

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 反応経路自動探索法を基盤とする化学反応の理論設計技術
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

前田 理（北海道大学大学院理学研究院 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている
-------------

○総合評価コメント

研究代表者は世界ではじめて、計算者の直感や経験をほとんど用いることなく反応経路を計算する、人工力誘起反応（Artificial force induced reaction: AFIR）法と呼ばれる、独自の反応経路自動探索法を高度化して、反応設計を支援するツールとして完成させた。本研究では、この世界初の人工力誘起反応法を汎用化し、反応設計技術として実用化することを目指して研究・開発を進めた。

次の8項目について研究を実施した結果、全てに対して必要なプログラム実装完了し、その実用化を達成した。即ち、次の6対象の理論設計技術 1：有機金属触媒、有機触媒、2：光機能性分子、3：生合成反応、生合成模倣反応、4：表面触媒、表面担持触媒、5：クラスター、結晶、高分子鎖の構造、6：望みの配位構造を有する分子並びに7：高度計算機の利用に向けたプログラムの超並列化、8：CREST「分子技術」への理論的サポートである。その成果により、昨年度開始の世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)に研究代表者が拠点長を務める「化学反応創成研究拠点」に採択された。

今後も実験へのシームレスなフィードバックを行える環境構築や情報技術を取り入れた、反応予測システムなど、「予測し発見する化学」に向けたさらなる新展開で、採択が決まった ERATO などを駆使して一層の活躍を期待したい。