技術が格段に進歩・整備
- これまでのX線を中心とした計測手法では、困難であった<u>脂質、核酸、タンパク質など生体高分子のダイナミックな相互作用</u>を、上記の 基盤や先端技術等を最大限に活用し原子レベルから細胞レベルまで階層構造で捉え、分子認識機構を解明・予測
- ○また、<u>糖鎖修飾、リン酸化、メチル化、アセチル化、ユビキチン化など、生命分子の翻訳後修飾及び化合物によって生体高分子の機能が</u> <u>ダイナミックに変化することが近年明らかになってきており、生命現象に与える影響</u>を捉え、その制御機構等を解明

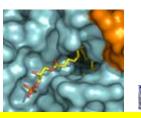
具体的な研究例と社会への応用

- ○ヒト等の生体高分子の修飾及び生体内外の化合物によるダイナ ミックな原子レベルの変化等を捉え、分子認識機構の解明と予 測をするとともに、生体高分子の制御機構を解明すること等に より、新規治療法、予防法の開発及び医・薬・工学等に貢献。
- ○食品安全性向上、環境改善等に関与する動植物等の生体高分子の修飾及び生体内外の化合物によるダイナミックな原子レベルの変化等を捉え、分子認識機構の解明と予測をするとともに、生体高分子の制御機構を解明すること等により、食品・環境等の産業利用等への波及効果にも期待。

○生活習慣病等の新規治療法、予防法の開発

〇安全な食品を生産するための研究開発

○環境に配慮した植物、バイオ燃料の開発





食品の安全・安定的な生産

健康長寿社会

これまで以上に高効率に分子設計・解析が可能に

世界の次世代生命科学研究の現状

創薬等を目指した次世代生命科学研究の取組が活発化

米国: PSI: biology

欧州: Structural Genomic Consortium SPINE-2.

E-MeP, EDICT

中国:973プログラム,上海光源

韓国:5-7-7イニシアチブ(Risk Science)

台湾:NSRRC

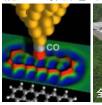
次世代構造生命科学研究とは

先端的ライフサイエンス領域と構造生物学の融合により、最先端の構造解析手法をシームレスに繋げ、原子レベルから細胞・組織レベルまでの階層構造を時間的空間的に解明することで生命反応・相互作用を構造から予測するための普遍的原理を導出し、それらを駆使しながら生命科学上重要な課題の解決に取り組むことで、イノベーションの創出に繋げる研究

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

近年、3つの技術進展により 一気に「科学」から「技術」レベルに!!

【計測】数個単位での分子像 計測技術の進展! XFELは ピコ・フェムト秒かつ原子分解 やハイブリッド化技 能での解析を可能とする!





IBM, L.Gross et al., Sci- X線自由電子レーザー ence 325, 1110(2009) 施設SACLA, 8 GeV

【創成】分子性物質 の超高純度化技術 術が進展!



分子科学研究所 平本昌宏 教授

【計算】スーパーコン ピューターの進展に伴 い全電子量子化学 計算が可能に!



分子科学研究所 永瀬茂 教授

今なぜ「分子技術」か?

- ●エレクトロニクス産業が抱いている 微細化限界やエネルギー多消費等の 本質的課題をソフトマテリアルで解決! →事実、有機ELディスプレイなど、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。
- ●化学産業が排出するCO₂量は、鉄 鋼産業に次いで2番目。しかも製造業 全体の約20%。化学産業の産業廃棄 物は紙・パルプ産業、鉄鋼産業につい て3番目。しかも製造業全体の12%! →高CO。排出の製造プロセスの転換や低エネル ギー化を分子技術によって早急に実現する必要。

分子技術が創る

未来像

『ソフトマテリアルで構成された 様々な雷子機器』

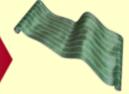
既存の半導体や金属に置き換わり、導電性制 御が可能となる有機材料が電子機器の素材とし て使用され、低環境負荷の超低消費電力のコン ピュータや超軽量携帯情報端末が創出される。



フレキシブル ティスプレイ

『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』

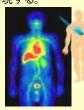
分子材料を用いた素材原料や製造プロセスの 転換による超低コストかつ低環境負荷の太陽電池 が創出される。



有機薄膜 太陽雷池等

"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。





診断•治療技術 創薬、DDS

分子科学

化学反応や分子間の相 万作用の解明のために 理論的:実験的研究

→依然、我が国が世界 をリードする分野

分子技術にて多分野 融合が必要な理由

産業利用のためには高信頼性や耐久 年数といった工学的な課題がある。 これには工学や応用物理のセンス、 そして量産や市場化をねらう医学や エレクトロニクスといった応用先の 知識・技術が必要不可欠である。

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。

本戦略目標における達成目標

- ▶「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

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

背景

- ○2001年の野依良治氏、2010年の鈴木章氏及び根岸英一氏のノーベル化学賞受賞に見られるように、<u>触媒科学は我が国に強みのある研究</u>分野。
- ○触媒は、医薬品や機能性材料等の<u>幅広い分野における「低コスト、</u> 低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくり」を実現するために 不可欠な基盤技術。

達成目標·具体的内容

- ①有用物質への変換・活用のための二酸化炭素還元法の創出
- 〇二酸化炭素の還元を従来より効率的に実施できる反応
- 〇還元された二酸化炭素を有用なC1物質等に変換する反応 等
- ②高収率、高効率、高選択、経済的、安全に不斉炭素-炭素結合等を 直截的に生成する触媒的物質変換技術の創出
- ○工業的な利用につながる選択的な不斉炭素-炭素結合生成反応 等
- ③π電子系分子の化学合成及びデバイスにつながる新機能創成手法 の創出
- ○小分子から優れた機能を有するπ電子系分子の化学合成を可能とする反応
- Οπ電子系分子に官能基導入を行う等による新機能物質の創成 等

上記の目標達成に向けた研究を戦略的に推進するべく、<u>触媒反応機構の解明のための原子・分子構造や電子状態の変化解析及び計算化学等による理論の構築も一体的に行う。</u>



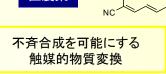
CO2の有効活用のための 触媒的物質変換

・CO2の光を用いた効率的還元

M-cat.

C1原料等

・CO2の有用なC1物質等への変換

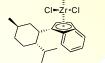


・不斉遷移金属触媒の創出

医農薬

- ·選択的な不斉C-C結合生成反応
- •高触媒回転率、高純度、高収量化





усоон.

(–)-(NMI)₂ZrCl₂

優れた光・電子特性を持つ 有機材料創出のための触媒 的物質変換



CH₃OH

C1 compounds

- ・小分子からの芳香環骨格の形成・結合
- ・新機能物質の創成、デバイスとしての評価

有機エレクトロニクス材料

触媒反応機構の解明のための 原子・分子構造や電子状態の変化解析及び理論の構築



将来の重要課題への貢献

- ○二酸化炭素の再利用や次世代の有機太陽電池等に活用しうる機能性物質の創成による資源・エネルギー問題解決への貢献
- ○環境負荷の低い製造プロセスの実現による持続可能な社会の実現への貢献
- ○複雑な構造を持つ医薬品や農薬等の工業的な合成を可能にすることによる人々の健康等への貢献

等