

# 化学反応創成プラットフォーム「SCAN」を開発

～化学反応を自在に設計する～

## ポイント

- ・ 化学反応経路探索法-AFIR 法から生み出された化学反応経路データを収録・公開
- ・ 化学反応経路の検索、可視化、探索、設計の全ての動作をウェブ上でクリックのみで実現
- ・ 高度なインフォマティクス手法をプログラミングなしで実行可能

## 概要

北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）、及び同大学院理学研究院の高橋啓介教授、及び前田理教授らの研究グループは、化学反応経路の幅広い活用と社会への普及を目的に、人工力誘起反応法（AFIR 法）\*1 から生み出された化学反応経路データを、ソフト等は一切インストールすることなく、ウェブ上でクリックのみで検索、可視化、探索、設計を実現するプラットフォーム「Searching Chemical Actions and Networks(通称 SCAN)」を開発しました。

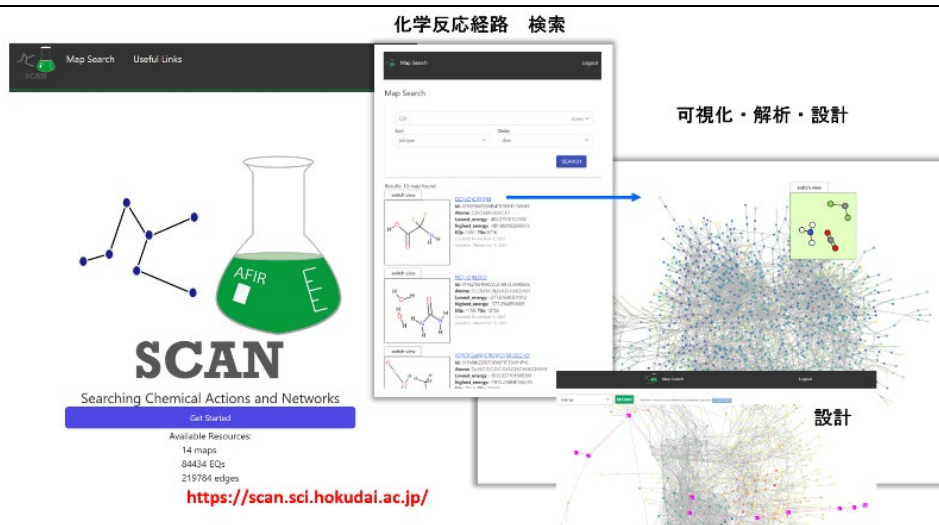
これまで研究グループは、AFIR 法は量子化学計算\*2 に基づいて、複雑な化学反応経路を描写してきました。しかし得られた化学反応経路はとても複雑で、解析には高度な専門知識と高度なプログラミング技術が必要でした。また、計算された化学反応経路データを蓄積・共有するデータセンターが存在しないことも、幅広い活用への大きな障壁となっていました。

そこで研究グループは新たに、生データを保存する「データレイク」、データ前処理した「データハウス」、データを応用・展開する「データマート」の 3 層構造からなる反応経路データベースのプラットフォーム「SCAN」を設計しました。SCAN では化学反応経路データを検索・可視化することが可能になります。また、高度なインフォマティクス手法もプログラミングを一切必要とせず、マウスのクリックのみで実行することを可能としました。

SCAN の普及により、量子化学計算とインフォマティクスが連動した次世代の化学反応設計が加速すると期待されます。

本プラットフォームはオープンソース\*3 であり、github(<https://github.com/scan-team>)で無償公開しています。そのため産業界や研究機関において幅広く自由に活用していただくことができるため、今後の化学反応創成に大きく寄与することが期待されます。

本研究成果は、2023 年 7 月 5 日（水）公開の王立化学会 Digital Discovery 誌にてオンライン公開されました。



化学反応創成プラットフォーム「SCAN」

<https://scan.sci.hokudai.ac.jp/>

## 【背景】

化学反応の発見は研究者の経験・試行錯誤に大きく依存してきた背景があります。そのような中、化学反応経路探索法の一つである AFIR 法は、量子化学計算に基づき、化学反応経路を網羅的な探索を可能とした計算方法です。しかし得られた化学反応経路はとても複雑で、解析には高度な専門知識と高度なプログラミング技術が必要としていました。また、計算された化学反応経路データを蓄積・共有するデータセンターが存在しないことも、幅広いデータ活用への大きな障壁でした。そのため、産業界や研究機関において幅広く利用するためのプラットフォームが必要とされていました。

## 【研究手法】

データレイク、データハウス、データマートの3層構造からなる反応経路データベース設計を行いました。データレイクでは AFIR データを生データとして格納しています。データハウスでは AFIR 生データを解析のために前処理したデータ形式です。データマートではデータ科学手法や可視化などを実行します。SCAN ではこの3層構造を基盤とし、プログラミング言語である JavaScript と next.js を用いたウェブ・プラットフォームを開発しました。

## 【研究成果】

SCAN には AFIR 法によって生成された 14 の化学反応経路データが搭載されています。SCAN ではこれらの化学反応経路データを検索・可視化することが可能になります。可視化では反応収率等の情報が含まれているため、自在に反応物、生成物、中間体を特定することができます。また、高度なインフォマティクス手法もプログラミングを一切必要とせず、データ検索、可視化、データ解析をマウスのクリックのみで実行することを可能としました。そのため、SCAN を用いることにより、複雑な化学反応経路データを誰もが容易に解析できるようになりました。今後化学反応経路データは増えていく予定です。

## 【今後への期待】

本プラットフォームはオープンソースであり、github(<https://github.com/scan-team>)で無償公開しています。産業界や研究機関において幅広く自由に活用していただくことができるため、今後の化学反応創成に大きく寄与することが期待されます。

## 【謝辞】

本研究は、「JST ERATO (前田化学反応創成知能プロジェクト) 」(JPMJER1903)、「文部科学省世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI) 」の支援のもとで行われました。

## 論文情報

論文名 Searching Chemical Action and Network (SCAN): Interactive Chemical Reaction Path Network Platform (化学反応創成プラットフォーム - SCAN)  
著者名 クワハラ・ミカエル<sup>1</sup>、原淵 祐<sup>2</sup>、前田 理<sup>1, 2</sup>、藤間 淳<sup>1</sup>、高橋 啓介<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>北海道大学大学院理学研究院、<sup>2</sup>北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点)  
雑誌名 Digital Discovery (英国王立化学会が発行する化学ジャーナル)  
DOI 10.1039/D3DD00026E  
公表日 2023年7月5日(水) (オンライン公開)

## お問い合わせ先

### 【研究に関すること】

北海道大学大学院理学研究院 教授 高橋啓介 (たかはしけいすけ)

T E L 011-706-4661 メール keisuke.takahashi@sci.hokudai.ac.jp

U R L <https://takahashigroup.github.io/>

北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD) 拠点長

同大学大学院理学研究院 教授 前田 理 (まえださとし)

T E L 011-706-8118 メール maeda@eis.hokudai.ac.jp

U R L <https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~theochem/>

### 【JST 事業に関すること】

科学技術振興機構 研究プロジェクト推進部 グリーンイノベーショングループ

加藤 豪 (かとうごう)

T E L 03-3512-3528 メール eratowww@jst.go.jp

### 配信元

北海道大学社会共創部広報課 (〒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 jp-press@general.hokudai.ac.jp

科学技術振興機構総務部広報課 (〒102-8666 東京都千代田区四番町 5 番地 3)

T E L 03-5214-8404 F A X 03-5214-8432 メール jstkoho@jst.go.jp

## 【用語解説】

- \*1 人工力誘起反応法 (AFIR 法) … 前田教授らが開発した量子化学計算に基づく反応経路探索法。反応する分子同士の間人工的な力 (人工力関数) を加え、反応経路を網羅的に探索する手法。
- \*2 量子化学計算 … 分子シミュレーション技術の一つであり、原子や分子の構造や性質、反応性を電子状態から解析する手法。
- \*3 オープンソース … ソースコードを開示し自由な利用を許可するモデル。

### 【WPI-ICReDD について】

ICReDD (Institute for Chemical Reaction Design and Discovery、アイクレッド) は、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)」に採択され、2018 年 10 月に本学に設置されました。WPI の目的は、高度に国際化された研究環境と世界トップレベルの研究水準の研究を行う「目に見える研究拠点」の形成であり、ICReDD は国内にある 17 の研究拠点の一つです。ICReDD では、拠点長の下、計算科学、情報科学、実験科学の 3 つの学問分野を融合させることにより、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な「化学反応」を合理的に設計し制御を行います。さらに化学反応の合理的かつ効率的な開発を可能とする学問、「化学反応創成学」という新たな学問分野を確立し、新しい化学反応や材料の創出を目指しています。

