

令和5年11月1日発行(毎月1回1日発行) 通巻870号 昭和15年4月18日第3種郵便物認可 CODEN:KAKYAU ISSN 0451-1964

C H E M I S T R Y

化学

NOVEMBER
2023
Vol.78

11

研究物語 ● Research story

ラジカルが拓く 未踏の化学反応

解説 ● Research article

ナノ粒子をより安全に
設計するための新手法

解説 ● Research article

大気圧プラズマを用いた
植物のゲノム編集



物質は組み合わせることで、千差万別の彩(いろどり)を織りなす。自然に規定された不思議を解き明かし、活用することで化学は進歩を遂げてきた。今そこへ、AIに代表されるデジタル技術がもち込まれ、私たちの化学する営みに変動が起きはじめた。ここでは昨今注目される「研究の自動化」への着眼を述べたい。海外では“Autonomous Science”の言葉で語られる。サイエンスは自動になるのだろうか？

かくいう筆者も20年前、大学研究室でフラスコを振り、何度やっても目的の物質が合成できない経験をした。ノートに書いた反応式では合成できるはずなのに、実際には反応は進まない。面倒な合成ステップを繰り返したあとの構造分析で落胆した。最後まで描いた物質は合成できなかったし、その後誰かが合成に成功したのかどうか、わからない。卒業後、そんなことを調べようとする余裕もなく社会に揉まれるうちに、そもそも自分は何をなぜ、どうやってつくりたかったのかという記憶にも霞がかかってしまった。

現代の化学では当然のこととして、まず目的の機能や物性を示すだろう物質構造を仮説として設計し、計算化学によってシミュレーションをすることから始まる。そのうえでようやく条件や手順を選択して実験へ移り、仮説を実験結果との比較から検証する。検証の結果、仮説どおりの結果が得られないか、あるいは幸運にも人類が手にしたことのない新たな知を獲得する。できることなら応用・実用しようとして、再び次なる仮説推論へと移る。これが研究のサイクルだが、ここに二つの変動が起きている。

変動の一つは仮説設計にある。従来は文献を参考に思考によって仮説を考案してきたが、私たちの思考範囲には限界や思い込みともいえる認知バイアスがある。ゆえに、本来存在するはずの広大な仮説空間に思考を届かせることができない。たとえば多元系で複雑な階層構造をもつ物質では、取りうる組合せは数十億通りにもなり、人間の脳で



変わりゆく化学する営み

すべてを思考することは困難である。そこでAIを使い、過去に積み上げられた知識を機械に読み込ませて、膨大なデータ空間からディープラーニングなどを駆使して予測させる。人間の思考の及ばない範囲の仮説空間をも対象に、より最適と機械が推定する仮説を手にするのである。

変動の二つ目は、実験検証の過程にある。いつかの筆者が失敗を繰り返した実験は数時間かかるため1日にせいぜい2回できる程度、それ以上は弱い心が折れてしまう。条件を振って1万回の実験をしたらできたのかもしれないが、現実的に不可能。しかし今ここに、めげない正確なロボティクスを導入し、何回でも緻密に効率よく実験し、合成を実現してしまおうとする時代に入った。AIによる仮説推論と組み合わせることで、目的にたどり着くまでの実験試行回数を減らし、どのような条件にすればよいかを予測するプロセスインフォマティクスの開発が進んでいる。サンプル調整から実験、その後の計測分析装置にかけ一連の流れをベルトコンベヤのように接続し、測定結果の解析も再びAIが担当する。これがAutonomous Scienceだ。

ここで論争となる問いは、「私たちの化学の営みはどこにあるのか」だ。研究者はいらないのか、といった極論もある。しかしAIは、何を解き明かしたいのか、何がほしいかの好奇心をもたない。

知の用意されていない未知の世界へと向かう好奇心と情熱は、化学の営みの拠りどころではないか。人間が好奇心とがっちりタッグを組んでAI・ロボティクスを自在に使いこなせるようになるとき、私たちの想像の先にある新物質を発見し、複雑化する世界の課題に解決策を提示できるに違いない。化学する喜びの進化に期待したい。

ながの・としき ● 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター 総括ユニットリーダー・研究監、1979年千葉県生まれ、2003年学習院大学理学部化学科卒業、2013年グロービス経営大学院経営研究科修士課程修了、MBA、＜専門＞研究開発戦略論