化学と情報科学の融合—コンビナトリアルケミストリーとケムインフォーマティックス—

吉 川 暹

前回の内容は、いわば化学の情報化への予感であり、System-availability というキーワードで、機能材料開発における、システム的とらえ方の重要性を指摘した。それは、言い換えれば、機能材料開発におけるマルチタスク化をどう解決するのかという課題でもある。

その解答は、科学と情報の融合の中に見いだすことができるというのが結論であり、その流れは、多くの分野で現実のものとなりつつある。

とりわけ、生医学の分野では、このような状況が、急速に進み、今や、医薬開発では、ゲノム創薬が必須となっており、ゲノム解析をベースとした薬の *de-novo* 設計が現実のものとなりつつある。さらに、この方法は、生物科学の全分野に広がり、ゲノム情報と一体化した、bio-informatics という、まったくウェットプロセスを伴わない、生物学の領域があらたに生まれるに至った。

しかし、残念ながら、高分子など化学の多くの領域では、未だ、情報科学との接点は非常に薄い。1991年に生まれたコンビナトリアルケミストリーは、これを打ち破る方法論として期待される。ここ5年、この分野では世界中に学会ができ、アメリカを中心にベンチャービジネスの格好のターゲットとなっている。

しかし、いまだに、日本では化学者の間で市民権を得ておらず、このままでは、世界から大きく取り残されるのではなかろうか。可能なライブラリーの中から最適化合物を

見いだす手法としてのコンビナトリアルケミストリーというコンセプトは、単なる合成手法にとどまることなく、ケムインフォーマティックス（化学情報科学）という新たな領域を生み出すものでもある。重要なことは、新産業の方法論となるあらたな化学技術としてとらえ、異分野の研究者・技術者との連携によるトータルなエンジニアリングとして仕上げていくことである。

現在、筆者は「固相精密合成法によるケミカルライブラリーの構築を基盤とする超機能材料の創製と評価に関する研究」というわが国初のコンビケムプロジェクト（遠藤 剛先生をリーダーとする科学技術振興調整費総合研究のプロジェクト研究）を進め、大学では「コンビケムとケムインフォーマティックス」の講義を行っている。教科書もない新しい領域だが、材料分野への応用を中心に、この分野に少しでも寄与できればと願っている。

YOSHIKAWA, Susumu 京都大学エネルギー理工学研究所・教授、工学博士。1973年 京都大学大学院博士課程修了。専門は分子集合体設計

Combinatorial Chemistry and Chem-informatics

〈1982年1月号掲載〉

次代は System-availability に向けて

1964年にニュー・サイエンティスト誌が行った「今後20年間の発展」という特集の中で、ノーベル賞を受賞したばかりのJulio Natta教授が「巨大分子の時代」という一文を寄せ、高分子産業の非線型的な飛躍を予測している。

ほぼ20年たった現在、彼の予測はおおむね実現し、今や高分子産業が化学工業の半分を占める時代となった。これを見ると、予測という意味では20年という尺度はかなり現実性の高いもので、20年後に社会的に重要となるようなものは現在すでに研究室の中か、あるいはアイデアとしてこの世の中に存在するものと想定することができよう（ちなみに同特集の中でA. R. Todd卿は遺伝子組み換えの実現性を示唆している）。言い換えれば、予測とは現在の内に未来の萌芽を窺うことである。

このような見方からすると、高分子の将来はすでに言い古された観はあるが「高機能な分子システムの形成」という方向に展

開されていくのだろうと思う。少し具体的な分野で考えてみると、たとえば医用高分子材料の開発は、いまだ試行錯誤が現状で、その開発の指標もBio-compatibilityというパッシブなものとなっている。しかしながら実際の生体分子との相互作用はきわめて特異的であり凝固系・免疫系といった生体系のそれぞれに対応したアクティブな機能が付与されなければならない。このような要求指標はBio-availabilityといってもよい。つまり分子サイズの制御があつてはじめて生体側も利用するというわけである。このような要求指標は生物系に限らず、電子系など、システムに高分子を適合させようとするれば常につきまとう課題であり、System-availabilityという共通の見方ができる。新物質が新物性に先行するという過去の例からすると、この要求に対する最大の隘路は高分子合成技術ではなかろうか。現状の合成技術はまるでNattaのいう巨大分子の範疇のうちに閉じ込めら

れたかのようなのである。生化学の領域ではペプチドタイプライター^{*1}の開発やDNA合成がタイムテーブルにのっているという。今こそ合成技術におけるブレーク・スルーが必要である。生体機能や生化学のプロセスの利用はそのひとつの方向であろう。

選択的合成技術が確立されればやがては多様な機能性高分子がCAD (Computer-aided Design) を用いて設計され、CAM (Computer-aided Manufacture) によってたちどころに製造されてでてくるという時代がくるかもしれない。その頃、学会では高分子設計、高分子情報、高分子制御、高分子素子といった諸分野が増設され、Chemico-availabilityを指標とした材料開発が中心となっているのではなかろうか。

^{*1} 任意のアミノ酸配列をもつポリペプチド鎖を合成しうるようなバイオリクター