

2023 年度年次報告書
AI 活用で挑む学問の革新と創成
2022 年度採択研究代表者

桶谷 龍成

大阪大学 大学院基礎工学研究科
助教

深層学習を利用した分子性結晶のキラリティ判別

研究成果の概要

キラルな外形をもつ結晶を与える化合物として、テトラフェニルエテンの結晶化とその外形観察を行った。結晶化はトルエンを溶媒として結晶化したところ、良質な結晶が得られたが、外形によるキラリティの判別は単一の角度からの観察では容易ではなく、写真による判別に課題が残った。一方、昨年度より進めているヒドロベンゾイン、アスパラギン、 γ -グルロン酸ラク톤の系では、いずれも結晶の大きさが小さくラベリング作業に適さない顕微鏡写真であった。そこで、単一のキラリティをもつヒドロベンゾインを用いて結晶化を行い、写真で撮影した結晶をすべて一方のキラリティとしてラベリングする手法を進めている。また顕微鏡写真に基づくキラリティ判別モデルの構築にあたり Single Shot Multibox Detector (SSD)や YOLO を用いて、比較検証を進めシステム構築に取り組む。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Overcoming a solid solution system on chiral resolution: combining crystallization and enantioselective dissolution, Ryusei Oketani, Koki Shiohara, and Ichiro Hisaki, *Chem. Commun.* **2023**, 59, 6175-6178.
- 2) Semicontinuous temperature cycle-induced deracemization using an axially chiral naphthamide, Ryusei Oketani, Riku Naito, Ichiro Hisaki, *Org. Process Res. Dev.* **2024**. accepted
- 3) Deracemization of Chiral Ozanimod Key Intermediate using Homogeneous Ir-based Racemization Catalyst, Ryusei Oketani, Koki Shiohara, Ichiro Hisaki, *ChemRxiv* **2024** DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-rmkk7