

新 科 論

化粧品原料にも使われる安価な酸化亜鉛で青色発光ダイオードが作れる――。東北大金属材料研究所の川崎雅司教授らが04年12月に発表した世界初の成果は、産業界から熱い視線を集めた。

理論的には明るい青色発光が予想されていた酸化亜鉛だが、結晶作りが難しかった。多くの科学者が挑んだ競争で川崎さんらが一番乗りを果たした背景には、もの作りの革命とも言われる「コンビナトリアル（組み合わせ）技術」の力があつた。

新物質の探索は、宝探しに似ている。勘や経験にもとづき、一つひとつ作っては調べ

る試行錯誤が欠かせなかった。そんな地道な職人技の世界

装置は、1センチ四方の基板の上

―Tのチカラ④

に、コンピュータと高速機械による物量作戦を持ち込んだのがコンビ技術だ。おまかに狙いをつければ、あとは網羅的に多種類を一気に作り、測定する。

川崎さんらが開発した合成装置は、1センチ四方の基板の上

に、組成や反応温度などを微妙に変えた100種類の試料を一度に作れる。できた試料の性質をまとめて調べ、最適な条件を絞り込む。酸化亜鉛では、結晶作りの最適温度を突き止めるのに役立つ。

これは一例にすぎない。膨大な量のデータの中には、予期せぬ大発見が埋もれているかもしれない。コンビ技術

に、組成や反応温度などを微妙に変えた100種類の試料を一度に作れる。できた試料の性質をまとめて調べ、最適な条件を絞り込む。酸化亜鉛では、結晶作りの最適温度を突き止めるのに役立つ。

物量作戦で素早く宝探し

は、情報処理技術の高度化でさらに威力を増す。

物質・材料研究機構や東京

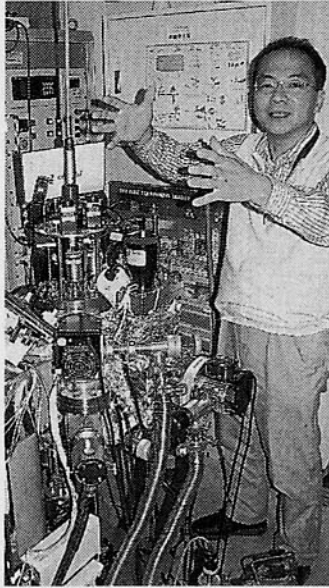
大などは、測定結果を自動的にデータベースに蓄積したり、データをわかりやすく表示させたりするシステム開発を進めている。大量の情報から人間では読み取れない規則性を見いだす「データマイニング（探掘）」技術もとりい

「んです」と訴える。

コンビ技術が一早く普及したのが、医薬品開発の分野だ。一つの新薬を開発するには、1万個以上の候補化合物が必要だとされる。伝統的な有機合成手法で研究者1人が作れる新規化合物は年に数十個程度。人海戦術では激しい

国際競争に勝ち残れない。高橋孝志・東京工業大教授（有機合成化学）は、コンビ技術をシミュレーションによる分子設計と組み合わせ、新薬などの開発を一層加速しようとしている。大学には職人芸的な合成の腕を重んじる人が多く、計算科学者との連携はまだ進んでいない。「これからは化学のセンスだけでなく、機械もコンピュータも扱えないといけない。コンビ技術を核にして、異分野の人と融合していくしかない」

（安田朋起）



コンビナトリアル合成装置（手前）のしくみを説明する川崎雅司さん（仙台市青葉区の東北大で）

科学