

合成可能な高分子をコンピュータで生成する新技術を開発

株式会社ダイセル（本社：大阪市北区 代表取締役社長 小河義美）と大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所（東京都立川市 所長 椿広計）は、高分子合成において広く用いられる重合反応のルールを網羅的に実装した仮想高分子生成モデル「SMiPoly」を開発し、オープンソースソフトウェアとして公開しました。このモデルに市販化合物を入力することで、原理的に合成可能な高分子を生成できます。SMiPoly と機械学習・人工知能の技術を組み合わせることで、マテリアルズインフォマティクスによる新材料探索における大きな壁となっていた合成実験のデザインに要する時間と労力を大幅に削減できます。本成果をまとめた論文は科学雑誌「Journal of Chemical Information and Modeling」（アメリカ化学会）に掲載され、2023年8月22日に電子版が公開されました。また、SMiPoly のコンセプトをイラスト化したアート作品が、2023年9月11日に発刊される同誌 63 巻 17 号の表紙絵に選ばれました。

研究の背景

現代の日常生活や産業技術は、プラスチックやゴム、繊維、フィルムなど、様々な高分子材料に支えられています。一方で現代社会は、地球温暖化をはじめとする環境問題やエネルギー資源問題など、数々の深刻な社会問題に直面しており、豊かで持続可能な次世代社会基盤を構築していくには、これまでになく物性・機能を有する新材料を迅速かつ効率的に開発していく必要があります。このような背景の下、データサイエンスや人工知能の先進技術を材料開発に導入して研究開発や新材料創製の高効率化を図っていこうという機運が高まり、マテリアルズインフォマティクス（materials informatics, 以下 MI という）という新学際領域に注目が集まりました。

研究成果の概要

MI による高分子材料探索のプロセスは、二つのステップに大別されます。まずは、機械学習などを用いて、高分子材料の組成や構造的特徴から材料特性を予測するモデルを構築します。次に、このモデルを用いて仮想高分子を含む膨大な数の候補材料の特性を評価し、有望な候補を絞り込みます。ここで、仮想高分子群（バーチャルライブラリ）の質と多様性が材料開発の成否に大きな影響を与えることとなります。これまでの高分子材料 MI では、構造生成器で作製した仮想高分子の合成方法が分からなかったため、専門家が経験と勘に基づき候補材料の合成可能性を評価し、試行錯誤的に構造を選別・変更しながら合成方法を設計してきました。この工程に要する技術的困難性と時間的コストが、高分子材料 MI の実践展開を妨げる大きな要因となってきました。

高分子合成では、高分子鎖の構成単位分子（単量体）が化学反応を介して多量体化していくことで目的の重合体を形成します。このプロセスを重合反応といいます。本研究では、高

分子合成で広く用いられている 22 種類の重合反応ルールを実装した仮想高分子生成モデル SMiPoly を開発しました (図 1)。このモデルに市販の原料モノマーを入力することで、適用可能な反応様式が自動的に選ばれ、計算機内での化学反応を介して高分子が重合されます。生成された仮想高分子群は原理的に市販の原料モノマーで合成できます。本研究では、購入可能な約 1,000 種類の原料を用いて、約 17 万個の仮想高分子を生成しました。図 2 に示すように、この仮想高分子群は、現在の合成高分子の大部分をカバーしつつ、多様な新規高分子を含みます。

化学の知識を用いて、モノマー、重合反応を定義し、実装

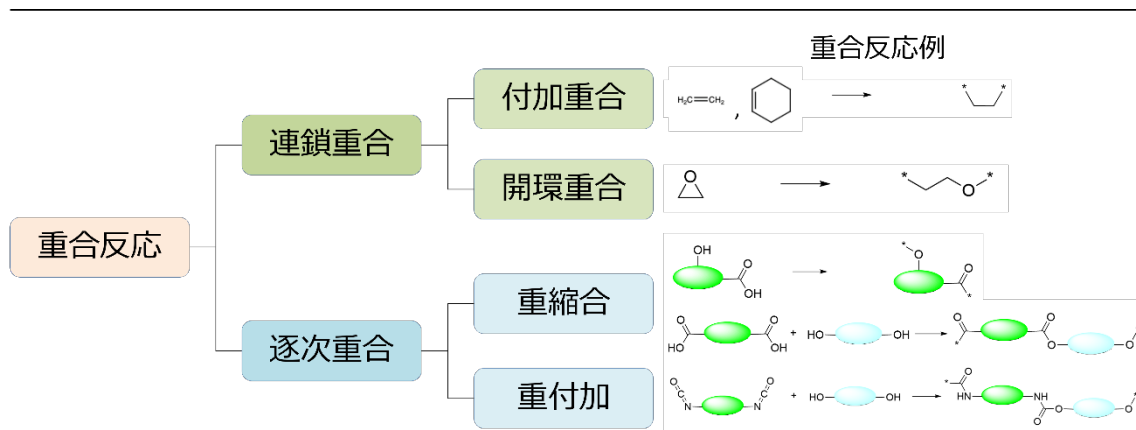
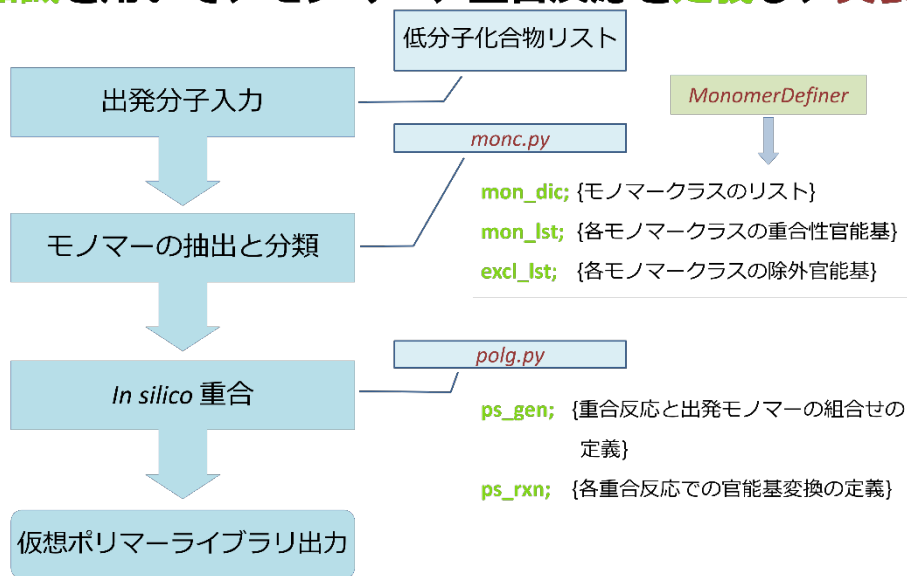


図 1. SMiPoly に実装されている高分子重合反応ルール集合

a) SMiPolyが生成した仮想高分子

b) これまでに合成された高分子

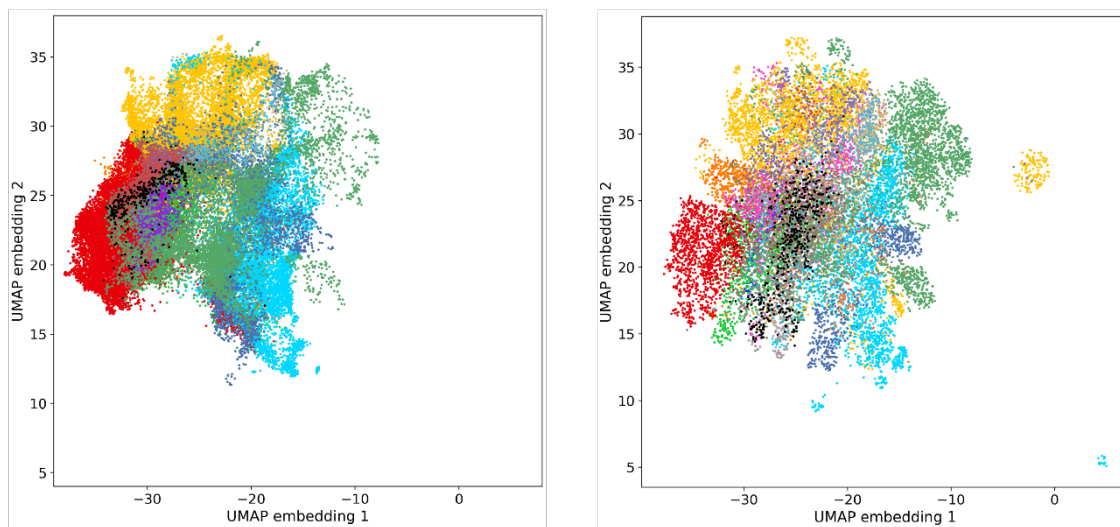


図 2. SMiPoly が購入可能原料モノマーを用いて生成した仮想高分子群（左）とこれまでに合成された高分子群（右）の分布比較

研究の意義と今後の展開

SMiPoly と機械学習・人工知能技術を組み合わせることで、MI による新材料創製に要する時間的コストを大幅に削減できます。また、統計数理研究所の研究グループは、産学連携コンソーシアムを形成し、RadonPy という高分子物性自動計算システムを用いて、大量の仮想高分子群を包含する高分子物性オープンデータベースを開発しています。この事業には、株式会社ダイセルも参画しています。今後、同事業を通じて SMiPoly の仮想物質群の物性を明らかにしていきます。

また、生成された物質群を解析することで、合成可能な高分子材料の化学的特徴を理解し、それらの到達可能な材料性能の限界点を明らかにしていきます。さらに、性能限界を超えるために必要な有機合成技術を新たに創出し、次世代産業技術の礎を構築していきたいと考えています。

本件に関するお問い合わせ先

【研究内容について】

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

ものづくりデータ科学研究センター 教授（センター長）

吉田 亮（よしだ りょう）

TEL: 050-5533-8534

【報道・広報について】

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

運営企画本部企画室 URA ステーション

〒190-8562 東京都立川市緑町 10-3

TEL: 050-5533-8580 FAX: 041-526-4348

E-mail: ask-ura@ism.ac.jp

発表論文

タイトル：SMiPoly: Generation of Synthesizable Polymer Virtual Library using Rule-based Polymerization Reactions

著者：Mitsuru Ohno¹, Yoshihiro Hayashi², Zhang Qi², Yu Kaneko¹, and Ryo Yoshida²

掲載誌：Journal of Chemical Information and Modeling

DOI 番号：<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c00329>

掲載日：2023 年 8 月 22 日（電子版）

1. 株式会社ダイセル
2. 大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所

SMiPoly 公開ウェブサイト

<https://github.com/PEJpOhno/SMiPoly>