

第12号

2023年6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

計算化学における

多数の「組み合わせ」



計算化学における 多数の「組み合わせ」

化学反応とは、化学結合によって様々な配置でくっついた原子の集合体である分子の組み合わせる種類や、くっつき方の向きを変えたりすることです。

材料を混ぜて、熱や光などのエネルギーを加え、どんな化合物ができるかの過程は、料理をすることにとってもよく似ています。

研究室では、化学反応の予測をするのにコンピュータを使って計算しますが、材料や反応条件などの組み合わせが多い場合、予測に非常に時間がかかる場合があります。

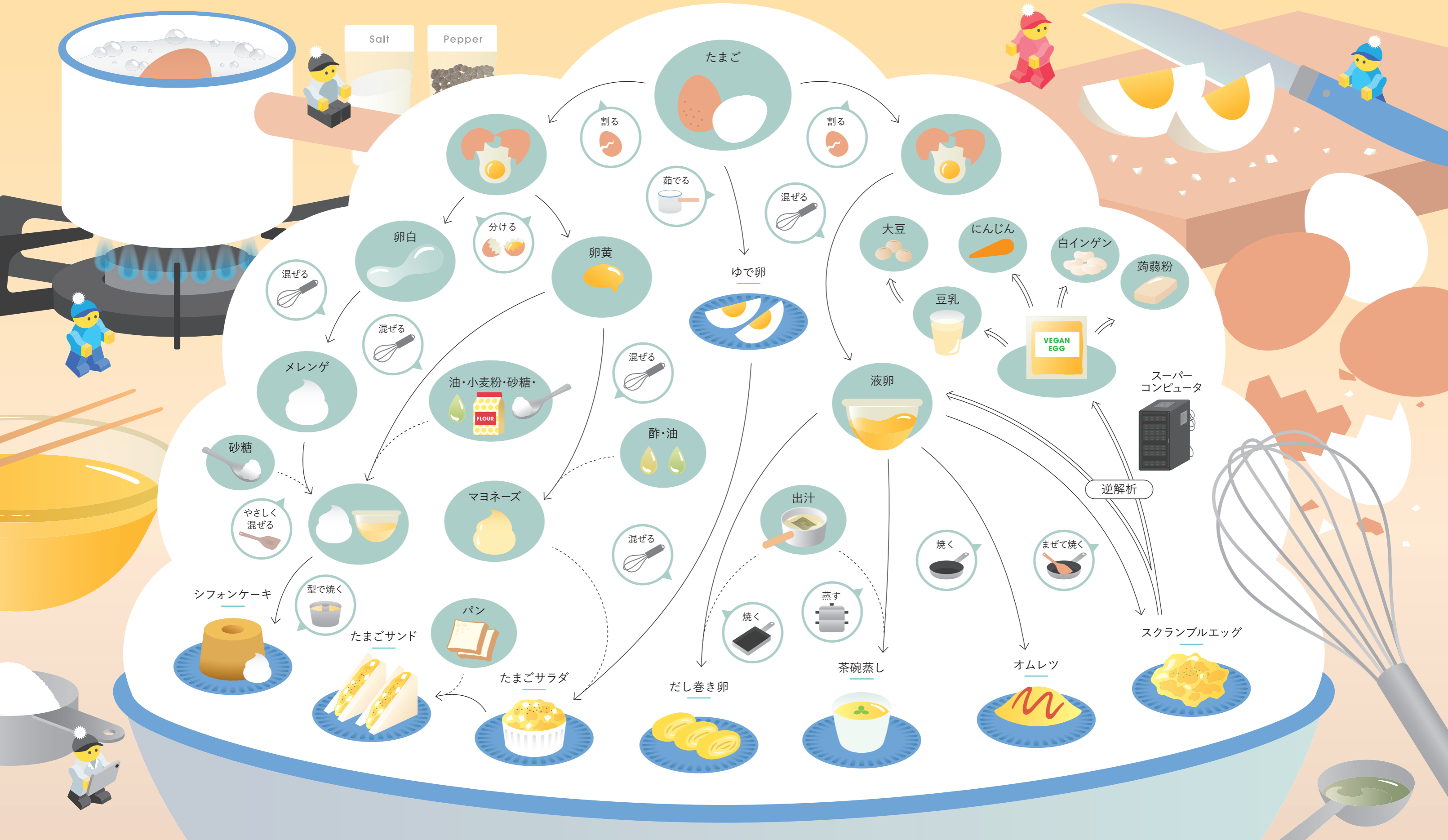
そこで重要なのは、予測される膨大な可能性の中から「現実的な組み合わせ」に絞り込み、計算にかかる時間を削減することです。

1. レシピのバリエーション

そろそろご飯の支度をしようと冷蔵庫を開けてみたら、卵しかありませんでした。さて、今日のおかずは何にしましょう？ 目玉焼き？ ゆでたまご？ オムレツ？ 卵という材料は1つですが、焼く、ゆでる、蒸す、など調理法は色々あり、塩、コショウ、しょうゆなど調味料も色々あります。たとえば調理方法が4つ、調味料が3つあった場合、それらを組み合わせでできる料理は24通りあります。もしキッチンにスパイスがたくさんあって、調味料が15種類に増えた場合、組み合わせは10万通り以上になってしまいます！ すべてのレシピを試してみたら、今まで食べたことのないほど美味しい（美味しくない?!）新しい料理に出会えるかもしれません。

2. 選択肢が多すぎると…

化学反応の予測をする際にも、原子・分子の数、反応のステップ数が増えるほど、その複雑さも急激に増加します。ICReDDでは「人工力誘起反応 (AFIR) 法」という技術を用いて、起こりうるすべての反応経路を探索しています。この方法では、原子や分子の、様々な箇所に・様々な方向から・異なる強さの力を加えたと想定し、計算により反応の次のステップをシミュレーションします。この作業は各ステップごとに行われるため、やはり原子・分子の数、ステップの数が多ければ、たとえスーパーコンピュータであっても有限時間内にすべての反応経路探索を終えられない可能性もあるのです。



3. 選択肢を絞る

シミュレーションする組み合わせ数の爆発的な増大を防ぐため、ICReDDでは、各ステップの計算後に、その反応経路を評価し、不要な反応経路を排除する方法を開発しました。計算上では、「それが現実的かどうか」は考慮せず、シンプルに条件同士を組み合わせで計算されるため、時には現実的ではない反応、たとえば「温度設定が異様に高すぎる（現代の設備では不可能な温度設定）」などの結果も出てきます。そのような現実的ではない反応経路、成功の可能性が低い反応経路は、シミュレーションの次のステップに含めないことで、余計な計算時間を使う必要がなくなります。この方法により、探索すべき反応経路数をおよそ1000分の1に削減でき、計算化学者は多段階反応や、より複雑なシステムのシミュレーションに集中して取り組むことができるようになりました。

4. 反応経路を逆からも予測

より複雑なシステムの1つに、生成物の情報のみで反応経路を逆から予測する「逆合成解析」があります。これは「出発物質(材料)→生成物」の逆方向、「生成物⇒出発物質」の経路探索です。例えるなら、卵から「何を作る？」と考えるのは逆に、スクランブルエッグを見て「何でできているのか？」を考えるイメージです。材料は当然「卵」一択でしょうか？ 一見そのように思っても、料理から逆に材料を探索してみると、実は私たちの予想しなかった材料ーヴィーガンエッグと呼ばれる代替卵もあるということがわかります。化学反応経路の探索においても、出発物質の可能性はほぼ無限にあるため、探索のステップで不要な経路を排除していく技術はやはり重要です。ICReDDでは逆合成解析のさらなる向上に取り組んでおり、将来的には化学者が作りたい分子を思い描き、コンピュータプログラムの「巻き戻しボタン」を押すだけで、その分子を作り出す方法がわかるようになるかもしれません！

CHALLENGE!

カタリストを読んで
チャレンジしてみよう!

クイズに
チャレンジ

Q 分子が多くなり、反応のステップ数が増えると、計算する組み合わせが_____。

A 一気に減少する

B 変わらない

C 徐々に増加する

D 一気に増加する



クイズの答えはInstagramのハイライト
で公開しています。ぜひチャレンジして
みてください。 #ReactWithUs

@ICReDDconnect



ICReDDCONNECT

◎新たに着任した研究者



デブバーマ・
シュバンカー

研究テーマ

有機触媒、光触媒



フェルドース・
ザナトゥール

研究テーマ

がん幹細胞の評価



ラマ・ミレナ

研究テーマ

材料科学、
ハイドロゲル



ザンコフ・ドミトリー

研究テーマ

ケモインフォマティクス、
逆合成解析

ニュース

ICReDD News

June 2023

◎代表的な論文 (2023年3月から2023年5月まで)

新規開発したゲルを用いて脳の神経組織の再構築に成功 ～将来の脳損傷の新治療法開発への貢献に期待～

(今城、津田、グン、田中)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8753>



直線状リン配位子の合成に成功 ～歪んだプロペラン分子に光を照射して直線分子の合成に成功～

(林、美多、前田、長谷川)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8935>



空気下、室温で実施可能な超高速バーチ還元反応を開発 ～ボールミルを用いたメカノケミカル法により、従来の溶液合成の制限を克服～

(久保田、伊藤)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8947>



メカノケミカル有機合成反応に特化した触媒の開発に成功 ～有機溶媒の使用量を低減する環境調和型物質生産プロセスの拡充へ～

(久保田、伊藤)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/8776>



ダブルネットワークハイドロゲルの分子レベルの損傷を蛍光でリアルタイムに観察できる方法を開発

(ジョン、ジン、久保田、中島、前田、伊藤、グン)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9194>

◎アウトリーチ

- ・ICReDD新棟の紹介動画
- ・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11号

◎シンポジウム

- ・農学研究院 -ICReDD 合同シンポジウム

◎受賞

- ・アメリカ物理学会 2023年 高分子物理学賞 (グン)
- ・日本病理学会 日本病理学賞 (田中)



マンスリーニュースポストカード



カタリスト第11号



ICReDD新棟の紹介動画

動画の視聴はこちらから!



研究者紹介

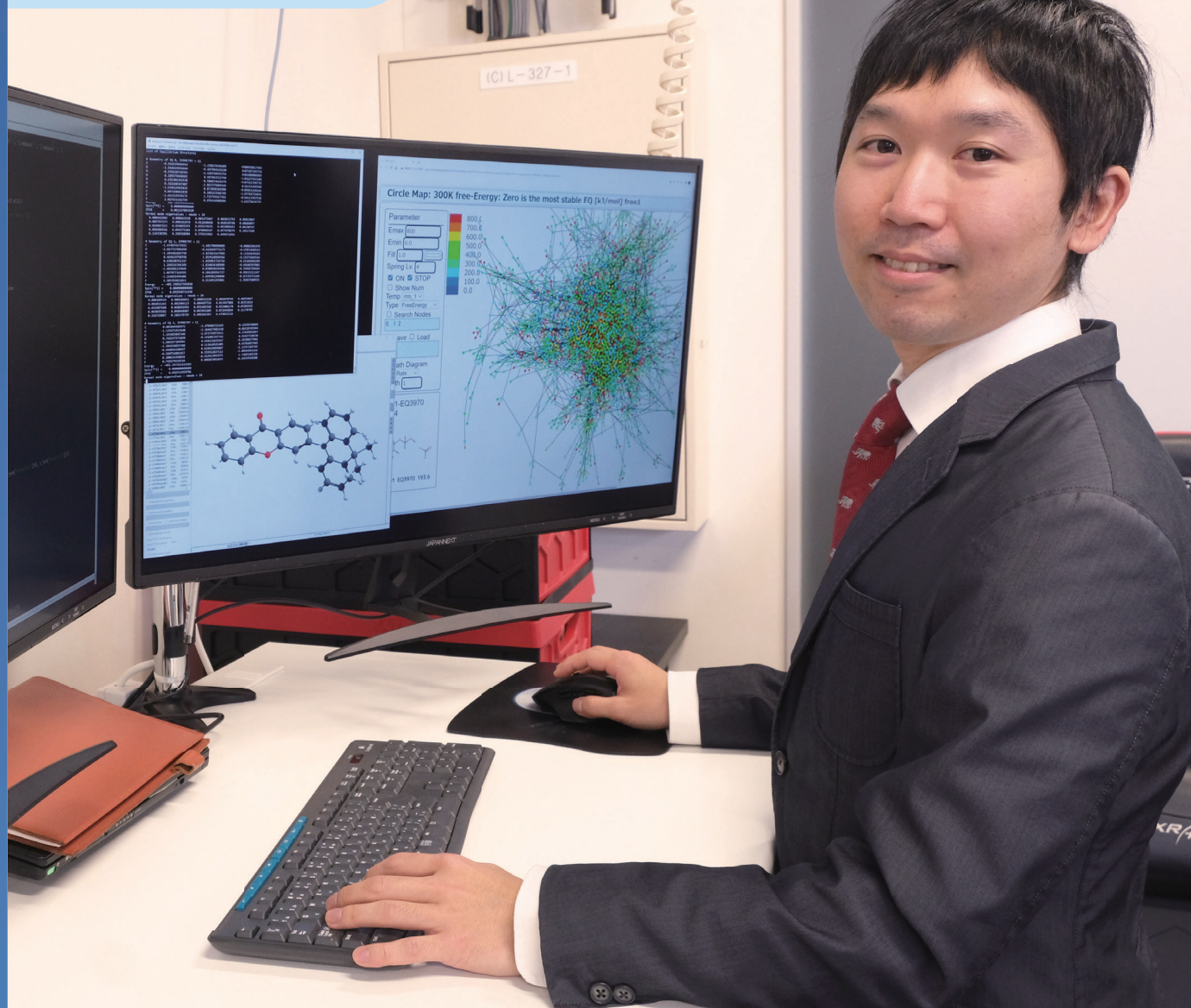
vol.12

原 昶

Yu Harabuchi

略歴

ICReDD 拠点長補佐、融合研究コーディネーター、及び、特任准教授。2013年に北海道大学大学院総合化学院にて博士号取得。その後、北海道大学博士研究員、米国アイオワ州立大学博士研究員、JST-さきがけ専任研究員、北海道大学理学研究院化学部門助教を経て、2023年4月より現職。



原昶特任准教授は、量子化学計算に基づく分子の光応答を包括的に理解するための理論計算手法の開発とその応用を進めています。

コンピュータを用いて、分子蛍光、光スイッチング、光増感作用の機構解析に取り組み、最近では、同手法と反応経路ネットワークを組み合わせることで光電子移動触媒を用いたラジカル反応の解析にも取り組んでいます。

代表的な論文

Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 22561 (2015) Nat. Comm., 11, 3909 (2020).
Angew. Chem. Int. Ed., 62, e202211936 (2023).



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か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。

📍 2023年3月にICReDDは新棟に引っ越しました。
(上)2フロアにまたがるフュージョンリサーチオフィスの広い空間に100名の研究者が集っています。
(下)新しいサーバー室に化学反応を予測するスーパーコンピュータが設置されています。

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

React With Us!

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



カタリスト 第12号 2023年6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

☎ 011-706-9646 (広報担当)
✉ public_relations@icredd.hokudai.ac.jp
🌐 <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

