マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書
ARIM User's Report

【Release：2025.07.24】　【Update：2025.07.23】

課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	22MS0014
利用課題名 Title	反応条件探索装置の活用による高度精密有機合成のデジタル化
利用した実施機関 Support Institute	自然科学研究機構 分子科学研究所 / IMS
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	外部利用/External Use
ARIM半導体基盤PF 関連課題 Related to ARIM-SETI	指定なし / No Designation
横断技術領域 Cross-Technology Area	物質・材料合成プロセス/Molecule & Material Synthesis
重要技術領域 Important Technology Area	その他/Others
キーワード Keywords	有機合成の自動化, AI活用

利用者と利用形態 / User and Support Type

利用者名（課題申請者） User Name (Project Applicant)	大嶋 孝志
所属名 Affiliation	九州大学大学院薬学研究院
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	鈴木 敏泰,椴山 儀恵
利用形態 Support Type	共同研究/Joint Research

利用した主な設備 / Equipment Used in This Project

利用した主な設備 Equipment ID & Name	MS-304：有機合成DX群

報告書データ / Report

概要（目的・用途・実施内容） Abstract (Aim, Use Applications and Contents)	高次複雑系分子の合成には、複数存在する官能基（FG）の反応性の制御が極めて重要である。申請者は、一つの触媒に複数の機能を組み込んだ官能基標的触媒を開発することで、触媒制御による化学選択性の逆転を実現し、前例のない保護基（PG）フリーの直接連結反応の開発に成功している。共存する官能基の反応性について知見を得るには、膨大な数のトライアル＆エラーが必要不可欠な状況にある。また、反応データの精度は実験者の環境や技量に左右され、実験者が人間である以上、データの質の問題を回避することは難しい。 自動スクリーニング装置は、実験者の技術に依存することなく必要な実験データを迅速に収集することが可能であるため、反応実験データの数と質の問題を解決するうえで有望である。しかし、有機合成化学分野では馴染みが薄く、本学は有機合成反応の開発に利用できる自動スクリーニング装置を所有していない。そこで今回の協力研究では、有機合成における自動スクリーニング装置の活用を目的として技術相談を行った。
実験 Experimental	今回の技術相談では、申請者が開発した評価キットを椴山グループに送付し、椴山グループで開発中の反応に適用してもらい、得られた実験結果をもとに、バッチ型反応における手動と自動の実施方法の違いについて事前調査を行った。評価キットは、予備検討に用いるadditive 0-1と本検討に用いるadditive 1から26から構成されている。反応実験は、ベンゼン環の一部がアルキル鎖を有するadditive 0-1を用いた予備検討、続いて、官能基が異なる26種類のadditive 1から26を用いた本検討の順に行い、標的反応生成物の収率とadditiveの回収率をもとに官能基共存性を評価した。additiveによるポジティブな効果を期待して、椴山グループの網羅的反応実験で目的生成物が得られなかった室温25℃、反応時間0.5時間の条件でバッチ型反応実験を実施した。
結果と考察 Results and Discussion	まず、手動でのバッチ型反応実験を行った。その結果、additive 0-1とadditive 10を用いた場合に、目的生物が80%以上の収率で得られ、additiveの回収率は70%以上であった。また、自動で多数の反応を並行もしくは連続して実施する場合、反応試薬や反応溶媒の分注と反応停止試薬の分注を同じニードルで実施することになるため、ニードルの洗浄段階について、初期プログラムに組み込む必要があることがわかった。引き続き、additive 11から26を用いた手動での反応実験を行い、自動スクリーニング装置を用いた反応実験に向けて情報収集を継続する。
図・表・数式 Figures, Tables and Equations	
その他・特記事項（参考文献・謝辞等） Remarks(References and Acknowledgements)	

成果発表・成果利用 / Publication and Patents

DOI（論文・プロシーディング） DOI (Publication and Proceedings)	
口頭発表、ポスター発表および、その他の論文 Oral Presentations etc.	
特許出願件数 Number of Patent Applications	0件
特許登録件数 Number of Registered Patents	0件