

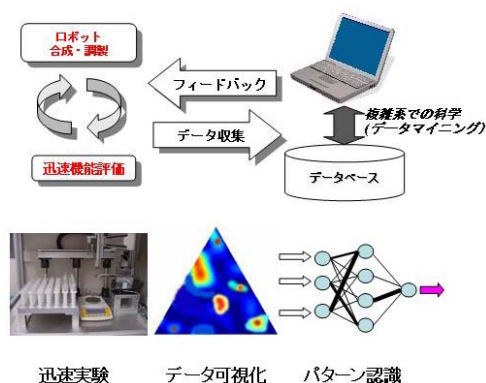
ディビジョン番号	18
ディビジョン名	環境・安全化学・グリーンケミストリー・サステイナブルテクノロジー

大項目	2. グリーンケミストリー
中項目	2-1. 新規反応
小項目	2-1-9. コンビナトリアル手法

概要（200字以内）

コンビナトリアル手法は組合せの概念に基づき設計される一連の物質群を、迅速実験手法を用いて、網羅的に合成・調製し、性能評価を行い目的とする機能を持つ物質を素早く見つけ出そうとする手法である。本手法では系統的なデータが多数得られるため、緻密なデータベースを作成することが出来る。種々の化学反応に共通する素反応に対するデータベースの作成・整理、および計算科学を利用した理解を進めることにより機能性物質の迅速探索が可能となる。

組合せ手法による複雑系での機能性物質の高効率探索



現状と最前線

より快適かつ便利な生活を求めて、今後も新たな機能性物質が次々と生み出されると考えられる。グリーンケミストリーの観点から見れば、これらの物質には自身に環境適合性が求められるだけでなく、それらの生産過程においても副生物を作らないことやエネルギー的に無駄がないことが求められる。このような状況では、機能性物質の中でも特に触媒の開発が速やかに行われる必要がある。これまでの触媒開発は、主に研究者の経験と勘に頼っており、新たな触媒を開発するために多くの時間が費やされることが多かった。世の中からの高い要求に速やかに応えるためには、勘と経験の比重の少ない新しい触媒設計・開発手法が必要である。このような背景から、コンビナトリアル手法を用いた触媒探索が注目を集めている。コンビナトリアル手法の触媒開発への導入は、1990年代後半から始まった。当初は、従来の実験を加速するための迅速実験手法に関する報告が多くなされたが、最近では、主に本手法を用いていかに効率よく触媒を見出すか、あるいは複数の因子が絡むため、限られた実験数では明らかにすることが難しかった新しい法則を見出すための方法論に関する議論が中心になってきている。迅速実験を行う際には、これまでと比べてたくさんの候補物質を扱うが、これらから得られたデータを異なる研究グループが相互に利用できる、あるいは、データのみならず試料そのものも相互利用できる仕組みが必要であるとの認識から試料管理ならびにデータ管理のための方法論に関しても活発な議論がなされている。

効率よく候補物質を絞り込むための手法としては、遺伝的アルゴリズムをはじめとした進化戦略に基づく最適化手法がよく用いられている。これらの手法では、主に触媒組成の最適化に重点が置かれるが、触媒の活性は組成のみならずその物理的な構造、反応条件などにも大きく依存する。また、経時的な性能変化が見られる場合も多く長時間の評価試験も欠かせない。これらのパラメータの予測も含めた最適化手法の開発が望まれている。この問題を解決するためには、目的の触媒反応を素反応過程に分解し、それぞれの素反応に対して個々の試料がどのような反応性を示すのかを調べることも有効であると考えられる。同時に、コンビナトリアル手法を従来の触媒研究に用いられていた表面科学の手法や各種スペクトルの利用、第一原理計算をはじめとする理論科学との融合を図ることも重要と考えられる。これらの手法を行う上でどうしても迅速化できない部分に関しては、実験計画法を用いて合理的に試験数を減らすなどの工夫が必要になるものと思われる。

得られたデータの解析には、以前は統計学的な手法がよく用いられてきた。これらは現在でも十分に有効ではあるが、多元系を扱う場合には新たな解析手法の導入も必要である。データを二次元的に可視化し、各パラメータ間の相関を調べるための手段としてホログラフィックリサーチストラテジーという手法が報告されている。これらの従来手法や可視化手法がカバーし切れない部分に関しては、多成分間の相互作用をうまく扱うことが可能なニューラルネットワークを用いた解析が報告されている。最近では、ニューラルネットワークの過学習に陥りやすいといった欠点を補うために、サポートベクターマシーンと呼ばれる手法も導入されつつある。これらの手法は主にパターン認識に利用されてきた方法であり、今後、新たなパターン認識手法が本分野に導入されてくる可能性が高いと思われる。

文献：

高橋孝志, 植田充美, 鯉沼秀臣編, コンビナトリアルサイエンスの新展開, シーエムシー, 日本化学会編, 第5版 実験化学講座, 25巻, 3章, 丸善.
鯉沼秀臣, 川崎雅司監修, コンビナトリアルテクノロジー, 丸善.

将来予測と方向性

これまで複雑すぎて手が出せなかった多成分相互作用系での材料・物質科学の発展に寄与すると考えられる。

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

各研究グループにより異なっている試料形状ならびに得られたデータを整理するためのフォーマットの統一による研究結果ならびに試料ライブラリの共通利用

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

実データベースの拡充による性能予測精度の向上ならびにそれに伴う仮想実験 (*in silico* screening) の実現

キーワード

迅速実験手法・インフォマティクス・マテリオミクス・計算科学

(執筆者：山田 裕介、小林 哲彦)