

E1-05 AI 支援による反応制御の深化

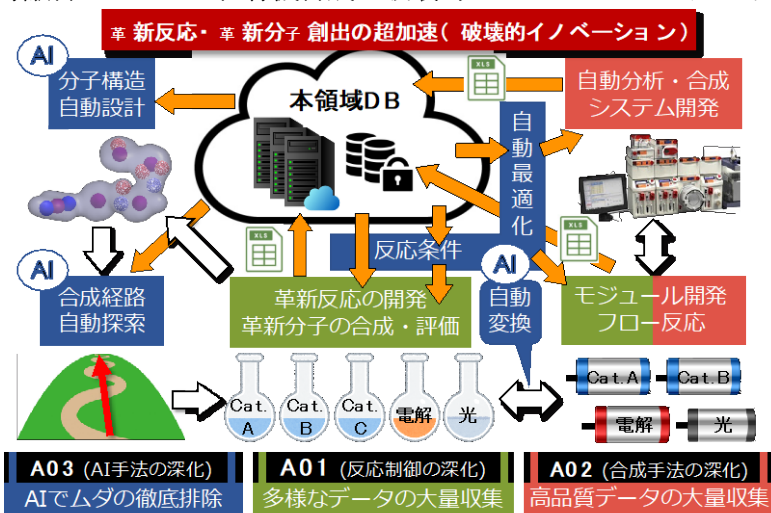
大嶋孝志 (九大院薬)

2021年9月に発足した学術変革領域研究(A)「デジタル有機合成」¹⁾は、有機合成(実験科学)とデータサイエンス(情報科学)の異分野融合²⁾によって、有機合成に破壊的イノベーションを起こすことを目的として活動している。本領域研究の肝は、有機化学の機械学習に最適化した独自のデータベース(DB)を構築することであり、このDBに蓄積したデータを用いて、様々な機械学習(ML)手法を使った研究を展開する。領域はA01~03班で組織されており、本講演ではA01班(AI支援による反応制御の深化)の取り組みについて紹介したい。

A01班は反応開発・合成化学などの専門家から構成され、主にバッチ反応で、多種多様な有機化学反応を行い、多様性を担保した実験データを領域DBに提供する。

また、革新反応の開発に取り組む。現代有機合成化学においては、立体-、位置-、化学-、基質選択性などのタイプの異なる選択性を高度に同時制御することが求められる。従来の選択性の制御法のほとんどは、基質と反応系の本来の性質に依存して発現する選択性を向上させる(図、左←中央)のものであった。本研究領域では、より高難度な選択性制御、すなわち、本質的な反応性を逆転させる革新的な反応(中央→右)

の開発に挑戦する。高難度選択性制御法の発掘の端緒として、まず、化学選択性³⁾に着目した官能基評価キットを用いた検討を行っている。具体的には、様々な官能基を有する官能基評価キットを共存させて反応を行うことで、主反応への官能基の影響(官能基共存性)などの情報を迅速かつ網羅的に収集することができる。得られたデータは領域のDBに集約し、MLによる新合成経路探索システムに反映させることで、従来は不可能と考えられるような保護基フリーの超短工程合成経路を、実現性を担保した状態で提案できると考えている。



1) <https://digi-tos.jp>

2) <https://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-24-t292-1.pdf>

3) N. A. Afagh, A. K. Yudin, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 262.

PROFILE

大嶋孝志 (九州大学大学院薬学研究院 主幹教授)

①H08 東大学院博士課程修了、H08 大塚製薬株式会社入社、H09 米国スクリップス研究所・博士研究員、H11 東大院薬・助手、H17 阪大院基礎工・助教授(後に准教授)、H22 九大院薬・教授、R03 九大院薬・主幹教授、②有機合成化学・触媒化学・創薬化学・デジタル有機合成、③H22 グリーン・サステイナブル ケミストリー賞文部科学大臣賞、H26 日本薬学会 学術振興賞、H30 有機合成化学協会 企業冠賞、④化学を学ぶ学生のためのレポート&論文マスターガイド、⑤「サボる」と「楽しむ」は全く異なります。将来、楽しむことができる PF 作りに全力で取り組みます。