

大規模言語モデルによるゼオライトの有機構造規定剤の設計

(東大院工¹) ○伊東 周昌¹・村岡 恒輝¹・中山 哲¹

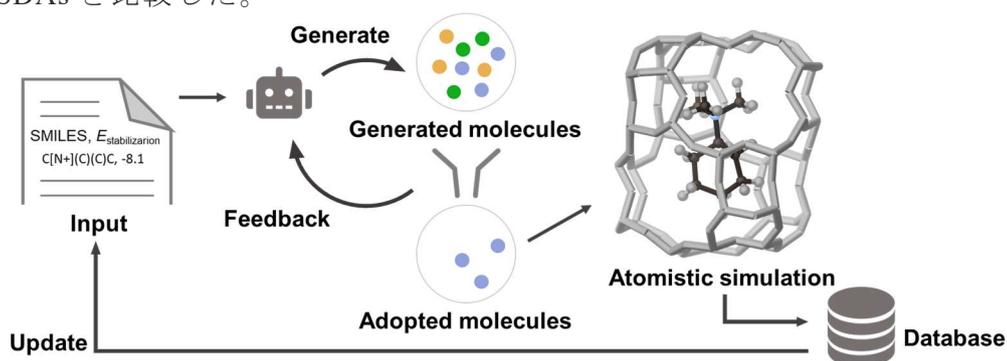
Designing Organic Structure-Directing Agents for Zeolite using Large Language Models (¹*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*)

○Shusuke Ito¹, Koki Muraoka¹, Akira Nakayama¹

Zeolites are crystalline microporous aluminosilicates that are widely used in applications such as membranes and catalysts¹. One approach to direct the crystallization of zeolites is the use of organic structure-directing agent (OSDAs)², which are typically quaternary ammonium cations. While novel OSDA can lead to new zeolites, conventional trial-and-error experiments involve significant time and cost³. In this study, we employed Large Language Models (LLMs)⁴ to facilitate human-machine collaboration in designing potent molecules. We fed feedback derived from screening and atomistic simulation to the LLM to refine subsequent suggestions, thereby continuously improving the proposed OSDAs and fostering the exploration of chemical space. The predicted molecules were compared to experimentally verified OSDAs.

Keywords: *Molecular Design; Zeolite; Informatics; Organic Structure-Directing Agents; Large Language Models*

ゼオライトは多孔質なアルミノケイ酸塩の総称であり、分離膜や触媒などに広く利用される¹。ゼオライトの結晶化を導く方法の1つが有機構造規定剤(OSDAs)の利用である²。OSDAは主に四級アンモニウムカチオンである。新規OSDAの設計は新規ゼオライトを誘導する可能性があるが、実験による試行錯誤は膨大な時間とコストを要する³。本研究では、大規模言語モデル(LLMs)⁴を活用し、人間と計算機の協創を実現する分子設計アルゴリズムを開発した。スクリーニングおよび原子シミュレーションによって得られる結果をフィードバックすることにより、LLMが継続的に提案分子を改善し、広大な化学空間を探索させるようにデータフローを設計した。提案された新規分子を既存のOSDAsと比較した。



1. B. M. Weckhuysen and J. Yu, *Chem. Soc. Rev.*, 2015, **44**, 7022–7024.
2. R. F. Lobo, S. I. Zones and M. E. Davis, *J. Incl. Phenom. Mol. Recognit. Chem.*, 1995, **21**, 47–78.
3. K. Muraoka, W. Chaikittisilp and T. Okubo, *Chem. Sci.*, 2020, **11**, 8214–8223.
4. OpenAI, 2023, arXiv:2303.08774v4.

