

## 第 390 回高分子分析研究懇談会

高分子分析研究懇談会第 390 回例会が、12 月 13 日（水）、明治大学の紫紺館にて開催された。今回は、先の夏期合宿にて得られた会員アンケートによる意見を反映し、『AI』をテーマに開催され、参加者は 80 名となった。

まずはじめに本研究懇談会運営委員長の渡辺健市氏（豊田合成）より開催の挨拶があった。続いて、講演 3 件、ワークショップ 2 件が行われた。

講演 1 件目は、菊地 淳氏（理研）より、「帰納的・演繹的計算科学アプローチとしての機械学習とシミュレーション」と題し、高い再現性を有する NMR データに多変量解析と機械学習を導入し、魚類の産地特定の他、人の摂取代謝解析では、食事内容と NMR により定性した尿代謝成分を Market Basket Analysis 法を用いて解析され、食物摂取から排出量が増減する代謝物の推定経路を解明された。今後は、実験室内での詳細解析だけでなく、卓上の NMR 装置を使用した生産現場による簡易評価を目指しているとの事で、誰もが簡便に、データ解析まで行える時代が来ることを予感させた。

その後、ワークショップとして岩本 浩介氏（日立化成）より「緩和時間測定と分子動力学シミュレーションを用いた易接着フィルムなじみ性発現機構解析」と題し、スマートフォンの保護フィルムなどに多用されているアクリルポリマを用いた接着剤と被着体表面とのなじみ性発現と、共重合モノマのエチレンオキサイド（EO）鎖の長さの関係について紹介された。DMA では差異が認められなかったなじみ性が異なる接着剤 3 種のメソスケールにおける分子挙動差異を、NMR の緩和時間測定による運動性の確認と、分子動力学シミュレーションによる高分子鎖の絡み合いの可視化により確認された。その結果、EO 鎖が長くなると末端の分子運動性が落ち、また拡散指数  $\alpha$  もゼロに近づく事から、なじみ性が悪くなるとの結論であった。接着剤組成の中で EO の占める割合は極僅かだが、特性に大きな寄与をしており、高分子の奥深さを改めて感じた。

続いて講演 2 件目は、中本 高道先生（東工大）より「質量分析器データの多次元データ解析による香り印象の予測・再現」と題し、匂いの解析について紹介された。人の感じる匂いの印象を定量的に予測する為に、質量分析結果に対し自己組織化マップや深層学習を適用された。尚、解析には 2 つのオートエンコーダを使用する手法を提案されており、従来の線形手法に比べて良好な予測結果を実現された。また匂いには原臭がなく再現が難しいと言われていたが、ブレンド精油に対し近似臭の調合にも成功されており、今後、私たちの身近なところで、再現された匂いの活用が進んでいく日も近いのではと感じた。

2 件目のワークショップは、齋藤 剛氏（産総研）より「有機化合物のスペクトルデータベース（SDBS）—利便性の向上を目指した取り組み—」と題し、1982 年に工業技術院の情報基盤研究プロジェクトより研究が開始され、世代交代をしながらデータベース化に取り組みされている Spectral DataBase System for organic compound, SDBS について紹介された。現在 SDBS には、 $^1\text{H-NMR}$ ・ $^{13}\text{C-NMR}$ ・質量分析・赤外吸収の 4 種スペクトルが公

開されており、その総数は **116,147** 件、平均アクセスは 1 日あたり **10** 万件にも上る。価値の高い最高級の精度を持つスペクトルを収録する為に、研究者が試薬の入手、データ取得と帰属の付与、公開、管理を担当されており、継続的に使用できるデータベース維持に尽力されているとの事。今後、ランディングページの整備なども控えているとの事で、より開かれた **SDBS** となり、更なる利用者の拡大が見込まれる。

最後の講演は、中嶋 隆人氏（理研）より「理論分子科学と京コンピュータ」と題し、国産の汎用分子科学計算ソフトウェアである「**NTChem**」の特徴と、スーパーコンピュータ京を利用したマテリアルズ・インフォマティクスによる材料設計シミュレーションについて紹介された。「**NTChem**」は既存の計算機能を有するだけではなく、独自の量子化学的計算手法を利用できることから、適用範囲が広がった事を特徴に挙げられた。また、京コンピュータを利用したマテリアルズ・インフォマティクス手法により、新世代太陽電池の有望材料であるペロブスカイト結晶構造材料の開発では、実合成に先立ち、**11,025** 個の化合物の組み合わせの中から、低毒性非鉛化の候補化合物を **51** 個まで絞り込む事が出来、今後の実合成が期待される事が紹介された。多くの候補材の中から可能性のある材料を絞り込める事は、開発のスピードアップや開発費用削減に繋がる非常に魅力的な内容であり、今後、本定例会において活用事例発表などが増える事を期待する。

例会の最後に、本研究懇談会副運営委員長の菅沼こと氏（帝人）より、次回の第 **391** 回が **2月9日（金）** に新大阪丸ビル新館にて開催される旨案内があった。

また例会後、近くのイタリアンレストランで懇親会が開催され、講師を交えて歓談の輪が広がり盛況のうちに終了となった。

[スターライト工業 小野美奈]