

令和6年度科学研究費助成事業「学術変革領域研究（A）」に係る中間評価結果

領域番号	21A204	領域略称名	デジタル有機合成
研究領域名	デジタル化による高度精密有機合成の新展開		
領域代表者名 (所属等)	大嶋 孝志 (九州大学・大学院薬学研究院・教授)		

(評価結果)

A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)

(評価結果の所見)

本研究領域は、情報科学との融合を通じて、日本が世界をリードしてきた有機合成化学分野の方法論の変革、さらには、化学産業の継続的発展に貢献することを目指している。

研究項目 A01 (AI 支援による反応制御の深化)、研究項目 A02 (AI 支援による合成手法の深化)、研究項目 A03 (有機合成を支援する AI 手法の深化) の有効な連携に向けて、精力的な AI 勉強会などの開催を通じた AI 教育・若手育成、日本化学会論文誌との連携、など広範囲に多大な努力を行っていることは高く評価できる。

領域全体としては、多くの共同研究が機動的に動き出しており、今後の発展が非常に期待できる一方、いくつかの計画研究については当初の想定より遅れているとみられる。

今後は、本研究領域の情報科学解析の独自性・有効性の提示や、自動最適化機能を有する比較的安価なフロー実験システムの構築などを含めて、労働集約的な既存の有機合成化学分野に大きなインパクトを与えることを期待する。