

ルールベースの構造操作による π 共役炭化水素の計算科学的探索

(阪大理化¹・京大理化²・横浜市大理生命医科³・理研 AIP⁴) ○須賀 健介^{1,2}・高橋 隼人^{1,2}・寺山 慧³・隅田 真人⁴・齊藤 尚平¹

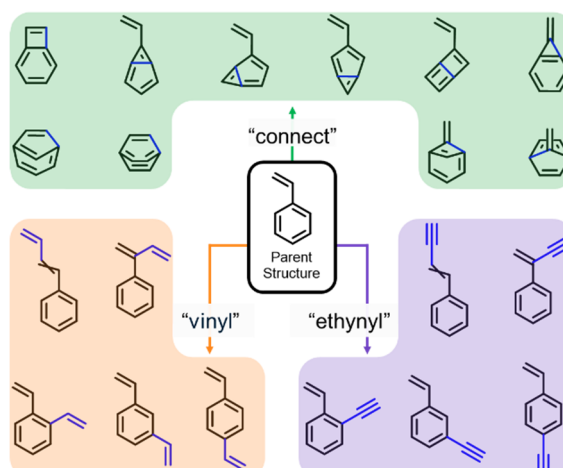
Computational Exploration of π -Conjugated Hydrocarbons by Rule-Based Transmutation (¹Osaka University, ²Kyoto University, ³Yokohama City University, ⁴RIKEN)

○Kensuke Suga,^{1,2} Hayato Takahashi,^{1,2} Kei Terayama,³ Masato Sumita,⁴ Shohei Saito¹

To explore vast chemical space, various molecular generation methods, such as those based on generative models, have been proposed. Rule-based molecular evolution provides exhaustive exploration within a defined chemical space and ensures high reliability. Here, we propose a method for exploring π -conjugated hydrocarbons including aromatic compounds. Starting from two simple compounds of ethylene and acetylene, three types of unit evolution, vinyl addition, ethynyl addition, and carbon-carbon linkage are repeated to generate π -conjugated hydrocarbons. Methods for efficient exploration and property optimization in this framework are also presented.

Keywords : Molecular Generation; Rule-Based Approach; π -Conjugated Hydrocarbons; Exhaustive Exploration; Aromatic Compounds

広大な化学空間の探索を目的として、多様な機械学習ベースの分子設計方法が提案されている¹⁾。それに対し、ルールベースによる分子生成は、定義された空間を網羅的に探索できる信頼性の高い手法である。本研究では、 π 共役炭化水素骨格に焦点を当てたルールベース分子生成法を提案する。この手法では、ビニル基付与、エチニル基付与、分子内炭素-炭素結合形成の 3 種類の単位操作をエチレンとアセチレンから繰り返し



適用し、 π 共役系を保証した炭化水素を網羅的に生成した。生成された化学空間は、化合物をノード、単位操作をエッジとするネットワークとして表現される。

さらに、ネットワーク上の各エッジに対応する物性値の変化量を予測する機械学習モデルを導入し、このネットワークを活用した効率的な化合物探索を行った。探索においては、構造の多様性と熱力学的安定性を評価指標として取り入れることで、議論に値する構造が優先的に生成されるよう設計した。また、単位操作の前後の物性値の変化量に基づく予測手法と、従来の直接予測手法を比較し、その有効性を検証した。

本研究は、広範な化学空間の効率的かつ戦略的な探索を可能にする新たなアプローチを示しており、機能分子設計への応用が期待される。

1) Du, Y., Jamasb, A.R., Guo, J. *et al.* Machine learning-aided generative molecular design. *Nat Mach Intell* **6**, 589–604 (2024).