

第3号

2021年3月発行

カタリスト

北海道大学化学反応創成研究拠点(ICReDD)が発行する、化学反応を楽しく学べるニュースポスター

最適
な
化学反応
を提案
して!



最適な 化学反応を提案して!

テレワーク、オンライン授業、オンラインイベント、遠隔医療など情報通信技術(ICT)の利用が一般的になっています。IoT、5G、ビックデータ、VRという単語をよく聞きます。ICReDDでは、計算科学、情報科学、実験科学の融合により今後、社会に必要な新しい化学反応をいかに効率よく迅速に開発するかを研究しています。今回、情報科学によりどのようにして化学反応を迅速に開発するか学んでみましょう。

Society 5.0の社会

Society 5.0とは仮想空間と現実空間を高度に融合した社会です。具体的には、Society 1.0(狩猟社会)、Society 2.0(農耕社会)、Society 3.0(工業社会)、Society 4.0(情報社会)に続く社会のことをSociety 5.0といいます。

Society 4.0の課題

Society 4.0(情報社会)では、コンピュータとインターネットの発達により、IoTが進み身の回りのあらゆるモノがインターネットに繋がりで多くのデータや情報を収集し、膨大な情報を取り扱うようになりました。こうなると、情報検索しても得たい情報になかなか辿り着けなかったり、カーナビでも目的地までのルートが渋山あったり、渋滞情報も考慮しなければならないなど判断が難しい場面に遭遇します。

レベル
1

レベル
2



START



GOAL

最適
ルート
1件 あります

出発地:
 $CH_4 + 2O_2$
目的地:
 $CO_2 + 2H_2O$



実現可能な最適ルートはこちら。別ルートでホルムアルデヒド(CH_2O)1分子、水(H_2O)1分子、および酸素(O_2)1分子に再配置することも可能です。

Society 5.0が目指す社会

Society 5.0では、こういった情報社会の課題を人工知能(AI)、ロボットなどの技術を活用して解決します。画像処理、機械学習などを活用すると、検索技術の迅速化、カーナビなどのルート検索の高度化、自動車・バスなどの自動運転と農業、建設、災害現場などへの自動運転技術の活用、キャッシュレス化、翻訳技術の進歩、ロボットによる工場の自動化、農業や配達などへのドローンの利用などが実現可能となります。

ICReDDが目指す最適な化学反応の提案技術

ICReDDでは、計算科学により化学反応に必要なエネルギーを見積って、新しい化学反応の仕組みを設計・開発しています。しかし、計算により見積もったデータは膨大でカーナビのルート検索と同じ様な事が起こります。すなわち、反応ルートが膨大で、様々な条件がその反応ルートに影響を及ぼすのです。AIなど情報科学の利用により、膨大な化学反応データから、実現可能な反応を迅速に提案する事が可能になります。

レベル
3

レベル
4

チャレンジ
してみよう!

Society 5.0とは、 空間と現実空間を高度に融合した社会です。空欄に入る答えはどれでしょうか? 答えを送ってください!

- 1)2次元 2)3次元 3)異次元 4)仮想

クイズ

挑戦

身の回りで見つけたSociety 5.0を教えてください。写真や動画にとって送ってください!

チャレンジしたらぜひSNSでシェアしてください。皆さんの反応をお待ちしています!

#ReactWithUs @ICReDDconnect

◎新たに着任した研究者



岩田 覚

研究テーマ
計算化学と化学情報学
における最適手法



ワン・シホン

研究テーマ
有機金属化学、新規キラル
配位子と新規化学反応の
設計



庄司 淳

研究テーマ
量子化学計算に基づく光
機能性希土類超分子の
開発



クレメント・ジャン
ーエマニュエル

研究テーマ
ラマンハイパースペクトル
画像と人工知能を用いた解
析フレームワークの開発



サハ・ラナジット

研究テーマ
ポリマー中のキラルメモ
リーの保持・収縮



ラウト・ラヴィンドラ・
クルシュナジ

研究テーマ
有機触媒反応の開発



ユウ・ヨン

研究テーマ
新反応開発、新規有機化合
物の合成

ニュース

◎代表的な論文 (2020年11月から2021年1月までの論文23報中)

- ・極端紫外超短パルスを用いた大気中の化学反応のリアルタイム観測：
o-ニトロフェノールからの亜硝酸の解離(武次徹也) DOI: 10.1021/acs.jpcllett.0c03297



◎シンポジウム (招待講演・その他)

- ・高校生向けWPIシンポジウム2020 (辻信弥)
- ・科学ソフトウェアの新ホライズン(NHISS 2020) (武次徹也)
- ・金沢大学先駆けプロジェクト2020セミナー／第2回大宮研究室－武田薬品バーチャルシンポジウム (澤村正也)
- ・計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業 合同ワークショップ (小林正人)
- ・北海道大学 理学部 × WPI-ICReDD 合同シンポジウム (チハン・オゼン、パベル・シドロフ、レイス・ロナルド・ラゾ、林裕樹)
- ・岐阜大学人工知能研究推進センター 2020年度 第5回講演会 (小林正人)
- ・第126回フロンティア材料研究所学術講演会 (猪熊泰英)
- ・大連理工大学－海外協定大学オンライン交流学会 (清水洋平)
- ・IQCE量子化学探索講演会2020 (前田理、岩佐豪)
- ・分子研研究会 (岩佐豪)

◎受賞

- ・公益社団法人 有機合成化学協会 センtral硝子研究企画賞 (林裕樹)
- ・Thieme Chemistry Journals Award (長田裕也)
- ・北海道知事表彰 北海道科学技術奨励賞 (美多剛)

◎アウトリーチ

- ・マンスリー ニュースポストカード
- ・クォーターリー ニュースポスター カタリスト第2号

React With Us!

最新情報入手するには、
ICReDDのSNSをフォローしてください。
@ICReDDconnect



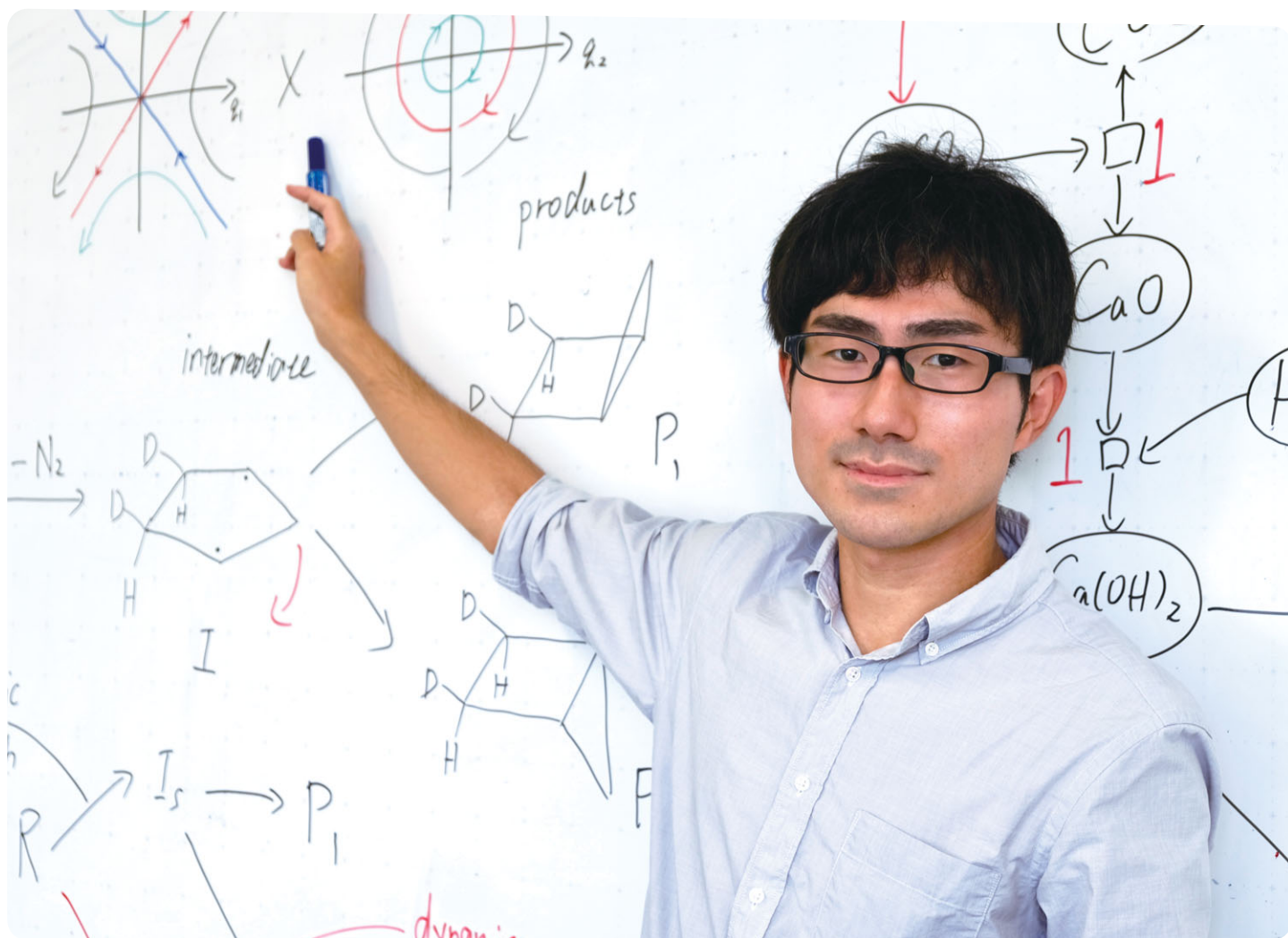
研究者紹介

水野 雄太

Yuta Mizuno

略歴

北海道大学電子科学研究所附属社会創造数学研究センター助教。ICReDD助教兼務。2018年東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了。博士(学術)。2019年より現職。2020年より科学技術振興機構さきがけ「量子情報処理」領域の研究者を兼任。専門は化学反応ダイナミクス、化学反応ネットワーク、相空間幾何学、量子計算技術。



水野雄太助教は、ミクロな世界の物理法則を利用した
未来のコンピュータである量子コンピュータを用いた、
巨大で複雑な化学反応のネットワークを読み解くための情報処理技術を研究しています。



ICReDDについて

新しい化学反応の開発は、人類の繁栄や環境問題と密接に関わっています。その代表的な例は、2010年にノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応です。この反応は医薬品の約20%、液晶や有機EL材料のほぼ全ての生産に利用されており、年間約60兆円規模の産業に関わっています。これは、新しい化学反応の開発が社会にいかに大きな影響をもたらすかを示すわかりやすい例です。

北海道大学に設置された化学反応創成研究拠点(ICReDD)は、その名の通り化学反応開発を専門とする、WPIの拠点です。化学反応を自在に設計することを目標に、異なる分野の研究者がそれぞれの強みを活かし、協力し合いながら分野融合型の研究を行っていることが大きな特徴の1つです。化学反応の自在設計には、あらゆる段階における横断的な異分野連携が必要となりますが、この新たな融合研究を推進するために誕生したのがICReDDです。化学反応という自然界の基本的なプロセスを研究するためには、量子化学計算、情報技術、最新の実験技術、先端材料の開発など分野ごとに分かれて研究するのではなく、真に融合された新たな研究技術が必要不可欠なのです。

カタリストとは

「カタリスト」とは触媒のことです。化学で使用される触媒とは、反応をより速く起こさせるために使われます(例:分子を結合させる、反応の障壁を減らす、分子を活性化させる、など)。このポスターを通して、読者の方々が日常に無数に存在する化学反応と私たちの生活を結び付け、化学反応や化学といったものが私たちの世界と実際にはどのように関わっているのかを、新しい視点で気づくためのお手伝いができればと考えています。そして、「カタリスト」で私たちのことをもっと知ってもらい、読者の皆さんと私たちの間に新たな関係(化学反応)を築ききっかけ(触媒)を提供できればと思っています。#ReactWithUs

カタリスト 第3号 2021年3月発行

発行所

北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD/アイクレッド)

〒001-0021 北海道札幌市北区北21条西10丁目

☎ 011-706-9645(広報担当)

✉ public_relations@icredd.hokudai.ac.jp

SNS @ICReDDconnect     

WEB <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

