

自動精密有機合成を志向した 機械学習による反応条件最適化

ML-assisted Conditions Screening Toward Automated Organic Synthesis

研究分野
Department

機能物質化学
Synthetic Organic Chemistry

研究者
Researcher

滝澤 忍
S. Takizawa

キーワード
Keyword

フロー合成、電解合成、機械学習
flow synthesis, electrolytic synthesis, machine learning (ML)

応用分野
Application

ファインケミカルズ、医薬品、農薬、香料
fine chemicals, medicines, agrochemicals, perfumery

研究開発段階

基礎

実用化準備

応用化

背景

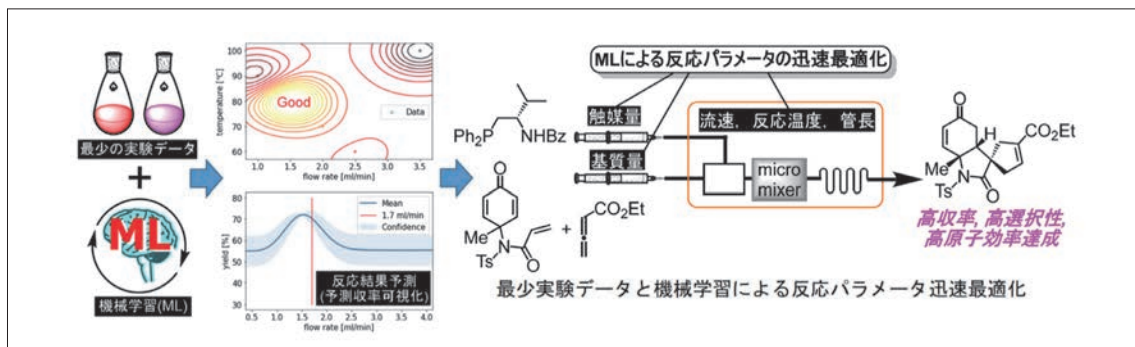
医薬原料等のファインケミカルズの安定供給は、人類の安全と快適な生活を維持するために重要です。ファインケミカルズのフロー・電解自動合成に向け、最少実験と実験計画をハイブリッドした**実践的機械学習を基盤とする反応プロセス**技術の革新を目指しています。

概要・特徴

反応支配因子の多くが連続パラメータであるフロー・電解反応の高品質かつ高い再現性を有する学習データを効率的に収集することで、膨大な数の学習データを必要とするAI・MLの常識を覆し、最少実験試行数にて反応開発を加速する実践的な反応条件自動最適化AI・MLを実現します。

技術内容

フロー・電解合成法は、「分子拡散や熱移動を精密に制御でき個々の操作が実験者の技術に依存しにくくデータ精度が高い」「反応温度・基質当量・溶液の混合速度などのパラメータを容易に変更できる」「コンピュータ制御による自動化が可能であり信頼性の高いデータを集積化できる」といった特徴を有します。本合成法は機械学習との親和性が極めて高いことから、有機分子触媒によるフロードミノ反応やケチミンの電解合成にガウス過程回帰やベイズ最適化を適用したところ、10回程度の実験試行から収率の可視化や複数の反応条件最適化が可能なることを実証しました。



社会への影響・期待される効果

- プロセスの省資源化・省エネルギー化
- 新規反応開発の加速化とその自動化

【論文 Paper】

- [1] Chem. Commun. 2020, 56, 1259. [4] Chem. Commun. 2022, 58, 3893.
 [2] Green Chem. 2021, 23, 5825. [5] Commun. Chem. 2022, 5, 148.
 [3] J. Org. Chem. 2021, 86, 16035. [6] Org. Process Res. Dev. 2023, in press, doi: 10.1021/acs.oprd.2c00267.