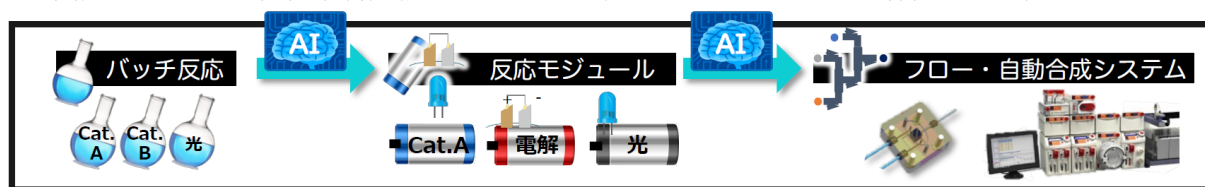


E1-06 AI 支援による合成手法の深化

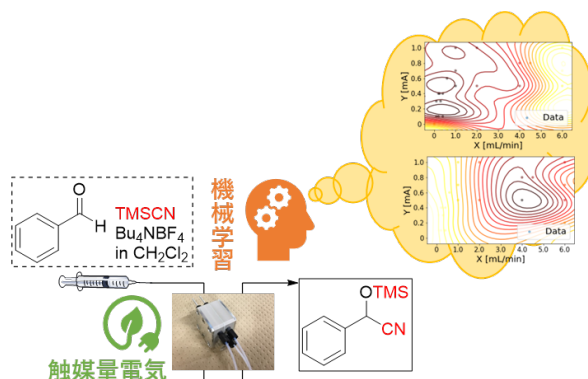
菅 誠治 (岡山大院自然)

学術変革領域「デジタル有機合成」がめざす、有機合成のデジタル化を推進するためには、機械学習に必要な信頼性の高いデータを迅速かつ高精度に収集する手法を深化させることが極めて重要である。A02 班はデバイスの深化による有機合成の自動装置化を推進し、テクノロジーをサイエンスに昇華する新学理の創出とその応用を中心課題に据える。具体的には、①多様な有機合成反応に適したフロー型の自動合成装置や自動合成ロボットなどを用い、実験者の環境や技術に依存しない全実験データを迅速に収集するシステムの構築、②化学工学的な視点に立った、フロー合成プロセスの設計・計測・制御、自動最適化のためのプロセスデータ解析・制御システムの開発とバッチ反応のフロー反応への変換法の開発、③バッチ反応→反応コードモジュール→フロー反応→自律的な条件最適化→自動合成プロセス（多段階分子変換）を構築し、反応コードモジュールの組み合わせを変えることによって同じ原料からでも多様な化合物ライブラリーを創成する自動合成法の展開、などを目標とし、新反応開発の A01 班、機械学習支援の A03 班と連携しながら、デジタル有機合成を推進したい。



講演では、A02 班の研究内容をご紹介するとともに、これまでに A02 班で行ってきた機械学習支援によるフロー反応最適化の例についても数例ご紹介したい¹⁾⁻³⁾。たとえば、A02 班の滝澤らと我々の研究グループは、ガウス過程回帰により触媒量の電気量で駆動する TMSCN のカルボニル化合物への付加反応の反応条件最適化を試み、収率の最適化と単位時間あたりの生産量の最大化のパラメータを迅速に決定することができた²⁾。

デバイスの深化による有機合成の自動化と機械学習との融合は、テクノロジーとしてのフロー化学や自動合成を高次元のサイエンスへと誘い、有機合成に新パラダイムを提供することができると期待している。



- 1) M. Kondo, H. D. P. Wathsala, M. Sako, H. Hanatani, K. Ishikawa, S. Hara, T. Takaai, T. Washio, S. Takizawa, H. Sasai, *Chem. Commun.* **2020**, 56, 1259.
- 2) E. Sato, M. Fujii, H. Tanaka, K. Mitsudo, M. Konodo, S. Takizawa, H. Sasai, T. Washio, K. Ishikawa, S. Suga, *J. Org. Chem.* **2021**, 86, 16035.
- 3) Y. Naito, M. Konodo, Y. Nakamura, N. Shida, K. Ishikawa, T. Washio, S. Takizawa, M. Atobe, *Chem. Commun.* **2022**, 58, 3893.

PROFILE

菅 誠治 (岡山大学学術研究院自然科学学域 教授)

- ①H06 名大院博士後期課程満了、H07 オックスフォード大学博士研究員 (日本学術振興会海外特別研究員)、H08 京大院工・助手、H11 同・講師、H15 同・助教授、H20 岡山大院自然・教授、②有機合成化学・有機電子移動化学・フロー合成、③H15 有機合成化学協会奨励賞、H16 有機電子移動化学協会奨励賞、H17BCSJ 賞、H24 長瀬研究振興賞、H28 岡山工学振興会・内山勇三科学技術賞、⑤「活性」にこだわった有機反応の開発に取り組んでいます。働き方改革にもこだわりたいです。