

電子状態インフォマティクスによる機能分子探索

(熊本大院先端科学) 杉本 学

電子状態計算で得られる情報を用いて機能分子を探索する我々の試みを紹介する。我々はこのアプローチを「電子状態インフォマティクス」と呼んでいる。

物質の機能はその物性によって実現される。物性は、外部からの摂動に対する系の応答である。この意味では、反応性も一種の物性とみなせる。例えば、量子力学の摂動論で取り扱えるような物性(例:電気分極率)を考えると、これは電子励起エネルギーや遷移双極子モーメントのような物理量に依存することが知られている。従って、物性に関する詳細な理論式がわからない場合でも、それに関連すると予想される物理量(記述子)を用いた統計解析(機械学習)を行えば、物性値の定量的予測が可能になる。従来のケモインフォマティクス研究が分子の構造情報に関する「構造記述子」に基づいて機械学習を行うのに対して、我々はエネルギー変化に関連する「エネルギー記述子」を主に用いることによって、機械学習を行う。

我々のアプローチでは、電子状態計算で評価できる記述子を準備し、注目する物性との相関式を重回帰分析で求めることで、定量的な予測を試みる。この分析では、目的とする物性値の重要因子に関する知見も同時に得られるので、その因子の値を頼りに、物質探索をすることができる。探索は、その知見に基づいて新たな分子を設計したり、既知の化合物のカタログの中から有望なものを選択することで達成できる。

本講演では、良好なホール移動度を与える有機系ホール輸送材料の探索、カイコの摂食行動を阻害する薬物の探索、などを行った研究例を紹介する。また、このアプローチを用いることによって、構造が全く異なる機能性分子を探る「スキップフォールド・ホッピング」を実現する可能性についても議論したい。この発展研究として、動植物の代謝産物の分類に関する研究、期待される薬理作用をもつ分子を化合物群の中から特定する研究、分子の香りを予測する研究についても、時間があればご紹介したい。