

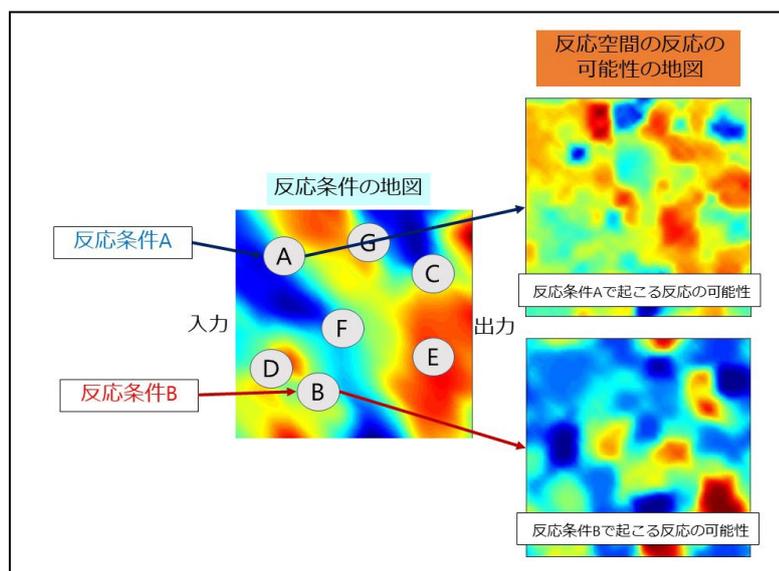
# E1-11

## 有機合成におけるデータ駆動が目指す設計と創造の世界 ～Reaction Space～

船津公人 (奈良先端大)

有機反応は、反応物や反応場の特徴に応じて変幻自在に進む興味深いものである。そして、そこになにかの規則があるとして、これまで Ingold、Hammett、湯川一都野、Winstein、Schleyer などの多くの物理有機化学者によって詳細な反応機構研究が進められてきた。例えば直線自由エネルギー関係測に基づく構造反応性相関、置換基効果、溶媒効果などである。しかし、このような研究を踏まえてもなお、新しい反応発見や反応経路創出につながる、様々な反応物構造を対象とした一般的な反応表現はまだ確立はしていない。

一方で、有機化合物を構造記述子によって多次元ベクトルとして表現することで、大量の構造がどのような関係で化学空間(Chemical Space)中に分布しているかを2次元平面上で可視化することが行われている。有機反応はこの化学空間中の化合物間の現象であり、見かけ上は反応物と生成物の構造記述子ベクトル間の変化と考えることができる。こう考えると、反応物と生成物の反応部位とその周辺構造を例えば物理化学的構造記述子ベクトルを使って表現し、それぞれの記述子ベクトルの差分ベクトルを反応表現としてみなすことができる。面白いことに、この差分ベクトルを用いた高次元空間の様子を2次元平面上に写像するだけでも反応の分類が可能なが既に分かっている<sup>1)</sup>。これは構造変化をもとにした反応の地図(Reaction Space)と言える。とはいえ、反応の生起は構造自体だけではなく、溶媒や触媒などの反応条件に影響される。この反応条件の地図(図・中)を先程の反応空間中の各構造変化を表す差分ベクトルとリンクしておくことで、各反応条件で可能性のある反応を表す地図を示すことができる(図・右)。このような多層的な地図を作成し、つなぎ合わせることで、まだ見ぬ反応の発見の手掛かりになるかもしれない。



1) H. Satoh, O. Sacher, T. Nakata, J. Gasteiger, K. Funatsu: Classification of organic Reactions: Similarity of reactions Based on Changes in the Electronic Features of Oxygen Atoms at the Reaction Sites, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 38, 210-219 (1998).

### PROFILE

船津 公人 (奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター 特任教授)

①1983年3月九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了理学博士・2004年4月東京大学工学系研究科教授(2021年3月定年退職同大名誉教授)、2021年4月奈良先端大特任教授②データ駆動型化学、マテリアルズインフォマティクス、プロセスインフォマティクス③アメリカ化学会 Herman Skolnik Award(2019年8月)、日本化学会学術賞(2021年3月)④ケモインフォマティクス・丸善(2005年)、ソフトセンサー入門～基礎から実用的研究例まで・コロナ社(2014年)、実践マテリアルズインフォマティクス・近代科学社(2020年)、詳解マテリアルズインフォマティクス・近代科学社(2021年)⑤[http://www-dsc.naist.jp/dsc\\_jp/](http://www-dsc.naist.jp/dsc_jp/)