2024 年度

創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】

研究担当者	寺山慧
研究機関名	横浜市立大学
所属部署名	大学院生命医科学研究科
役職名	准教授
研究課題名	分子の未来を創る: 汎用型機能分子設計 AI システムの開発
研究実施期間	2024 年 10 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

近年、深層学習を用いた分子生成 AI 手法が大きく発展しているものの、計算機によって有用な材料分子を設計することは依然として困難な課題である。本研究では、量子化学計算に基づく電子状態を考慮した分子の物性シミュレーションと、分子生成 AI の連携により、望ましい物性を有する分子の設計が可能な分子生成 AI プラットフォームの構築を目指している。さらに、実験化学者を含む様々な利用者が利用できるよう、システムのユーザビリティ向上も重要な目標としている。今年度は主に、分子物性の評価ツールの改良、LLM（大規模言語モデル）を用いた分子生成システムのユーザーインターフェイスの基礎的な開発、分子生成 AI の基礎的な機能拡張に取り組んだ。また、実験化学者と連携のもと、今後実際に設計する分子候補に関して検討を進めた。以下に、今年度得られた成果の一部について記す。

望みの物性を持つ分子を設計するためには、生成された分子がどの程度目標物性を満たしているか評価する必要がある。そこで電子状態を自動的に計算するツールである QCforever に、本課題を実施するために必要な量子化学計算のフローを組み込んだ。特に重要な物性については実験化学者と協議を行い、垂直イオン化ポテンシャル、各種分極率、二重蛍光性などの評価が可能となるよう機能を拡張した。さらに、評価において重要となる二面角などの分子構造パラメータを自動で計算するスクリプトも組み込んだ。

また、対話形式による分子生成を実現するユーザーインターフェースとして ChatChemTS の基礎的検討を行った。ChatChemTS は、LangChain を用いたチャット形式のシステムであり、ユーザーが指定する分子特性に応じて、LLM を用いて生成条件を設定し、その後に分子生成 AI（ChemTSv2）と物性予測モデルを連携させて分子を生成する。検証として、予測モデルを用いて長波長吸収分子や薬剤候補分子の最適化が可能であることを予備的に確認した。