

機械学習によるキラル分子の幾何構造と物性を用いたらせん誘起力予測

(立命館大¹) ○上田 悠仁¹・松本 浩輔¹・堤 治¹

Machine Learning Prediction of Helical Twisting Power of Chiral Molecules Using Geometric Structures and Physical Properties (¹*Graduate School of Life Science, Ritsumeikan University*),
○Yuto Ueda,¹ Kohsuke Matsumoto,¹ Osamu Tsutsumi¹

The helical pitch of chiral nematic liquid crystals (N* LC) depends on the concentration and helical twisting power (HTP) of the chiral molecules. To realize diverse optical functions arising from the helical pitch, it is essential to select chiral molecules with appropriate HTP in material design. Although HTP depends on various molecular factors, there has been no systematic explanation of the fundamental factors governing HTP. In this study, we developed a machine learning model to predict HTP using previously reported HTP values of N* LC. A dataset was molecular structures and HTP values of the chiral molecules extracted from previous report. Chemical parameters were calculated from molecular structures and used as explanatory variables. HTP was employed as the target variable to train the model. The developed model successfully predicted HTP with high accuracy for validation data. Furthermore, analysis of the importance of explanatory variables revealed key factors determining HTP. This study enables rational molecular design of chiral molecules tailored for desired helical pitches.

Keywords: Helical Twisting Power; Machine Learning; Chiral-Nematic Liquid Crystal

キラルネマチック液晶 (N* LC) のらせん周期はキラル分子の濃度およびらせん誘起力 (HTP) に依存する。N* LC は、このらせん周期に依存した光学機能を発現するため、材料設計の際には適切な HTP を有するキラル分子を選定する必要がある。各分子がもつ HTP は、様々な要因によって変化することは明らかになっている^{1,2)}。一方、HTP を決定する本質的な因子について、体系的に説明した例はない。そこで本研究では、これまでに報告された N* LC の HTP と分子構造の相関を機械学習を用いて明らかにすることを目的とした。構築した機械学習モデルが予測に用いた因子から、キラル分子の HTP を決定する重要因子について考察した。

これまでに報告されたキラル分子について、分子構造と HTP のデータを抽出し、データセットを作成した。分子構造から算出した化学パラメータを説明変数とし、HTP を目的変数として、機械学習モデルに学習させた。作成した機械学習モデルと検証用の分子骨格データを用いて予測を行ったところ、分子骨格から HTP を高精度で予測することに成功した。また、機械学習モデルの予測に対する説明変数の重要度から、HTP を決定する重要因子が判明した。本研究は、目的とするらせん周期に応じたキラル分子の合理的な分子設計を可能とする。

1) R. Eelkema, B. L. Feringa, *Org. Biomol. Chem.* **2006**, *4*, 3729–3745.

2) A. B. Harris, R. D. Kamien, T. C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.*, **1997**, *78*(8), 1476.