

自動合成ロボットと情報科学及び理論化学の融合に基づいた新反応・新材料探索

(北大 ICR_eDD) 長田 裕也

Exploration of New Reactions and New Materials Based on the Fusion of Automated Synthetic Robots, Information Science, and Theoretical Chemistry (WPI-ICReDD, Hokkaido University)
○Yuuya Nagata

In the search for new reactions and materials, organic synthesis experiments that rely on the experience and manual labor of researchers continue to be the primary method. On the other hand, more efficient alternatives to such methods continue to be sought. While a wide variety of methods have been developed and proposed, the use of automated synthetic robots for synthesis and the search for new substances has recently been attracting attention (Figure 1). The use of automated synthetic robots in research is expected to achieve extremely high reproducibility and experimental accuracy and to improve the efficiency of simple and labor-intensive synthetic chemistry experiments.

This presentation will discuss the method to develop new reactions and new materials more efficiently by narrowing down the targets to be experimentally verified using informatics and theoretical chemistry and combining them with automated synthetic robots through research examples.

Keywords: Automated Synthesis Robot; Theoretical Chemistry; Information Science

新反応及び新材料の探索において、現在でも研究者の経験と手作業に依拠した有機合成実験が主たる手法であり続けている。一方でそのような研究手法に代わる、より効率的な手段が求められ続けている。これまでに多岐にわたる方法が開発・提案されてきた中で、最近では自動合成ロボットを使用した合成法の検討及び新物質探索が注目を集めつつある。自動合成ロボットを有機合成研究に活用することで、極めて高い再現性と実験精度を達成することができ、さらに単純で労働集約的な合成化学実験の効率化が大いに期待されている。

本講演では情報科学・理論化学を活用することで、実験検証すべき対象を絞り込み、さらに自動合成ロボットを組み合わせることで効率的に新反応・新材料を開発する手法について、個々の研究事例を通じて紹介する。



Figure 1. An automated synthetic robot to be introduced in this presentation.