

計算化学と情報化学の融合による分子探索の試み

杉本 学 (熊本大院自然科学)

E-mail: sugimoto@kumamoto-u.ac.jp

物理理論に基づく数値計算によって物質の化学的性質を解析する計算化学は、現代の化学研究には不可欠である。計算化学を応用すれば、実験だけでは得られない詳細情報を獲得でき、それによって考察を深め、現象の理解をより確かにすることができる。計算化学を上手に活用すれば、分子の構造と反応あるいは物性との相関を明らかにすることも可能である。このため、計算化学は、(例えば機能性デバイスの開発に必要な、あるいはそれ自身が機能を持つ) 分子を探索ないしは設計する有望な方法と期待されている。しかしながら、現在の計算化学は、「そのための有効な方法論を提供している」という状況にはないように思われる。

この状況は、計算化学的手法の精度や有用性に起因するものではない。現在の計算化学の中心は、分子の構造、物性、反応性を解析する電子状態理論、化学反応の時間変化を追跡する反応動力学理論、分子の動力的側面や分子集団の挙動を解析する分子動力学理論、であるが、いずれの場合でも数値解析を行う際には「物質の種類の特定」が必須である。つまり、分子探索や分子設計の「解」である「物質」が、計算化学の「入力情報」となっている。

現時点では、実際に計算化学を用いて分子探索や分子設計を行おうとすれば、(計算機ではなく研究者が) (1) 計算によって有用な知見を得る、(2) 新たな分子を考案する、(3) その分子の構造や機能を評価する、というプロセスを何度も繰り返す必要がある。このプロセスは、(4) 最適な物質が得られたと判断される、まで反復されなくてはならない。

このようなプロセスを経た分子探索や分子設計は、限定的な範囲(例えば、ある物質の誘導体の中から探索するような場合)であれば現実的である。しかし、発想や判断に基づく試行錯誤を繰り返すのであれば、その範囲を余程限定しない限り、時間的制約のために現実的に困難である。セレンディピティに基づくような発見の可能性もあるが、これは計算化学を活用する研究者の持つ情報量(+発想力)に強く依存し、確実性は必ずしも高くない。

上述の(1)の「知見」、(2)の「考案」、(3)の「評価」、(4)の「判断」は、全て「情報」にかかわるプロセスである。セレンディピティを期待するにしても、物質情報の豊かさが求められる。従って、真に分子探索や分子設計を実現しようとするならば、「価値ある情報を獲得するための手法やツール」が不可欠である。そのためには、情報化学的手法やコンセプトを導入したり、現在注目されている「データ・サイエンス」のための各種手法(機械学習や人工知能アルゴリズム等)を、化学でも積極的に活用すべきである。

以上の観点から、我々のグループでは、計算化学の一つの方法である電子状態理論に注目し、(A)それに基づく数値計算の情報を“データベース”に集積する、(B)その中から情報を自動的に獲得する“データ・マイニング”を行う、(C)電子状態的な類似性に基づいて異種分子を探索する、(D)探索された分子の機能や用途を予測するための知的情報探索を行う、という4つの機能を有する情報処理システムを開発している。本講演では、(A)~(D)の方法論と実際の応用、および今後の課題について報告し、議論したい。

なお、本研究は、文部科学省科研費新学術領域研究「 π 造形科学」(領域番号 2601) および JST-CREST「再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための革新的基盤技術の創出」における研究プロジェクトの一環として行われたものである。関係各位に感謝したい。