

抗菌スパイク粒子のベイズ最適化を活用したフロー合成条件検討

(株式会社KRI) ○中江 隆博・伊藤 聡

Investigation of flow synthesis conditions utilizing Bayesian optimization of antimicrobial spike particles (KRI, Inc.) ○Takahiro Nakae, So Ito

Dragonfly and cicada wings have antimicrobial properties derived from their nano-sized spike structures, and nanostructures that mimic them have been reported to exhibit structural bactericidal properties.¹⁾ KRI has been studying antimicrobial spike particles that mimic these structures.²⁾ A method to prepare antimicrobial spike particles with desired properties in a highly reproducible, high-yield, and scalable synthetic method will be essential for industrial applications. Flow synthesis is one of the low environmental impact chemical processes due to its reproducibility and scalability by numbering up. In addition, flow synthesis has less uncertainty derived from experimental manipulations, making it suitable for the use of machine learning.³⁾ In this presentation, we will report the results of our study by utilizing Bayesian optimization to examine the conditions of flow synthesis.

Keywords : *flow synthesis, Bayesian optimization, Antimicrobial spike particles, biomimetics*

トンボやセミの羽根はナノサイズのスパイク構造に由来する抗菌性を有しており、これを模したナノ構造は構造殺菌を示すことが報告されている¹⁾。構造殺菌は物理ダメージに由来し長期的効果が期待できることと、細菌類だけでなくカビに対して有効であり、ウィルスへの効果も期待されている。KRI ではこれを模した抗菌スパイク粒子に関する研究に取り組んでいる²⁾。所望の特性を発揮する抗菌スパイク粒子を高い再現性、高い収率、かつスケラブルな合成手段で調製する手法は工業利用の応用に必須となる。フロー合成は再現性とナンバリングアップによるスケールアップ性から、低環境負荷な化学プロセスの1つです。また、フロー合成では実験操作に由来する不確かさが少なく、機械学習の活用に適している³⁾。フロー合成の条件検討にベイズ最適化を活用し検討を行った結果について報告する。

1) Bactericidal activity of black silicon. E. P. Ivanova, J. Hasan, H. K. Webb, G. Gervinskas, S. Juodkazis, V. K. Truong, A. H. Wu, R. N. Lamb, V. A. Baulin, G. S. Watson, J. A. Watson, D. E. Mainwaring, R. J. Crawford *Nat Commun.* **2013**, *4*, 2838.

2) 昆虫の羽の機能を再現した抗菌、防カビ、抗ウイルス機能表面の開発, KRI プレスリリース 2021 年 3 月 3 日。 https://www.kri-inc.jp/press/1275615_11456.html

3) Exploration of flow reaction conditions using machinelearning for enantioselective organocatalyzed Rauhut–Currier and [3+2] annulation sequence. M. Kondo, H. D. P. Wathsala, M. Sako, Y. Hanatani, K. Ishikawa, S. Hara, T. Takaai, T. Washio, S. Takizawa, H. Sasai, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 1259-1262.