

**有機化学
/ 高分子化学**



**アルゴリズム
/ Python**

実験データの性質理解

：物理的意味、スペクトル

実施可能性の把握

：時間的、物理化学的

企業の研究の在り方

：性能発現、コスト

回帰分析

：線形, NN, etc...

シミュレーション

：分子モデル、反応予測

化学構造解析

：官能基量の記述子化

#1

構造物性相関への 原子団寄与的アプローチ

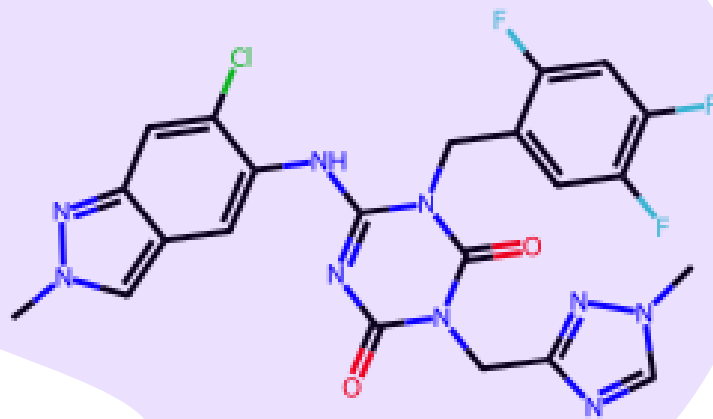
構造物性相関

分子の構造とその物理的または化学的性質との間の関係を示す化学の原理

Y = 物性

- 密度
- 沸点 / 融点
- 誘電率
- 水溶性 / 脂溶性
- 結晶性
- ...etc

X = 化学構造



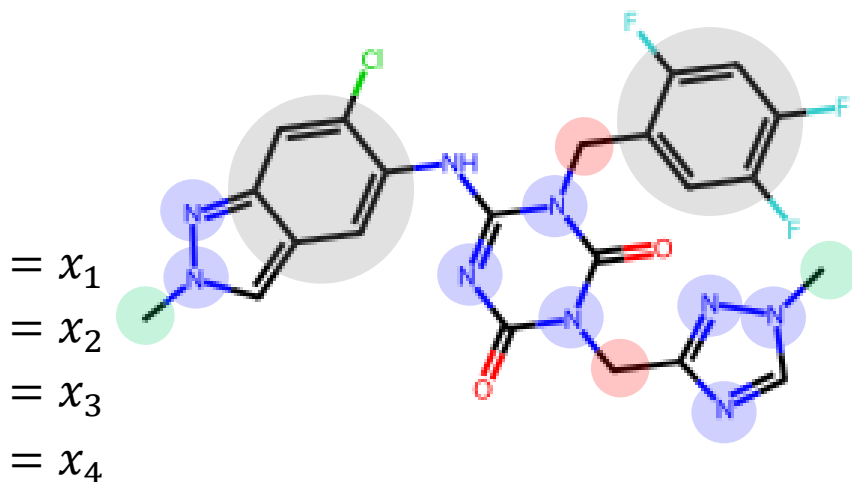
$$Y \propto f(X)$$

となるような関数 f を見出していく事を目的とする

原子団寄与法

分子の構造を、**原子団**という部分構造に分解する
→ 物質の物性は各原子団成分の線形和により記述する解釈

Chemical Name	Ensitrelvir
MW (g/mol)	531.886
logP	2.3311
MR	127.2867
amine	1.880102127
phenyl	3.760204254
methyl	3.760204254
methylene	3.760204254



$$y = \sum_{i=1}^n x_i = a \times x_1 + b \times x_2 + c \times x_3 + \dots$$

物性 寄与 原子団量

原子団寄与法の自動化

原子団寄与法の考え方を材料開発に適用するには、下記の前提条件が必要。

原子団寄与法の前提

1. 説明変数(原子団組成)が、**定量的に管理**されている。
2. 目的変数(物性)のデータが同じ条件で収集されている
3. 回帰分析に十分な量の実験データが存在する。

一方、前提条件の「原子団組成の定量的な管理」は、人間が手動で入力していくには、**非現実的なほど煩雑な作業**

【開発したもの】

Pythonにより、**外部データベースAPI** × **SMILES解析**を駆使し、原子団組成の管理を自動化するアプリ開発。

アプリの使用例

入力UI

1. 化合物名を入力(英語)

2. 化学構造に変化を与える場合、チェック。

3. “実行”のクリック

4. 外部APIから取得したSMILESをもとに、構造式、各種パラメタ、原子団組成が取得可能

5. “記録”のクリックで取得データを保存

処方管理システム / Monomer

Main

化合物名 / SMILES タグ

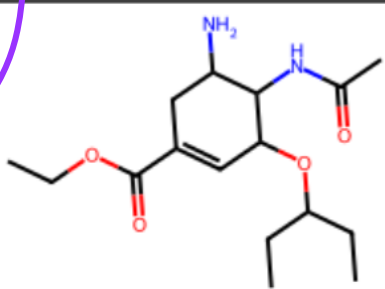
☒ CAS or NAME ☐ SMILES

化学反応

☐ ビニル重合

☐ カルボン酸の脱プロトン化

☐ アミンのプロトン化



SMILES CCC(CC)OC1C=C(CC(C1NC(=O)C)N)C(=O)OCC

MW (g/mol) 312.4100000000001

LogP 1.2854000000000008

MR 84.15610000000004

記録UI

記録データ表						
carboxylate	hydroxy	ether	ester	ketone	epoxy	amide
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	3.2009218654	3.2009218654	0.0	0.0	3.2009218654

#2

原子団寄与法による 溶解度パラメータの推算 (Van Krevelen法)

溶解度パラメータ

【背景】

異種の物質が互いに溶解する現象は分子構造に依拠するところが多い。その反面、数値としての議論が難しい。

→溶解度パラメータは数値として物質の溶解度を表現する。
この概念は、材料開発において、異種原料のブレンド時に起こる現象の説明に役立つ。

【開発したもの】

外部データベースAPI × SMILES解析 × 分子モデリング
により、Van krevelen法(※)に基づく、溶解度パラメータの自動算出、記録、可視化アプリを開発した。

※Van Krevelen法 : Hansenの溶解度パラメータと並ぶ、3次元のSP空間における溶解度パラメータ。原子団寄与的アプローチを取っている。

アプリの使用例

入力UI

1. 化合物名を入力(英語)

2. “実行”のクリック

3. 外部APIから取得した
SMILESをもとに、
構造式、各種パラメタ、
原子団組成を解析

4. 分子力場モデル
(ETKDG法)により
モル体積、密度を算出

5. Van Krevelen法により
 δ_d , δ_p , δ_h を算出。

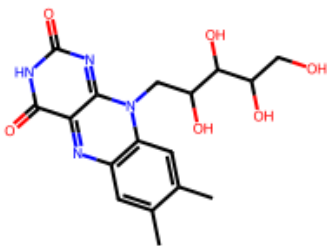
Van Kreveren SP Estimator

Main

化合物名 / SMILES

タグ

☒ CAS or NAME ☐ SMILES



Parameter

SMILES	CC1=CC2=C(C=C1C)N(C3=NC(=O)NC(=O)C3=N2)CC(C(C(CO)O)O)O
MW (g/mol)	376.369
Density (g/cm3)	1.1799387618609705
MolVolume	318.97333333333334
delta_d	12.19537683400911
delta_p	3.1539683839053985
delta_h	15.83681359891466

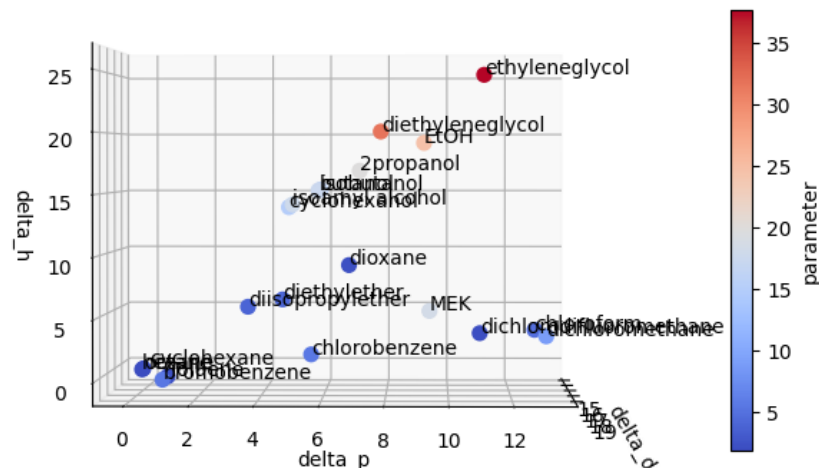
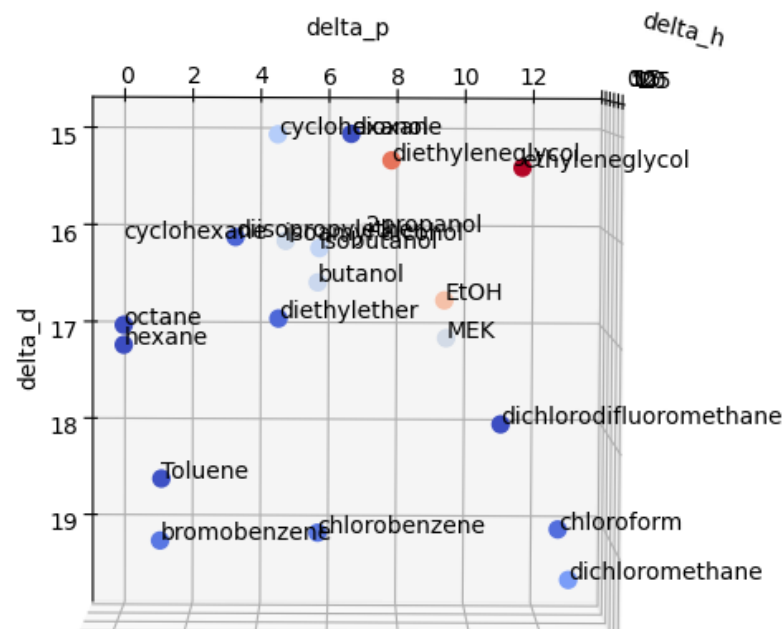
余談: SP空間上での誘電率プロット

溶剤の誘電率が、SP空間上においてどのように分布するのかを検証。

赤いプロット：誘電率が高い

青いプロット：誘電率が低い

極性項(δ_p)、および水素結合項(δ_h)が比誘電率と正の相関があることがわかる。



#3

原子団寄与法による 溶解度パラメータの推算 (Van Krevelen法)