

## Research Strategy

### 研究戦略

ICReDDの融合研究により、基礎から応用までの実験科学の結果を用い、化学反応の発見を自動化、加速させる計算科学・情報科学のツールの設計と効率を改良するフィードバックループが作られています。

### ICReDDの革新的なアプローチにより 反応開発の自動化が進んでいます。

#### Our research foundation 研究基盤

ICReDDは、量子化学計算に基づく最新の反応経路探索法である人工力誘起反応(AFIR)法に加え、情報科学を応用して最適な実験条件を絞り込み、情報を抽出します。このアプローチにより、成功の見込みの高い実験をピンポイントで特定し、実験室での試行錯誤にかかる時間を削減します。

#### 配位子・触媒の設計

触媒設計において、配位子のスクリーニングは非常に重要なステップですが手間のかかる作業です。ICReDDは「バーチャル配位子アシスト(VLA)法」を開発しました。これにより、多岐にわたる配位子特性の迅速な計算スクリーニングが可能となり、どのような配位子特性が反応において最も高い選択性を与えるかを決定できます。

#### 反応形式の設計

これまでの計算によるシミュレーションは、ラボで実現した反応の経路を解析するために使用されてきました。しかし、ICReDDは、AFIR法によるシミュレーションを使って全く想像もつかなかった新しい反応形式を見出し、それに基づく48種類の化合物を実験で合成することに成功しました。

#### 逆反応の予測

目的とする生成物分子の情報だけをもとに、それを生成する反応を予測することができれば、新しい反応の発見を早めるための強力なツールとなります。ICReDDは、より複雑なプロセスを理解するためのアルゴリズムを開発し、AFIR法を利用して多段階反応の逆反応予測を行うことができるようになりました。



## ICReDD 基金

若手研究者の養成や海外派遣などの支援

若手研究者のスタートアップ、融合研究推進などの研究活動支援

公開講座・講演会等の開催、全世界に向けた研究成果等の情報発信

施設設備等の環境整備、研究支援スタッフなどの雇用

人類はさまざまな化学反応を利用して日常生活の質を向上させてきました。ICReDDの研究では、社会を変えるような化学反応の発見頻度を高めることを目的としています。研究を通じて豊かな未来社会の創造に貢献するICReDDの取り組みを支援していただけることを願っています。

ICReDD 拠点長 前田 理



ICReDD 様(北キャンパス総合研究棟 8号館)

## Principal Investigators

### 主任研究者

|                                                                                                       |                                                                                                     |                                                                                              |                                                                                                   |                                                                                                    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <br>グン・チェンビン       | <br>猪熊 泰希        | <br>前田 理  | <br>リスト・ベンジャミン | <br>シオハラ シン・ミン |
| <br>岩田 寛           | <br>長谷川 靖哉       | <br>伊藤 肇  | <br>小坂崎 民樹     | <br>シオハラ シン・ミン  |
| <br>小川 美希子         | <br>ルピンスタイン・マイケル | <br>武次 徹也 | <br>川口 一孝      | <br>田中 伸哉       |
| <br>ヴァーネッタ・アレクサンドル |                                                                                                     |                                                                                              |                                                                                                   |                                                                                                    |

## ICReDD

Social media: @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得る、「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。

北海道大学  
化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)  
〒001-0021 札幌市北区北21条西10丁目北キャンパス総合研究棟8号館  
Institute for Chemical Reaction Design and Discovery  
Hokkaido University  
North 21, West 10, North Ward, Sapporo,  
Hokkaido 001-0021 JAPAN

☎ 011-706-9649 ☎ 011-706-9652  
✉ office@icredd.hokudai.ac.jp  
<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja>



## ICReDD

Institute for Chemical Reaction Design and Discovery  
北海道大学 化学反応創成研究拠点

## Revolutionizing chemical reaction design and discovery

## ICReDD's vision for fusion research

### ICReDDの融合研究のビジョン

スーパーコンピュータではAFIR法を用いて反応経路ネットワークを計算します。

情報科学者は膨大なデータを処理し、有望な経路を特定します。

実験科学者はこれらの経路を検証します。試行錯誤が少ないことで、新しい反応の発見が加速されます！

設計効率の劇的な改良

遷移状態の計算による反応設計

計算科学

反応予測の自動化

人工知能を活用した、経験に反する、想像もつけない反応の提案

設計した反応の評価と実行

実験科学

人間の直感によるフィードバック

情報科学

計算科学

実験科学

ICReDD

Message from Satoshi Maeda,  
Director of ICReDD

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で、豊かな未来社会の創造に貢献します。

$\text{R}_2\text{N-NR}_2 + \text{CO}_2 + \text{F}_2 \rightarrow \text{R}_2\text{N-CO}_2\text{NR}_2 + \text{F}_2$   
 $\alpha,\alpha\text{-difluoroglycine}$

## Features of the Institute

### 拠点の特徴

#### MANABIYAシステム

##### 短期間の教育・研究交流プログラム

学生や研究者がICReDDの技術を学び、共同研究を行うための短期教育・研究交流プログラム

MANABIYAの修了生がICReDDの計算を使った化学反応発見方法を世界中に広めています。

ACADEMIC  
毎年度公募

INDUSTRY  
継続的に公募

共同研究を行う

ICReDDの手法を製品開発へ応用

#### 新大学院を設立

ICReDDは、MANABIYAシステムを大学院プログラムに発展し、北海道大学に「化学反応創成学」の大学院を創設する予定です。この大学院は、北海道大学の大学院教育を改革し、実験、計算、情報科学のすべての分野に精通した次世代に必要とされる人材を育成します。

#### 産学連携

(三井化学)

2023年ICReDDと三井化学株式会社は、産業創出部門を設置し、ICReDD 棟内の共同研究室にて5年間の大型共同研究を開始しました。ICReDDは、化学反応を社会還元につなげることを重視しています。

#### Listプラットフォーム

2023年、ICReDD内に設立された「ListサステナブルDX触媒連携研究プラットフォーム」は、2021年ノーベル化学賞受賞者でICReDD PIのベンジャミン・リスト教授によって主導されています。このプラットフォームは、ICReDDで開発された技術を活用して、新しい有機触媒の設計における革新的かつ効率的な方法を開発します。

#### ICReDDフェロー

ICReDDは、PI(Principal Investigator: 主任研究者)を定期的に入れ替える柔軟なシステムを取り入れています。ICReDDフェローは、共同研究のためにICReDDのリソースを利用することができる学内外の研究者であり、将来のICReDD PI 候補者となります。

## New Technologies

### 新しい技術

#### 抗がん剤開発の新ツール

がんの専門家である田中教授とハイドロゲルの専門家であるゲン教授は共同して、分化したがん細胞をダブルネットワークハイドロゲルで培養することで、これらの細胞が幹細胞に逆戻りすることを発見しました。これにより、これらの幹細胞を標的とする薬剤を簡単に評価することができるようになり、がんの再発を減少できる可能性があります。

#### HARP(ハーブ)現象

DN gel  
0 h  
12 h  
24 h

#### 植物成長の促進

長谷川グループは、発光性ユーロピウム系材料を開発し、さまざまな用途に応用しています。北海道大学大学院農学研究院との共同研究では、紫外線を赤色光に変換するユーロピウム系薄膜が、光合成を促進して植物の成長を促すことを発見しました。

波長変換フィルム

Control WCM

#### 選択的触媒の予測

リストグループの辻准教授は、シドロフ准教授と長田准教授と共同で、高い選択性を持つ触媒を予測するための半自動システムを開発しました。このシステムでは、高価な量子化学計算を使用せずに予測を行います。合成ロボットを用いて実験データを生成し、それを機械学習モデルの訓練データとして使用しました。その結果、訓練データに使用された触媒よりも高い選択性を発現する新しい触媒を予測することができるようになりました。

#### 固体状態のメカノケミカル反応

メカノケミカル反応では、固体反応物をボールと一緒に小さな瓶に入れ、振動させることで、ほとんど溶媒を使用せずに反応させることができます。伊藤グループは、この方法により難溶性の反応物を用いたバーチ還元やグリニャール試薬の合成などの重要な反応を、低コストかつシンプルで環境に優しく行う方法を開発しました。