

DX 有機合成の拓く未来

(九大院薬¹) ○大嶋 孝志¹

The future of DX organic synthesis (¹Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Kyushu University)○Takashi Ohshima¹

Grant-in-Aid for Transformative Research Areas (A) “Digitalization-driven Transformative Organic Synthesis” was launched. This Research Area aims to build our own digitization platform (PF) for digital organic synthesis (interdisciplinary fusion of experimental and information science) that leads to disruptive innovation in organic synthesis. Three Research Groups A01 (deepening reaction control with AI support), A02 (deepening synthetic methods with AI support), and A03 (deepening AI methods to support organic synthesis) will work together to conduct this research. We will develop three automated systems for (1) reaction conditions optimization, (2) synthetic pathway search, and (3) molecular design of highly complex molecules to demonstrate their effectiveness in discovering innovative basic reactions. We will also demonstrate the industrial utility of this PF by (4) developing batch-to-flow conversion methods, (5) constructing automated synthesis systems, and (6) applying it in multi-step molecular conversion reactions.

Keywords : Digi-TOS; Artificial Intelligence; Machine Learning; Flow Reaction; Auto-Synthesis

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する、学術変革領域研究 (A) 「デジタル有機合成」が2021年9月に発足しました。本領域は、A01 班 (AI 支援による反応制御の深化)、A02 班 (AI 支援による合成手法の深化)、A03 班 (有機合成を支援する AI 手法

の深化) の3班体制で、①反応条件最適化、②合成経路探索、③高次複雑系分子設計の3つの自動化システムを開発し、革新的な基礎反応の発掘や開発効率の超加速化を実証するとともに、④バッチ→フロー変換法の開発、⑤自動合成システムを構築し、⑥多段階分子変換反応に展開することで産業的実用性を示すことを計画しています。本講演では、本領域研究の概要と研究計画、半年間の活動内容、そして将来的に目指しているものなどを紹介したいと思います。

