

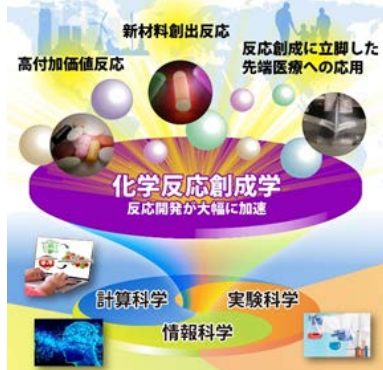


拠点長  
前田 理

コンピュータ上で仮想的な力で操作し、疑似的に化学反応を引き起こすことで、反応経路を自動的に見つけ出すことを可能とした。計算に基づく化学反応の本質の解明と、情報学的手法による化学反応の持つ複雑さに対する理解、実験的な実証とフィードバックを通じて化学反応の自在設計を目指す。

## 目標

計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合により、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な化学反応を、新たに複雑なネットワークとして理解し、自在に制御することを目指す。新しい化学反応の開発の難しさは物質科学全体のボトルネックとなっている。そこで量子化学計算による最新の反応経路探索と、情報科学との連携、実験科学による実証で、化学反応を本質的に理解し、新しい反応を合理的かつ大幅に効率よく開発する。これを可能にする学問領域「化学反応創成学」を確立し、今後人類が必要とする化学反応や新材料を創出する。



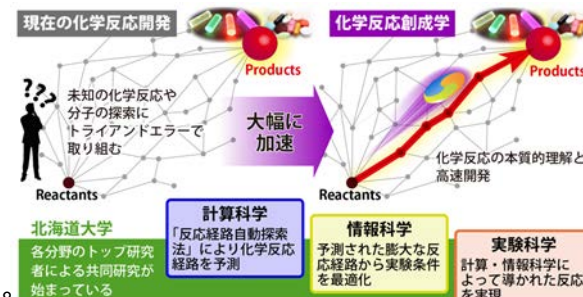
## 特徴

- 計算科学・情報科学・実験科学の三分野融合を行い、人類存続に必要な新しい化学反応を理解し、効率よく開発する新分野「化学反応創成学」を構築する。
- 国際共同研究環境整備と世界スケールの高度人材育成の戦略的仕組み「MANABIYA (学び舎) システム」を構築し、国内外の研究協力拠点との連携体制を確立する。
- 新大学院「化学反応創成学院」の設立を軸に大学の組織改革を実行する。

## 研究内容

本拠点では、反応経路自動探索により化学反応経路ネットワークを算出し、情報科学によって、実験的に検討する意味のある情報を抽出し実験条件を絞り込み化学反応の開発速度を大幅に向上させる。実験科学のデータを、情報科学を通じて計算科学へとフィードバックすることにより、三分野が一体となって化学反応の高度なデザインと迅速開発を実現する。

1. 社会に有用な高付加価値反応を設計し創出する。
2. 発光性材料、力学応答材料など新材料を化学反応に基づき創出する。
3. 生体内反応など複雑系の化学反応創成に立脚した先端医療応用を実施する。



## 連携

**MANABIYA (学び舎) システム**：国内外連携拠点の若手研究者や学生が本拠点に3か月程度滞在し、共同研究を通して新しい反応開発手法を習得し、それぞれの研究者が、将来に渡って活用する。



10年後には、世界中のトップ研究者から若手研究者が所属する数百人が参画する巨大ネットワークが完成し、新分野の更なる発展を支える。