

## スペクトルデータに基づく化合物の自動構造予測手法の開発

(早大先進理工<sup>1</sup>・早大理工総研<sup>2</sup>) ○熊谷 拓海<sup>1</sup>、中嶋 裕也<sup>2</sup>、清野 淳司<sup>1,2</sup>

Development of automatic prediction method for molecular structure based on spectral data (<sup>1</sup>Advanced Science and Engineering, Waseda University, <sup>2</sup>Waseda Research Institute for Science and Engineering) ○Takumi Kumagai<sup>1</sup>, Yuya Nakajima<sup>2</sup>, Junji Seino<sup>1,2</sup>

With the rapid progress in automated experiment in recent years, it is important to develop accurate and efficient methods to automatically predict molecular structure. In this study, we constructed a system that automatically identifies the compound by generating candidate structures from three types of spectral information (IR, MS, and NMR).

**Keywords :** Automatic structure prediction; Spectral data; Quantum chemical calculation; Molecular generator; Cheminformatics

**【緒言】**近年、自動実験の実用化に向けた技術開発が進んでおり、化合物同定を自動化するための高精度かつ高効率な手法の開発は重要である。本研究では IR、MS、NMR などの各種スペクトル情報や量子化学計算を利用して、化合物の構造を自動的に予測するシステムを開発した。

**【方法】**システムの流れを図 1 に示す。本システムでは①IR スペクトルによりフラグメントを抽出し、②フラグメントの組み合わせから取りうる化合物を生成する。次に③MS から得た分子量から候補を絞り込み、④NMR スペクトルと量子化学計算の結果を比較し、ランキング形式で化合物を予測する。本発表では特に一連の流れの妥当性を検証するため、以下のような制限を設けた。

①では PubChem から分子を抽出し、BRICS 分解によりフラグメントを得た。③では PubChem から分子量を取得した。④では PubChemQC<sup>1</sup> から取得した 3 次元構造を元に DFT により算出した核磁気遮蔽定数を用いた。本システムにおいて、候補分子の生成には RDKit モジュール内の BRICSBuid を利用した。候補分子の構造はまず複数の配座を自動生成し、構造最適化を行った後のエネルギーが最も低いものを用いた。安定構造と核磁気遮蔽定数は B3LYP/6-31G(d)により算出した。

**【結果】**テスト計算として、6-methyl-3-propan-2-yl-2-propoxybenzoic acid を目的分子としたときの一連の結果を図 2 に示す。この結果から各種スペクトルに対応する情報を用いることで候補分子を絞ることができ、核磁気遮蔽定数の統計的誤差 (RMSD/ppm) が最も小さくなった第一候補分子が目的分子と一致することが確認された。

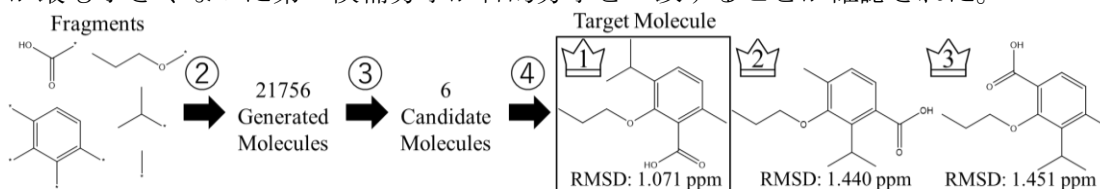


Fig. 1. Flowchart of the automatic structure prediction

Fig. 2. Result of proposed system in 6-methyl-3-propan-2-yl-2-propoxybenzoic acid

1) M. Nakata, T. Shimazaki, *J. Chem. Inf. Model.* **2017**, *57*, 1300–1308.