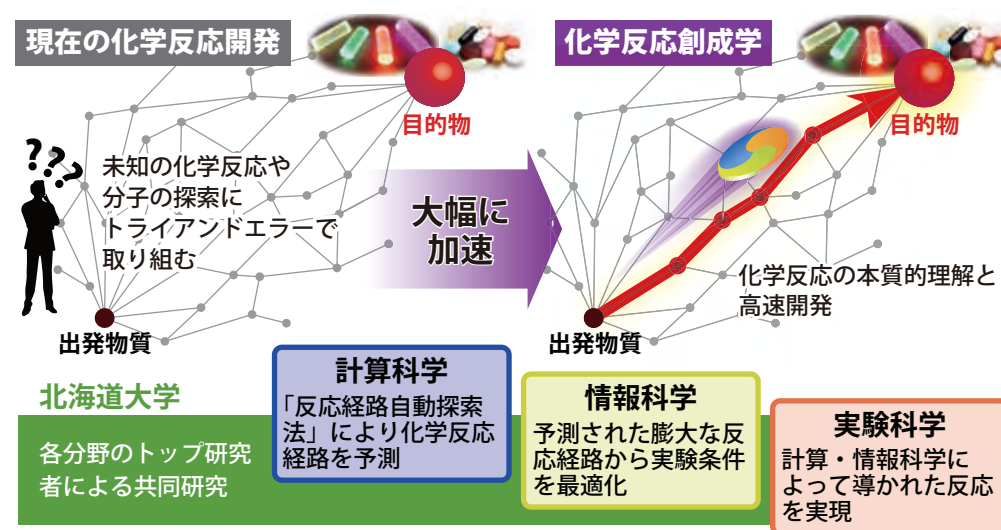


ICReDD における研究

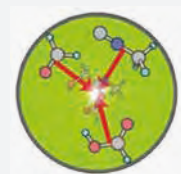
化学反応の高度な設計と高速開発の実現



新しい化学反応の開発は実験的なトライアンドエラーに頼っており、一つの反応を開発するためには通常数百数千回もの実験を繰り返すため膨大な時間を使い非効率でした。本拠点では、量子化学計算に基づく反応経路自動探索により化学反応経路ネットワークを算出し、情報科学によって実験的に検討する意味のある情報を抽出し実験条件を絞り込みます。このため「決め打ち」的な実験が可能となり、化学反応の開発速度を大幅に向上させます。

実験科学で得たデータを、情報科学を通じて計算科学へとフィードバックし、三分野が一体となって化学反応の高度な設計と迅速開発を実現します。本拠点はこのように、三分野の融合により新しい化学反応の合理的かつ効率的な開発を可能にする学問分野、「化学反応創成学」の確立を目指します。

「化学反応創成学」における融合的な研究は、農業および環境化学、創薬や材料化学、医療技術、エネルギーおよび資源管理へ応用することにより、高付加価値の化学物質を有する化学反応の開発につながるはずです。研究対象となる反応や分子は、幅広い研究コミュニティや多くの企業との協議を通して、社会への影響を考慮して選択されています。



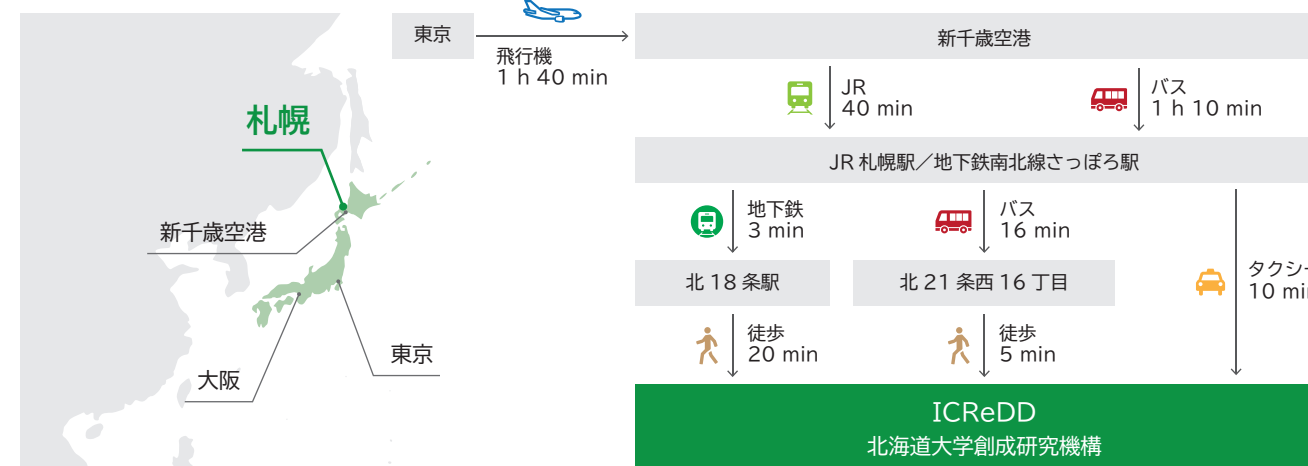
The AFIR method
人工力誘起反応法

前田理拠点長により開発された、反応経路自動探索を可能とする唯一の方法

*Maeda, S.; Morokuma, K. *J. Chem. Phys.* 2010, **132**, 241102.



Access



Contact information

北海道大学化学反応創成研究拠点
(ICReDD / アイクレッド)
〒001-0021
北海道札幌市北区北 21 条西 10 丁目

[Website] <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja>
[Facebook] <https://www.facebook.com/ICReDDconnect>



WPIについて

世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI) は文部科学省の事業として 2007 年に開始されました。第一線の研究者が世界から多数集まってくるような、優れた研究環境ときわめて高い研究水準を誇る、「世界から目に見える研究拠点」の形成を目指しています。ICReDD は WPI の新たな研究拠点として 2018 年 10 月に設立されました。



社会を変えるような
新しい化学反応の高速開発を目指して



化学反応創成研究拠点（ICReDD）とは

化学反応創成研究拠点（ICReDD／アイクレッド）では、計算科学、情報科学、実験科学の3分野を融合させることにより、新しい化学反応をより深く理解し効率的に開発することを目指しています。



拠点長 前田 理からのメッセージ

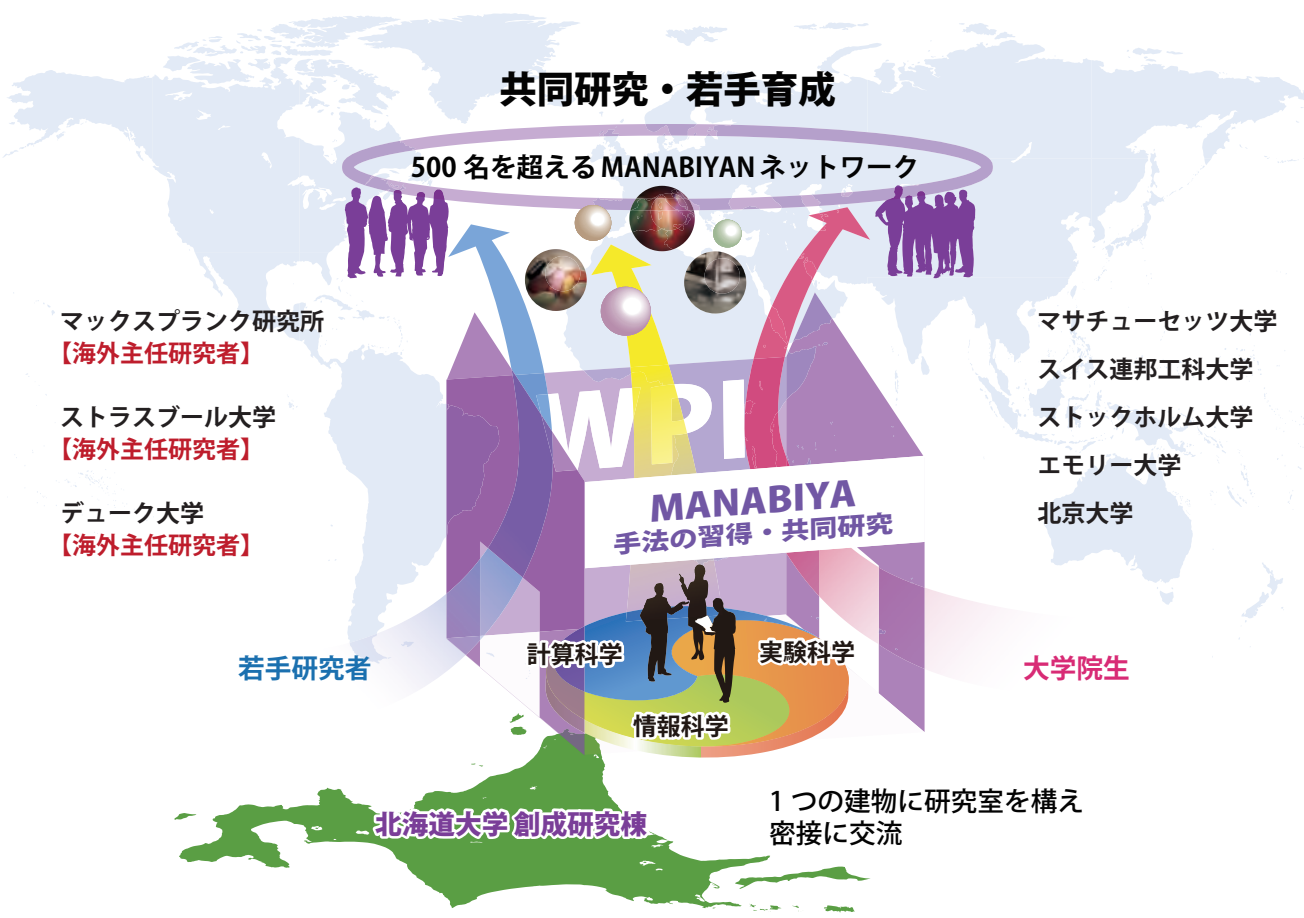
人類は、様々な化学反応の発見を積み重ねその生活を豊かにしてきました。一方で、新しい反応の開発は実験的なトライアンドエラーに頼っており、真に革新的な化学反応が発見されるまでには数十年単位の時間を要しています。このようなトライアンドエラーに立脚した反応開発では、エネルギーや資源の枯渇、汚染といった、大きな課題の解決には時間が足りません。私たちが確立しようとしている「化学反応創成学」は、計算科学・情報科学・実験科学の融合によって反応開発の進め方を一新し、現在および将来の人类的課題を解決します。また私たちは、世界中に開かれた拠点を形成し、その効果を全世界へ波及させることにより、豊かな未来社会の創造に貢献します。



拠点長 前田 理

ICReDD の特徴

化学反応創成学の構築と MANABIYA システムによる国際連携



- 1 豊かで持続可能な人類の未来に欠かせない新しい化学反応の開発の効率化を加速するために、計算科学・情報科学・実験科学を統合した新しい学問領域「化学反応創成学」を確立します。
- 2 国際共同研究環境整備と世界スケールの高度人材育成の戦略的仕組み「MANABIYA（学び舎）システム」を構築し、国内外の研究協力拠点との連携体制を確立します。10年後には、世界中のトップ研究者から若手研究者までが所属する数百人が参画する巨大ネットワークが完成し、新分野の更なる発展を支えます。

MANABIYA（学び舎）システム

国内外の連携研究拠点の若手研究者や学生が ICReDD に3か月程度滞在し、共同研究を通して新しい化学反応を開発する手法の習得を目指します。その後、習得した手法を将来に渡って使い広めていく、頭脳循環型社会の確立を目指します。10年後には、世界中の多くの研究者が所属する巨大な研究者ネットワークとなり、この新たな化学反応創成学をさらに発展させることになります。

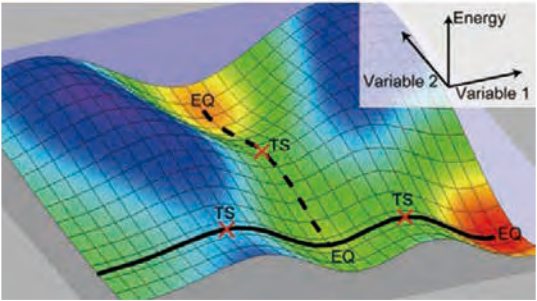
- 3 新大学院「化学反応創成学院」の設立を軸に大学の組織改革を実行します。

主任研究者

計算科学

【拠点長】前田 理

人工力誘起反応法を用いた反応経路探索



情報科学

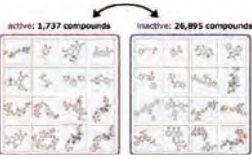
有村 博紀

小分子から中サイズ分子までの配列、選択と高速探索



瀧川 一学

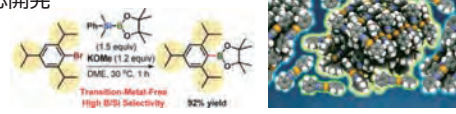
反応ネットワークモデリングとデータ駆動予測



実験科学

【副拠点長】伊藤 肇

小分子と多様な元素を用いた新規反応開発



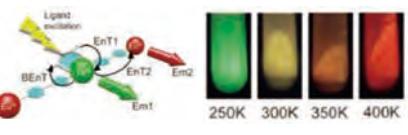
ベンジャミン・リスト

有機触媒を用いた新規反応開発



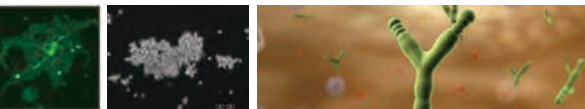
長谷川 靖哉

高輝度かつ高耐久性を有する発光性材料



田中 伸哉

新規材料による細胞制御と次世代新規診断法開発



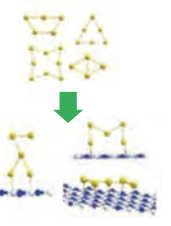
マイケル・ルビンスタイン

高分子材料やマクロ分子の理論計算



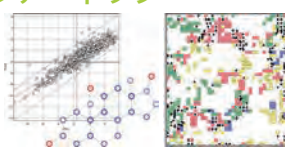
武次 徹也

励起状態の計算と不均一系触媒設計



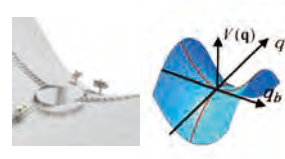
アレクサンドル・ヴァーネック

反応データベースと分子スクリーニング



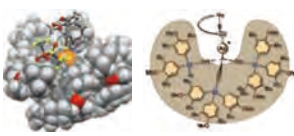
小松崎 民樹

マクロ分子の数学モデルとデータ駆動科学



澤村 正也

遷移金属を用いた新規触媒反応開発



猪熊 泰英

小分子から中程度のサイズの分子合成と結晶学



チェンピン・グン

生体適合 / 自己成長ゲルとマクロ分子

