

相転移挙動の予測と制御に向けたインシリコ液晶ライブラリの構築

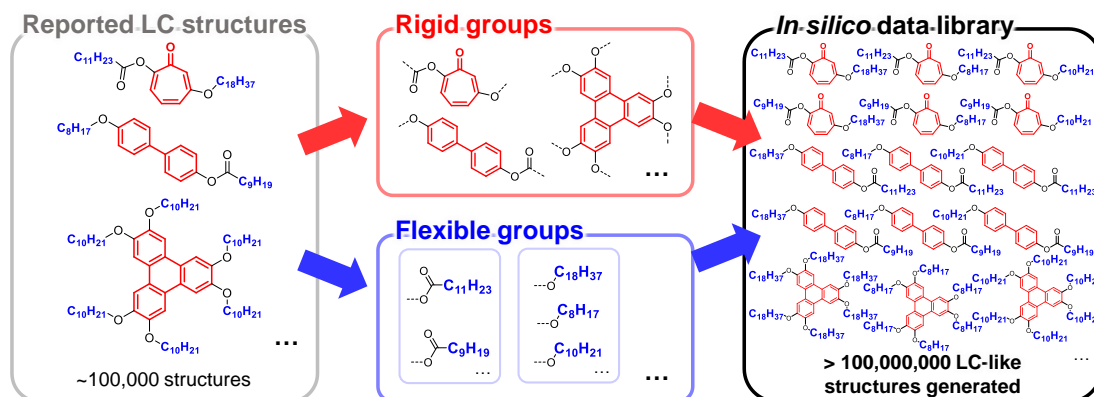
(京大院理¹・阪大院基礎工²・九大IMI³) ○須賀 健介¹・内田 幸明²・鍛冶 静雄³・齊藤 尚平¹

Development of an *in silico* Liquid Crystal Data Library for Predicting and Controlling Phase Transition Behaviors (¹Graduate School of Science, Kyoto University, ²Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ³Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University) ○Kensuke Suga,¹ Yoshiaki Uchida,² Shizuo Kaji,³ Shohei Saito¹

In recent years, many studies have been conducted to regress physical properties from molecular structures based on data. In this process, it is important to prepare a data library within the target chemical space of interest. To design liquid crystal molecules with predicted phase transition behaviors, we have constructed an *in silico* data library of liquid crystal compounds with high synthetic accessibility. The data library contains more than 100 million liquid crystal-like structures, which have been generated by applying the RECAP^[1] (Retrosynthetic Combinatorial Analysis Procedure) method to connect rigid and flexible groups of liquid crystal molecular structures recorded in LiqCryst^[2] database.

Keywords : Liquid Crystal; Chemical Space; Chemoinformatics; LiqCryst; RECAP

近年、データライブラリを用いて、分子構造から物性予測モデルを構築する研究が盛んに行われている。その際に、対象となる化合物空間を定義することは重要である。今回、狙った相転移温度や相転移エンタルピーを示す液晶分子の設計を目指して、合成可能な液晶化合物ライブラリを計算化学的に構築した。具体的には、RECAP法 (Retrosynthetic Combinatorial Analysis Procedure)^[1]を応用することで、データベース LiqCryst^[2]に収録されている液晶分子構造(約10万件)の剛直部と柔軟基を分類して再連結し、1億件以上の合成容易な液晶様構造のインシリコライブラリを構築した。本発表では、ライブラリの構築手法や教師なし学習などライブラリの活用事例について報告する。



[1] X. Q. Lewell, D. B. Judd, S. P. Watson, M. M. Hann, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1998**, 38, 511–522.

[2] V. Vill, *LiqCryst* 5.3, LCI Systems, **2021**.