

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 機械学習を利用した有機電解合成反応の効率的最適化

2. 個人研究者名

佐藤 英祐（岡山大学学術研究院環境生命自然科学学域 助教）

3. 事後評価結果

本研究課題では、有機合成化学の新しい化学反応を発見するために、電極反応を用いる有機電解合成法と連続送液による効率的な合成を達成するフロー合成法を組み合わせた電解フロー合成法の反応条件最適化を、流速と電流値を説明変数にしたガウス過程回帰による機械学習によって達成している。さらに、化合物情報を説明変数として用いるガウス過程回帰モデルにより、出発原料の異なる化学反応も予測が可能となることを示しており、研究目的を達成したと考える。成果の論文化については、今後さらに増えることを期待したい。

今後、さらに幅広い範囲の化合物についても反応条件を提示可能な機械学習モデルの構築と、それに基づく化学反応のさらなる理解により、機械学習を活かした有機合成化学の発展が期待される。