

2023 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的な材料

2023 年度採択研究代表者

堤 拓朗

北海道大学 大学院理学研究院

助教

構造活性相関解析が拓く機能性高分子開発

研究成果の概要

高分子材料は人類の豊かな生活を支える基盤であり、身の回り品から工業製品といった幅広い分野で利用されている。これまでの高分子化学は高分子機能の制御や高度化により発展してきたが、合成可能性を重視するあまり研究対象となる高分子構造が市販品モノマーや既存の重合法に制約されていると指摘せざるを得ない。したがって、革新的な機能性高分子を開発するためには、既存の高分子観を脱却した新しい高分子の捉え方が必要である。本研究では、高分子機能が繰り返しユニット構造における官能基や主鎖・側鎖の組み合わせと相関することから、ユニット構造の構造異性体の全列挙に立脚した仮想高分子の生成法に着想した。

当該年次では、任意の官能基と分子式によって定義される高分子構造異性体を自動生成する汎用プログラムを開発し、さまざまな汎用高分子について仮想高分子を生成した。本プログラムはケモインフォマティクス分野で広く利用されている化学構造の文字列記法 SMILES を利用してユニット構造を表現する。ここで、一般に SMILES は低分子を表現するための記法であるが、本プログラムでは重合点を仮想原子で表すことで高分子ユニット構造を表現するような設計になっている。これまでに、アミド基を有する $C_nH_{2n-1}NO$ ホモポリマー群 ($n=4-7$) やポリビニルフェノール類、ポリクロロプレン類、いくつかのビニルポリマーについて仮想高分子を生成し、プログラム開発や整備に取り組んできた。当初、重複する高分子構造の除去が課題であったが、低分子構造を一意に定義可能な Canonical SMILES を活用することで重複の問題を解決した。この結果、 $n=6$ の場合、387 種類の仮想高分子が生成され、そのうち約 9 割が未知高分子であることが明らかになった。以上のことから、既存の高分子観を脱却した仮想高分子の網羅生成プログラムにより、これまで着目されてこなかった未踏高分子空間を暴き出すことに成功した。