

ChemOS-DX 研究所活動実績報告書

「Chemical Optimization System – digital transformation」

令和4年4月1日～令和5年3月31日

令和5年4月24日

所長 武田和宏

1. 概要

2022年度は構成員とともに意欲的に研究を行い、多くの成果を発表した。特に、伝熱ならびにマイクロ波加熱フロー反応器を用いた有機合成反応の連続的条件を迅速最適化した研究成果として、2022年11月に第53回中部化学関係学協会支部連合秋季大会で発表した。この発表を含め研究成果として10件の学会発表を行った。うち1件では、注目講演としてプレスリリースされ、さらに部会技術賞を受賞した。また、フロー型マイクロ波加熱反応器における出口成分測定のためのインライン赤外分光測定器 ReactIR をさらに活用するための接続環境を整備した。これにより現有のフロー型マイクロ波加熱反応器と組み合わせて、原料から反応生成物まで一貫して条件検討することのできる環境を構築した。

さらに本プロジェクト客員教授を含む2件の共同研究を行った。1件は機械学習による基質選択性認識触媒の検討を始めており、触媒構造による基質選択性を予測したうえで、その予測結果を用いた触媒構造の提案に成果を出しつつあり論文化の検討段階まで到達した。また、もう1件の共同研究としてハロゲン化反応の収率予測およびその予測結果を改善し、拡張するための実験条件選定を行った。ここで開発した手法は生成的AIを応用して必要実験数を劇的に低減できるものであり、現在論文化を進めている。

2. 外部資金等

科研費 学術変革領域研究 (A) (課題番号 21H05222) (令和3年度から令和7年度) の予算にて運用した。

2022年度収入・支出：5,590,000円 (直接経費 4,300,000円、間接経費 1,290,000円)

次年度以降の内定額

2023年度 5,590,000円 (直接経費 4,300,000円、間接経費 1,290,000円)

2024年度 5,590,000円 (直接経費 4,300,000円、間接経費 1,290,000円)

2025年度 5,980,000円 (直接経費 4,600,000円、間接経費 1,380,000円)