

医薬品および有機材料開発を加速する データ駆動型合成化学

Data-Driven Fine Organic Synthesis for Pharmaceutical and Material Development

研究分野

Department

精密分子創製化学
Data-Driven Organic Synthesis

研究者

Researcher

滝澤 忍 モハメドサレム
S. Takizawa M. Salem

キーワード

Keyword

フロー合成、電解合成、光触媒、機械学習
flow synthesis, electrolytic synthesis, photocatalysis, machine learning ML

応用分野

Application

ファインケミカルズ、 π 共役系機能性材料
fine chemicals, π -conjugated functional materials

研究開発段階

基礎

実用化準備

応用化

背景

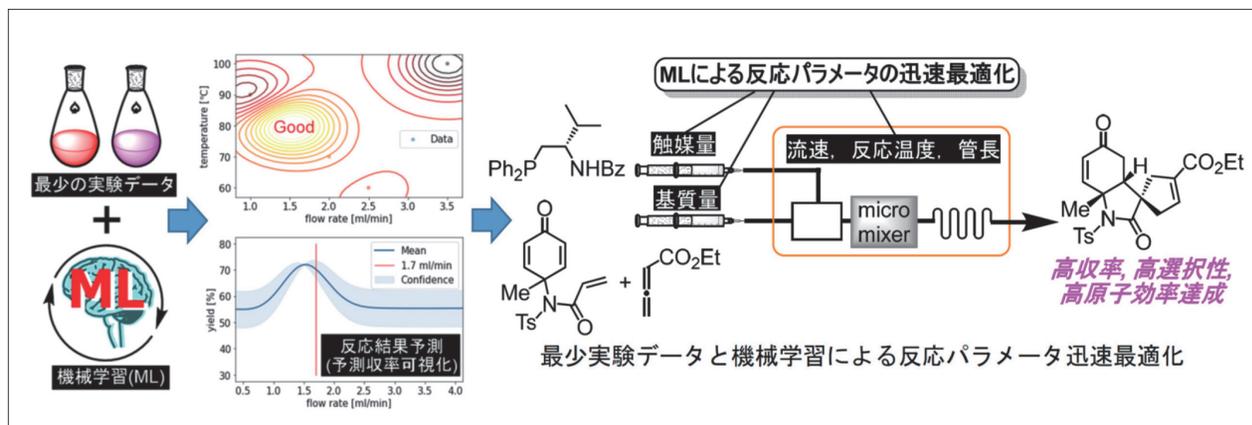
医薬原料等のファインケミカルズ安定供給は、人類の安全と快適な生活を維持するためにも重要です。ファインケミカルズのフロー・電解・光触媒自動合成に向け、最少実験と実験計画をハイブリッドした**実践的MLを基盤とする反応プロセス**技術の革新を目指しています。

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・光触媒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MLの常識を覆し、最少コストにて反応・材料開発を加速する実践的なデータ駆動型有機合成化学を拓きます。

技術内容

フロー・電解・光触媒合成法は、「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

- 廃棄物の削減と再資源化・低コスト化
- 新規反応・有機材料開発における迅速最適化

【論文 Paper】 [1] Chem. Commu. 2020, 56, 1259.
[2] Green Chem. 2021, 23, 5825.
[3] Commun. Chem. 2022, 5, 148.
[4] Adv. Synth. Catal. 2023, 365, 373.

[5] Green Chem. 2024, 26, 375.
[6] Nat. Commun. 2024, 15, 3708.
[7] ACS Sustain. Chem. Eng. 2024, 12, 12135.