

未来社会創造事業 探索加速型  
「共通基盤」領域  
年次報告書(探索研究期間)

令和2年度 研究開発年次報告書
--------------------

令和2年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：松原 誠二郎]

[京都大学工学研究科・教授]

[研究開発課題名：簡素型 AI 支援有機合成システムによる有機分子工学の革新]

実施期間：令和2年11月1日～令和3年3月31日

## §1. 研究開発実施体制

### (1)「京大」グループ(京都大学)

① 研究開発代表者:松原誠二郎 (京都大学工学研究科、教授)

#### ② 研究項目

- ・自動合成経路解析システムの開発
- ・自動反応条件設定システムの開発
- ・自動合成装置の試作

### (2)「NIMS」グループ(国立研究開発法人物質・材料研究機構)

① 主たる共同研究者:袖山慶太郎 (国立研究開発法人物質・材料研究機構、チームリーダー)

#### ② 研究項目

- ・MI によるマグネシウム二次電池電解液の設計

### (3)「産総研」グループ(国立研究開発法人産業技術研究所)

① 主たる共同研究者:矢田 陽 (国立研究開発法人産業技術研究所、主任研究員)

#### ② 研究項目

- ・有機合成単反応の機械学習による反応適用範囲の数値化

### (4)「東農工大」グループ(東京農工大学・東北大学)

① 主たる共同研究者:山下 善之 (国立大学法人東京農工大学工学研究院、教授)

#### ② 研究項目

- ・反応条件設定システムのフロー法への自動条件設定法の開発

## §2. 研究開発実施の概要

2020 年度11月より着手した「簡素型 AI 支援有機合成システム」は、1) 自動合成経路解析、2) 自動反応条件設定、3) 自動合成装置の三要素が連動することにより実現する。今年度は、1) に関しては、既存のシステム Synthia と Scifinder-n の2システムを導入し、その可能性を検討した。2)の自動反応条件設定は、これまで適切なシステムの開発が十分でない。新たに、モレキュラー・マッピングの手法に基づいて、既存反応データを解析することにより、反応条件設定を求めるシステムの開発に着手している。3)の自動合成装置の開発においては、Cronin (グラスゴー大) が示した“Chemputor”を試作した。本装置は、従来の有機合成化学で用いる「フラスコ、分液ロート、エバポレーター」間の溶液移動を12台のシリンジポンプの組み合わせで制御し、反応開始・後処理・濃縮をデジタルデータのインプットにより行うものである。本研究においては、Cronin が Github において公開している制御プログラムをプログラミングの知識を持たない実験者が使用できるように、ビジュアルプロ

グラミングに書き換え、実験手順の入力が極めて容易にすることにより、運用入力面での障害を低くしている。本体は、Cronin•Chemputor の性能を十分再現できるものとなったが、実際に使用してみると、容器の洗浄や輸液管の取り回しに多くの改善すべき点があがって来ている。今後、シリンジポンプではなく、ダイヤフラムポンプの使用などが望ましいと結論づけている。また、本課題においては、NIMS グループのマテリアルインフォマティクス (MI) 手法により提案された分子群の実合成で概念検証を行いたいと考えている。これらの合成作業により、明らかになる問題点を解決していく予定にしている。