

未来社会創造事業 探索加速型探索研究
事後評価結果

1. 領域

「共通基盤」領域

2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

3. 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

4. 研究開発代表者名(機関名・役職は評価時点)

松原 誠二郎(京都大学大学院工学研究科 教授)

5. 評価結果

評点: S (特に優れている)

総評:

本研究開発課題は、マテリアルインフォマティクス(MI)で提案される分子構造式群に対して、それらの分子試料の自動合成を目指し、自動合成経路解析・自動反応条件設定・自動合成装置の連動からなる AI 支援有機合成システムを開発する事である。

探索研究期間では、近年大きな注目を集めている自動合成装置 Chemputer システムに比べ簡素化された自動合成システムを構築して簡便な運用を可能にし、さらに実験操作のプログラミングをビジュアルプログラミングとし、ハード・ソフトの操作性を大幅に向上させることができた。これを用いて、マグネシウム 2 次電池電解液用分子を題材に、MI による分子構造の提案に対し、データ駆動型の自動逆合成解析により合成の可否の判断およびルート検索を検討した。提示された分子合成経路に対して、順合成の反応条件を決定する必要があるが、当初想定していた機械学習はあまり精度を向上させる意味合いがなく、過去の反応例においてもっとも近い基質の条件、類似性をチェックして初期条件を選ぶことが適切であることを明らかにし、開発した自動合成装置で MI の提案分子を自動合成できることを実証するとともに、種々の新たな課題を明らかにしたことを高く評価する。

特に、試薬合成の在り方が大きなボトルネックであることを明らかにし、その方向性を示したことは、今後この分野を大きく進展させるための特筆すべき成果であると認められる。

今後は、目指す有機合成のパラダイムシフトの実現に向け、協力が不可欠な試薬メーカーとの綿密な連携のもとに研究開発を進めることを期待する。

以上