

プロジェクト名(タイトル):代謝混合物の NMR シグナルの in silico 同定法の高度化

利用者氏名:黒谷篤之

理研における所属研究室名:環境資源科学研究センター 環境代謝分析研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

複雑な混合物中の化合物の組成分析に利用される核磁気共鳴法(NMR)は、食料、材料、環境試料などの複雑系の開発、評価につき、非侵襲的に物性情報等の取得が可能な利点がある。しかし、本データを利用した物性評価、同定、特性把握は明確には確立されてない。そこで、我々は、NMR データ、量子化学計算、分子動力学計算、機械学習などを利用したアプローチにより各物質の物性評価法等の構築を試みている。本年度は、比較的大きな物質への適用の確認について、上記機械学習等へ導入する計算パラメータとしての記述子取得の可否の確認を目的として、HOKUSAI を用いて、物質の双極子モーメント値、エネルギー状態を Gaussian16 により確認した。尚、上記の比較的大きな物質としては PVA (Polyvinyl Alcohol) の情報取得の可否の確認をした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ケン化度、窒素含有状態の異なる PVA 関連ポリマー、およびビニルアルコールの SMILES を作成し、Gaussian16 プログラムを用いて構造最適化後、双極子モーメント、エネルギー状態を Gaussian16 により確認した。尚、今回は、計算コストを考慮し、PVA は 10 量体~25 量体での情報取得の検証をした。また、計算レベルは、B3LYP/6-31G\*を選択、可視化は GaussView を利用した。

3. 結果・まとめ

上記により、大きな分子であっても一定の数値を得ることは出来、左記値を今後の計算に利用出来る事を確認した。

4. 今後の計画・展望

物質の NMR 磁気緩和時間、およびスピン結合定数については、既に計算による取得可能性を確認している。これらデータに今回の上記計算によるパラメータを加えたデータから、機械学習、計算科学による

混合物中の化合物の同定・特性把握・物性評価法等の確立を目指す。