

## 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

研究開発代表者： 松原 誠二郎 京都大学・工学研究科 教授

共同研究機関： 国立研究開発法人物質・材料研究機構  
国立研究開発法人産業技術総合研究所  
国立大学法人東京農工大学



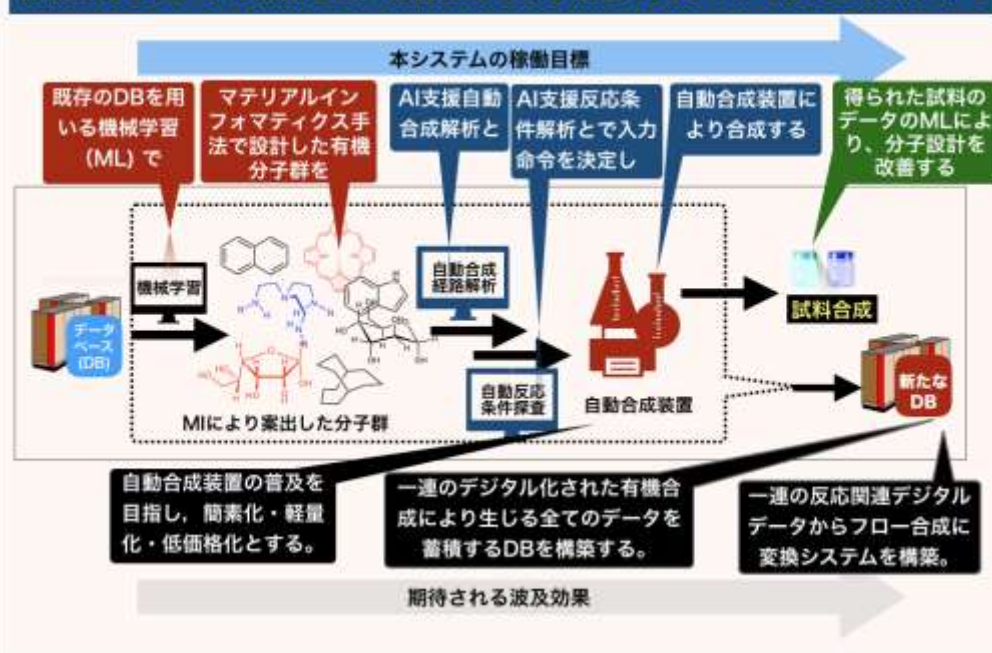
### 目的：

マテリアルインフォマティクス(MI)手法で提案される分子構造式群に対して、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簡素な形で開発し、それらの分子試料を自動合成する。

### 研究概要：

現在の有機合成は、実験操作だけでなく、合成経路設定を含め経験値が必要なアナログ技術の一面がある。一方、MI手法は、データ駆動により短い時間で多数の候補分子を案出する。そのような新しい状況に対応するため、自動合成システムが必要である。そこで、AI支援合成経路解析結果から合成難易度を判定し、合成可能な分子に関して初期反応条件を類似性探索で自動的に決定し、その条件を再現できるバッチ型自動有機合成装置を開発する。この一連の操作はデジタル化された有機合成を意味する。一連の有機合成データは新たなデータベースを生み、今後のフロー合成等への展開に有用である。特に自動装置は簡素化し、多くの有機合成の現場で稼働できることを目指す。

### 有機合成をデジタル技術とし、有機合成を分子構造の入力のみで行える技術にする



# Realization of common platform technology, facilities, and equipment that creates innovative knowledge and products

## Innovation in organic molecular engineering with AI-assisted organic synthesis system using a frugal device

**Project Leader :** Seijiro MATSUBARA, Professor  
Graduate School of Engineering, Kyoto University

**R&D Team :** National Institute for Material Science, National Institute of Advanced Science and Technology, Tokyo University of Agriculture and Technology



### Summary :

The molecular structures, which are devised from material informatics approach (MI), should be converted into the real molecules by organic synthesis in order to obtain new characteristic value. We will develop the AI-assisted automatic system, which can solve the synthetic route of the designed molecule with a suggestion for the reaction conditions. The system synchronizes our newly developing automatic organic synthesis device. Those system means digitization of organic synthesis and will yield a new organic synthesis digital data base. It will also be important for transforming the batch-reactions into the corresponding flow reactions.

