

# 遷移状態計算を利用して「化学ベンチャー企業」創出へ

山口大学提供  
作成日 2016年2月19日  
更新日

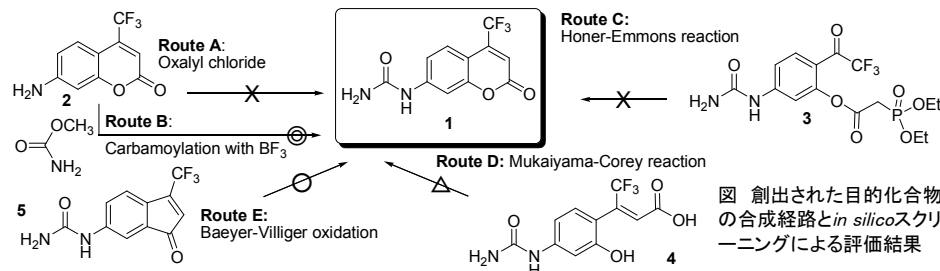


<b>研究者氏名</b> ほり けんじ 堀 憲次	<b>所属機関</b> 山口大学理工学研究科	<b>関連キーワード(複数可)</b> 計算化学、遷移状態データベース、合成経路開発
<b>主な研究テーマ</b> ・遷移状態データベースの構築とそれを利用した「非経験的」合成経路設計 ・QM/MC/FEP法により溶媒効果を考慮した反応経路解析		<b>主な採択課題</b> ・基盤研究(C) 平成14~15年度 (配分総額: 3,900千円) 「計算化学と情報化学を融合した合成経路開発システムの開発と検証」 ・基盤研究(C) 平成19~20年度 (配分総額: 4,680千円) 「遷移状態データベースを用いた合成経路開発システムの構築」

## ① 科研費による研究成果

「量子化学計算」に基づいた化学反応の研究は、その適用範囲の狭さから、産業応用への可能性は低いとされてきた。しかしながら、安価で速いコンピュータが現れたことにより、優れた有機合成や触媒反応の特徴が、遷移状態探索(TS)や極限的反應座標計算により短時間で解明できるようになった。この特徴を利用すれば、「**実験を行っていない反応**」についても、TSの存在や活性化障壁の高さを評価できる。この特徴を生かして、有機化学者や合成経路設計システムが考え出した合成反応を、実際の実験ではなく「**コンピュータシミュレーション**」によりふるい分ける方法 (*in silico*スクリーニング)の研究を行ってきた。

この手法の実用性をさらに高める目的で、TS構造等の反応情報をまとめたデータベースや、それを活用した人名反応データベースを作成している。さらに、化学反応の研究には欠かすことができない、溶媒効果を理論的に評価にする計算方法(QM/MC/FEP法)の開発を行った。この方法は、 $\pm 2.0$  kcal/mol以内で実験値を再現する。



## ② 当初予想していなかった意外な展開

・「理論計算」を用いた *in silico*スクリーニング手法は、有機合成化学で実施されている新規化合物の合成手法の開発に有用であると認められ、JSTの「ベンチャー創出支援事業」に採択された。3年間の研究の後に、ケミカルベンチャー(株)TS Technologyが設立され、昨年度の売り上げが5000万円を超える活動を行っている。



・研究を行うなかで、データ数を大幅に拡充したTSDBと化学構造探索機能を連携させた類似反応検索を組み合わせると、理論計算のみを用いた「**非経験的合成経路創出**」が可能とのアイデアを得た。現在、それを実現するための研究を行っている。

## ③ 今後期待される波及効果、社会への還元など

・化学反応解析技術やここで示した研究成果を用いて、卒業生によりケミカルベンチャー(株)TS Technologyが2009年6月に設立された。同社は、計算化学、情報化学を通じて、化学関連企業のニーズに応えるケミカルイノベーション技術を提供しており、今後、更に発展することが期待されている。