

文部科学省科学研究費助成事業「学術変革領域研究（A）：デジタル化による高度精密有機合成の新展開」・AI 勉強会+若手セミナー@岩手大学 のご案内

会期： 2024 年 6月4日(水)~6 日(金)

会場： 岩手大学 理工学部 銀河ホール

主催： 学術変革領域研究（A）：デジタル化による高度精密有機合成の新展開（デジタル有機合成）

世話人：是永 敏伸（岩手大学）、滝澤 忍（大阪大学）、笹野 裕介（東北大学）

参加費：無料（若手セミナーの懇親会を除く）

【趣旨】

科学技術の進歩は、多様な研究手法を創り出し、有機化学に新たな展開をもたらしている。この 100 年余り変わることのなかったバッチ合成に加え、フロー合成、電解合成、自動合成、光照射、DFT 計算、機械学習など、この 20 年の間に、様々な手法が複合的に取り入れられ、従来では困難とされていた分子が驚くようなスピードで合成されるようになってきている。このような有機化学分野の変革を受けて、今回『AI 勉強会+若手セミナー@岩手大学』では、日本の有機化学の新たな潮流を先導し、次世代を担う研究者が岩手大学に集い、若手研究者へのデータ駆動型有機合成の啓蒙、及び若手研究者の研究発表を行い、今後の日本の有機化学の未来について議論していく。

【プログラム】

6月4日(水)：AI 勉強会

講師： 宮尾 知幸 先生（奈良先端科学技術大学院大学）

13:30-15:00 実習・授業①

15:00-15:30 休憩・情報交換

15:30-17:00 実習・授業②

17:30-18:30 意見交換会（学内生協）

6月5日(木)：若手セミナー（1日目）

13:30-13:40 開会挨拶 大嶋 孝志 先生（「デジタル有機合成」領域代表・九州大学）

13:40-13:50 セミナー講師紹介 司会：滝澤 忍

13:50-14:30 講演① 大塚 尚哉 先生（分子科学研究所）

14:40-15:20 講演② 佐藤 玄 先生（東京大学）

15:20-15:40 休憩・情報交換

15:40-16:20 講演③ 林 周斗 先生 (東京科学大学)
16:30-17:00 ショートプレゼン 参加者全員 PPT2 枚以内・発表 1 分以内
17:30-19:30 懇親会 (学内生協)

6月6日(金)：若手セミナー (2 日目)

09:00-09:40 講演④ 太田 英介 先生 (早稲田大学)
09:50-10:30 講演⑤ 高須賀 聖五 先生 (奈良先端科学技術大学院大学)
10:30-10:50 休憩・情報交換
10:50-11:30 講演⑥ 山崎 賢 先生 (岡山大学)
11:30-11:40 閉会挨拶 是永 敏伸

【参加申込方法】

以下のフォームより 5 月 23 日(金)までに参加登録をお願いします。

<https://forms.gle/yy5Z9xa8iBhgJ2e88>

【AI 勉強会の概要】

『Python を利用した立体記述子の計算と構造反応性相関モデル構築』

分子の立体障害を定量化する記述子は反応性や選択性の予測に頻用される。特に %Vbur や Sterimol パラメータなどは、立体情報を表現する記述子として幅広い対象に用いられる。A01 班の笹野と A03 班の宮尾は、アルコール酸化反応における基質構造と反応初速を結びつける「構造反応性相関モデル」構築に取り組んでいる。特に、現象を理解するために、適切な記述子を利用した解析に焦点を当てている。

今回の演習では、Python を用いて立体記述子の自動計算と構造反応性相関モデル構築を体験する。実際に投稿予定 (演習開始時には投稿済み予定) の論文に掲載した反応データ：15 基質程度を用いた解析を行う。演習時には、解析のコツや気をつけるべき点、反応メカニズムに対する示唆などをざっくばらんに議論し、記述子計算とモデル構築方法について理解を深めたい。

<事前準備> Google Colaboratory 上で解析します。Google アカウントの準備、事前に配布するノートブックをご自身の Google Drive にコピーしてください。ノートブックは演習開始の 3 日前を目処に Slack 上またはメールで配布します。

【若手セミナーの演題】（講演概要は追記予定です）

大塚 尚哉 先生（分子科学研究所）

『多環芳香族分子の全フッ素ハロゲン化戦略に基づく新規 π 共役分子の創製』

佐藤 玄 先生（東京大学）

『計算化学を用いたテルペン環化酵素の解析』

林 周斗 先生（東京科学大学）

『生成 AI×分子動力学×ロボティクス—de novo タンパク質設計プラットフォームの開発』

太田 英介 先生（早稲田大学）

『可視光駆動型結合開裂における選択性の改変』

高須賀 聖五 先生（奈良先端科学技術大学院大学）

『機械学習を活用した高分子フロー合成および電子ラボノートの運用事例紹介』

【問合せ先】

是永 敏伸（岩手大学） E-mail: korenaga@iwate-u.ac.jp

滝澤 忍（大阪大学） E-mail: taki@sanken.osaka-u.ac.jp

笹野 裕介（東北大学） E-mail: ysasano@tohoku.ac.jp