

公募研究に関する Q&A

新学術領域「分子ロボティクス」の公募研究について、Q&A 形式で追加情報をまとめました。下記をご参考にぜひご応募ください。

Q 実験的研究と理論的研究をどう区別するのですか？

A 申請書の予算規模で判断します。(年間 150 万円まで×2 年→理論的研究, 年間 300 万円まで×2 年→実験的研究)。計算機シミュレーションなどでも予算が必要であれば、実験的研究として結構です。項目はどれに出していただいても構いません。

Q A01「分子ロボットの感覚」について、テーマ例やキーワードはありますか？

A 実験的研究のテーマ例としては、

- ・光、pH、温度、小分子、生体高分子等の入力シグナルを検知し、下流の情報処理・アクチュエータに活用されるシグナルや分子に変換するシステムの設計と構築

- ・光、pH、温度、小分子、生体高分子等の入力シグナルを検知するための人工レセプターの設計と構築

- ・外部から制御可能なチャネルの構築と人工脂質 2 重膜への融合

- ・脂質 2 重膜の内外で情報をやり取りできる膜貫通型の分子の設計と合成

また、理論的研究の例としては、

- ・少数分子からなる入力シグナルからノイズを除去し、目的のシグナルを増幅するための理論、シミュレーション研究

などがあります。ただし、これらに限るわけではありません。

また、関連するキーワードとしては、

DNA, RNA, 核酸構造体、蛋白質、人工チャネル、人工レセプター、ナノポア、チャネルタンパク質、少数分子検出、MEMS、DDS、人工脂質膜、物理化学（高分子反応、マルチスケール系）、自律分散、非線形科学（少数分子化学反応、形式言語理論等を用いた化学反応の計算モデルなど）、ナチュラルコンピューティング（生物メディアを用いた計算、生体情報の計測と制御を用いた計算）

などがあげられます。

Q A02「分子ロボットの知能」については、どのような方向性でしょうか？

A 次のようなテーマに興味があります。実験的研究、理論的研究どちらでも結構です。ただし、これらに限りません。

- ・基本演算(注 1)を行うための新規分子デバイスの開発、および分子反応をカスケード化したシステムの構築

- ・分子デバイス・反応(注 2)を用いた新しい分子システム(注 3)の提案

- ・自律分散システム理論(注 4)を用いた分子システムの解析
- ・分子デバイス・反応を用いた分子システムのための新しい数理解析・制御・数値シミュレーション手法(注 5)の提案
- ・少数分子からなる分子システム(注 6)を解析するための新しい数理解析手法・制御・数値シミュレーション手法(注 5)の提案

注 1: 論理演算, オートマトンの状態遷移など

注 2: 鞭打ち PCR (Whiplash PCR),
 光応答性分子による結合・解離・変形等の反応
 核酸配列の鎖置換(Strand Displacement)反応,
 酵素による核酸の配列特異的な切断・結合・修飾,
 DNAzyme, アプタマー, リボスイッチ,
 人工核酸, 自律振動反応, 刺激応答性ソフトマテリアルなど

注 3: 新しい分子デバイスを用いた回路,
 高速に動作する回路
 少数分子で動作する回路,
 演算素子が再利用できる回路,
 光信号系列に応答して構造や機能を変化させる知的分子システム,
 学習機能など高度な知能を備えた分子システム,
 進化する分子システム, 進化による反応回路の最適化,
 自己安定的な分子システム,
 自己組織化する知的分子システムなど

注 4: Augluin らの population protocol など

注 5: 計算能力の解析, 制御性能の解析, 確率的振舞いの解析,
 確率的な制御, 大規模な分子システムの多分解能性に着目した制御,
 化学反応モデルのパラメータ推定,
 精度保証計算, HPC 技術を用いた数値シミュレーションなど

注 6: 脂質膜内で起こるマイクロスケールの分子反応など

Q A03 「分子ロボットのシステム化技術」では, 何を狙いとしているのでしょうか?

A この項目は C01 アメーバ班と対応しており, 最終的な目標は C01 班の計画研究に書いた通りですが, 1-2 年の短期的な目標は,

「リポソームのなかに分子モータを実装し, それを外部からの刺激により駆動することで, リポソームを変形させること」

です. 分子モータとしては, アクチンフィラメントや微小管のような生体分子モータの形成やすべり運動, 人工的な高分子の重合・脱重合反応などが考えられます. また, 外部か

らの刺激としては、光、分子、pH、DNA断片などが考えられます。また、これらの分子モーターや分子モーターを制御する反応系をリボソームに埋め込むための技術も重要な課題と考えています。これらに関するシミュレーション研究などにも興味があります。

特に応募を期待しているのは、DNAとDNA以外の分子をつなぐクロスリンカーの開発です。DNAとペプチド、DNAとタンパク、DNAと高分子など、つなぐ技術とつなぐことにより実現する機能に関する提案を期待しています。

Q A04 「分子ロボットの制御」ではどんなことをするのでしょうか？

A この項目はD01 スライム班と対応しており、最終的な目標はD01 班の計画研究に書いた通りですが、1-2年の短期的な目標は、

「反応拡散場とそれに連動した何らかの運動を実装すること」

です。具体的な反応場としては、

- ・DNAのみ、あるいはDNAと高分子で構成されるゲルあるいはゾル
- ・BZゲルなどのように、伸縮機能をもつ高分子アクチュエータでケミカルな制御が可能なもの

を考えています。

前者の場合、実装したい運動は、ゲル化領域の移動です。キャピラリーの中などに1次元のゾル空間を用意して、そのなかをゲル化部分が移動していく。ちょうど導火線（ゾル空間）を火（ゲル化領域）がつたわっていくようなイメージです。後者の場合、高分子アクチュエータの中に化学反応の波を起こし、それに連動して高分子の収縮を起こさせる系とその制御がテーマになります。

これらに関連して、ゲルの異方性化制御、各種の反応拡散場の実装・解析・シミュレーション・設計、ソフトマテリアルのシミュレーション、粗視化モデル、新しい分子アクチュエータ材料、DNA分子計算回路によるアクチュエータの駆動などのテーマを募集します。