

令和3年度「学術変革領域研究(A)」新規採択研究領域
に係る研究概要・審査結果の所見

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・薬学研究院・教授)		

(応募領域の研究概要)

入手容易な原料から超付加価値の高次複雑系分子を創成する有機合成化学は現代の錬金術である。日本が世界をリードし続けるためには、有機合成に破壊的イノベーションを起こす有機合成の変革が必須である。これまでの実験・理論・シミュレーションに加え、第4の科学であるインフォマティクスを有機合成の分野で徹底的に活用するデジタル有機合成を推進する。A01 反応制御の深化、A02 合成手法の深化、A03 AI手法の深化の3班体制で、反応条件最適化、合成経路探索、高次複雑系分子設計の3つの自動化システムにより革新的な基礎反応の発掘や開発効率の超加速化を達成し、さらに革新的自動合成装置の開発へ繋げ、日本のモノづくり力向上、化学産業の発展、Society 5.0、そしてSDGsに貢献する。

(審査結果の所見)

本研究領域は、時間・労力・コストがかかる職人芸的な有機合成化学に、情報科学やAIなどの新手法を導入して、工程の大きな変革を目指すものであり、大学・企業を問わず、今後の日本の有機合成関連分野の発展に大きく貢献する研究提案である。

本研究領域では公募研究が幅広く計画されており、広範囲の実証実験を行うことで新たな興味深い展開に結び付くことが期待されるが、特に有機合成の研究に関しては情報化に値する内容かどうかを慎重に判断する必要がある。また、フロー合成やロボット合成を合成研究の中心に据え、機械学習の経験者を充実させていることで、データの均質性が担保されている。

有機合成化学にAIを利用することは当該分野の今後の発展に不可欠であり、産業的な波及効果の大きさも認められるが、データベースの構築だけでなく新たな学理の構築や学術の変革につなげていくための道筋に工夫が望まれる。

デジタル有機合成を推進することで、実験研究に多大な労力を割いてきたマンパワーを、創造的な仕事に振り分けることができれば、新規で画期的な反応を見つけ出すことができると期待する。