

「世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI)」に採択

～「化学反応創成研究拠点」の開始～

【概要】

北海道大学（総長：名和豊春）は、平成 30 年度文部科学省国際研究拠点形成促進事業費補助金「世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI)」に応募し、10 月 4 日（木）に採択されました。拠点名は「化学反応創成研究拠点」、事業期間は 10 年で、毎年 7 億円程度の補助金が交付されます。

【プロジェクト開始に至った経緯】

事業の背景：平成 19 年度から文部科学省が開始した事業「世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI)」は、高いレベルの研究者を中核とした世界トップレベルの研究拠点の形成を目指すものです。政府の集中的な支援により、「世界最高レベルの研究水準」、「融合領域の創出」、「国際的な研究環境の実現」、及び「研究組織の改革」の 4 つの自主的な取り組みを促します。これにより、世界から第一線の研究者が集まる高い研究水準と研究環境を誇る「目に見える拠点」となることが求められます。

本学の方針：北海道大学は、大学院理学研究院の前田 理（まえださとし）教授が開発した「人工力誘起反応法^{*1}」を基盤とした「化学反応創成研究拠点」構想を提案し、10 月 4 日（木）に採択されました。本研究拠点では、分子^{*2}の構造や物性を決める鍵となる電子^{*3}の振る舞いを計算によって明らかにし、情報科学^{*4}を用いてその計算時間を飛躍的に短縮します。さらに、得られた計算結果に基づいて実際に新物質を合成します。これら一連の研究を「化学反応創成学^{*5}」と名付け、新たな学問分野へと育て上げます。そして、これから人類が到達するであろう新世代のものづくりを実現します。

【内容・対象・意義】

申請のきっかけ：前田教授は、コンピュータ上で分子に仮想的な力を加え、分子同士の化学反応を引き起こすという画期的な手法の開発に、世界ではじめて成功しました。さらに、これまでの計算手法では不可能であった反応経路^{*6}を自動的に見つけ出すことにも成功しました（図 1）。前田教授は、この手法を「人工力誘起反応法」と名付けました。

研究の方向性：本研究拠点では、この方法をさらに進化させます。例えば、人工知能 (AI) ^{*7}などに使われている情報科学を駆使して計算時間を大幅に短縮します。さらに、実験科学^{*8}によって計算結果が正しいかどうかを検証し、その結果を計算手法の研究にフィードバックします。このような計算科学^{*9}、情報科学、実験科学という 3 つの学問分野が目的を同じくして一堂に会することで、新しい学問分野が構築されます。

将来への期待：「化学反応創成研究拠点」において、このような異分野融合研究を加速することで、非常に複雑な化学反応が正確に理解され、未来の私たちの生活を支える新物質を短時間で発見できる

だけでなく、生命に関わる未知の現象が解明され、医療・医薬の飛躍的な発展にも波及します(図2)。このような新しい学問分野の基盤を強固にするためには、若手研究者の育成と、その世界レベルでのネットワーク形成が非常に重要です。そこで本研究拠点では、計算科学、情報科学、実験科学の3つの融合研究「化学反応創成学」を世界中の研究者や大学院生に伝える「MANABIYA(学び舎)システム」を構築し、高度人材の世界的循環と分野横断型共同研究の実現を目指します(図3)。具体的には、国内外の連携拠点に所属する若手研究者や学生が本研究拠点に3か月程度滞在し、共同研究を通して化学反応創成学に基づく研究手法を習得します。その後、それぞれの連携拠点に戻って、独自の研究を展開します。そして10年後には、世界中のトップ研究者から若手研究者まで数百人が参画する巨大ネットワークが完成し、新たな研究分野の発展が期待されます。

【開始時期】

平成30年10月(事業期間:10年)

【参考図】

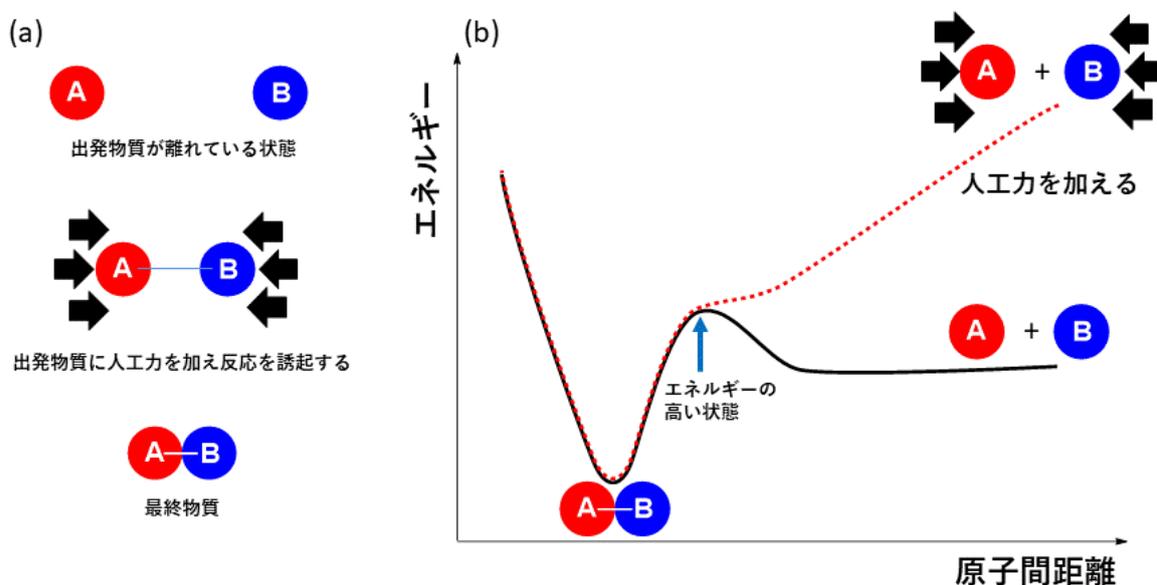


図1：人工力誘起反応法のイメージ

人工力誘起反応法とは、反応物(AとB)同士を押し付ける(または引き離す)手法(a)。例えば、出発物質AとBが結合し、ABができる場合の原子間距離とエネルギーの関係は(b)の黒線のようになる。しかし、この従来の方法だとABができるまでにエネルギーの高い状態を計算することが難しく、時間がかかる。人工力誘起反応法では、AとBが近づくようにコンピュータ上で仮想的な力(人工力)を加える。力を加えた場合((b)赤線)、エネルギーが低い方向に下っていきだけで自動的に最終物質ABが得られる。これにより比較的容易な計算で様々な化学反応の反応経路を短時間で予測することが可能になった。

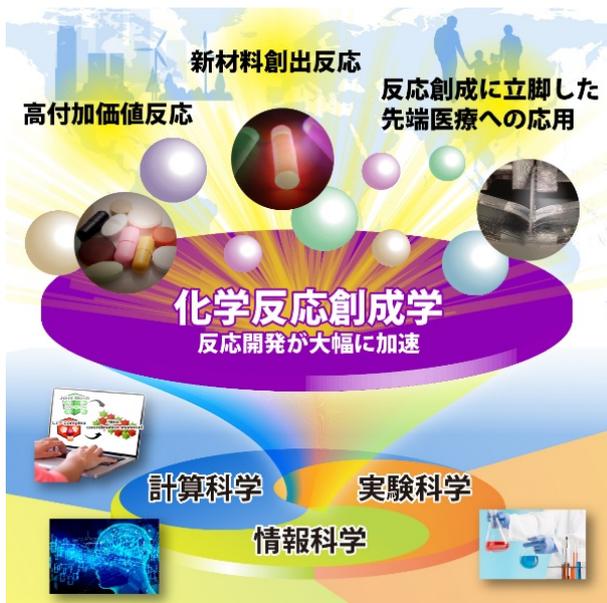


図 2：化学反応創成研究拠点概要



図 3：MANABIYA（学び舎）システム

お問い合わせ先

北海道大学大学院工学研究院 特任准教授 山本靖典（やまもとやすのり）

T E L 011-706-8117 F A X 011-706-8117 メール yasuyama@eng.hokudai.ac.jp

配信元

北海道大学総務企画部広報課（〒060-0808 札幌市北区北 8 条西 5 丁目）

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール kouhou@jimu.hokudai.ac.jp

【用語解説】

- *1 人工力誘起反応法 … 化学反応において、コンピュータ上で仮想的な力を加え、出発物質が最終物質に変化して行く過程を自動的に見つけ出す手法。
- *2 分子 … 原子の集合体で、物質がその化学的性質を保って存在しうる最小の構成単位。
- *3 電子 … 物質を構成する素粒子の一つ。負の電荷をもち、正の電荷をもつ原子核の周りに分布して原子を構成する要素の一つ。
- *4 情報科学 … 情報の性質・構造・論理を生成・伝達・変換・認識・利用などの観点から探求し、コンピュータなどの情報機械の理論・応用などを研究する学問。
- *5 反応創成学 … 本研究拠点で新しく体系化する、未知の化学反応を理論的に設計・発見する学問。特に計算科学・情報科学・実験科学を融合して化学反応を理論的に設計・発見し、物質が何からどのような構造でできていて、どのような性質を持っているか、また化学反応によりどのような物質に変化するかを研究する。
- *6 反応経路 … 化学反応において出発物質が最終物質に変化して行く過程のこと。
- *7 人工知能 (AI) … 情報をもとに、記憶、学習、推論、判断など高度な情報処理をコンピュータ上に構築した人工的なシステム。
- *8 実験科学 … 実験による実証を研究の主な方法とする科学の一部門。
- *9 計算科学 … 数学的なモデルやシミュレーションによる計算により理論的に科学の課題を解決する学問。