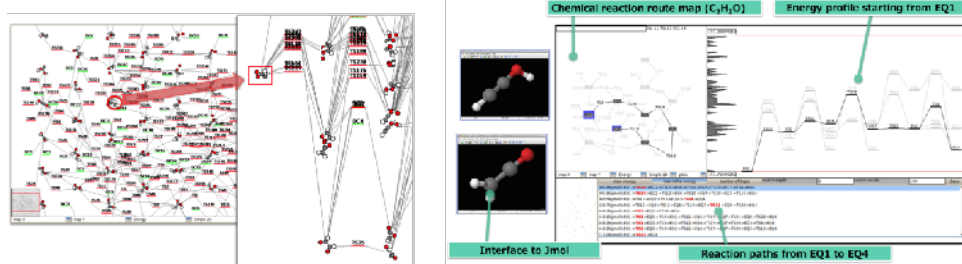


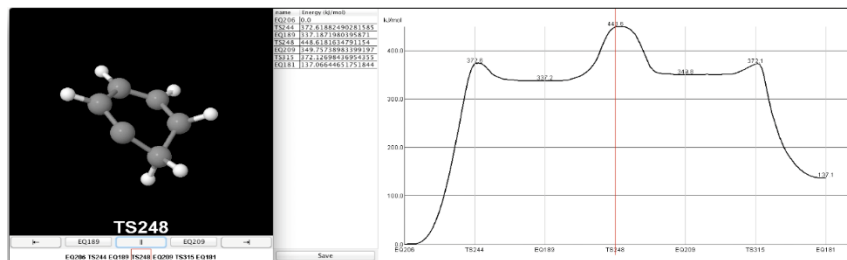
データ基盤整備 「データ中心ケミストリ」

現在までに存在が確認されている化学物質は 1 億種類を超え、年間数10万～100万種オーダーで加速度的に増え続けています。しかし理論的には存在し得るものの、いまだ人類が手にしていない化学物質種数は、これをはるかに凌駕することが明らかになりつつあります。そこで本プロジェクトでは、まずこの革新をもたらす物質を「**埋蔵分子**」と名付け、埋蔵分子とこれらの供給方法である化学反応経路（**グローバル化学反応マップ**）を量子化学の理論に基づいて自動的に探索・発掘することを目指します。**データケミストリ**の視点から、**量子化学的ケミカルスペース**を切り開き、研究基盤の整備へ向けて研究を進めています。

理論的に存在する化学物質と化学反応経路を**量子化学の理論にもとづいて探索**した結果を解析するためのソフトウェア **RMapView**を開発し公開しました

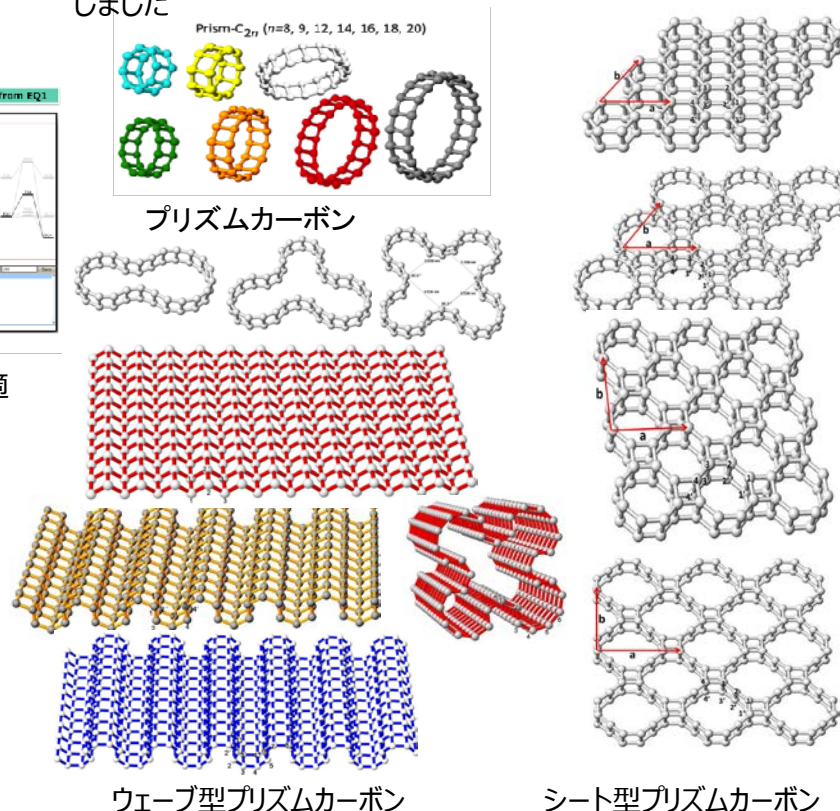


RMapViewによる $C_2H_2O_2$ のグローバル化学反応マップ表示（左）と最適な反応経路の解析例（右）



化学反応経路に沿ったムービー表示（左）。ベンゼンからフルベンへの最小エネルギー経路（Minimum Energy Path: MEP）の例。

理論的に存在する**新規炭素物質（埋蔵分子）**を発見しました



量子化学に基づいて物質と反応経路を網羅的に探索したデータはまだ世の中に存在していません。本プロジェクトは、この未踏の**量子化学的ケミカルスペース**を切り開き、データ基盤として供給します。**医薬品やマテリアル、農薬、食品、新エネルギー資源を含む、新規機能性物質（埋蔵分子）の創成**に結びつくことが大いに期待できます。

量子化学的ケミカルスペースは広大で、巨大な**ビッグデータ**です。データマイニングや機械学習などの情報科学と連携した**新規物質**や**新規反応経路**や**潜在的な規則性**の発見も期待されます。**ケモインフォマティクス**や**マテリアルズインフォマティクス**と呼ばれる、近年注目が高まっている分野です。

量子化学的ケミカルスペースは、いわば**新しい化学の世界地図**です。これを俯瞰する本研究は、高校・大学の**化学の教科書を一新するだけの革命をもたらす**可能性を秘めています。

データ蓄積の自動化・分散処理化

量子化学的ケミカルスペースを自動的に探索し、蓄積、提供します。探索計算は分散処理化やスーパーコンピュータの利用により、高速化します。

埋蔵分子・反応のさらなる発見

これまで3年のプロジェクト期間に、すでに埋蔵分子や埋蔵反応が続々と見つかってきています。解析ソフトウェア RMapViewには情報科学の技術が種々搭載されていますが、これをより充実させ、さらなる発見を目指します。

埋蔵分子・反応の実験による実証

発見される埋蔵分子・反応は、量子化学の理論的には実証されたものです。これを実験的にも実証することで、実用化に向けて大きく前進します。



大学共同利用機関法人

情報・システム研究機構

Research Organization of Information and Systems