

分子発生プログラムによる新規縮環骨格の探索システム構築とその合成

(埼玉大院理工¹・MI-6 株式会社²) ○横田 美里¹・古川 俊輔¹・笹岡 星志²・入江 満²・斎藤 雅一¹

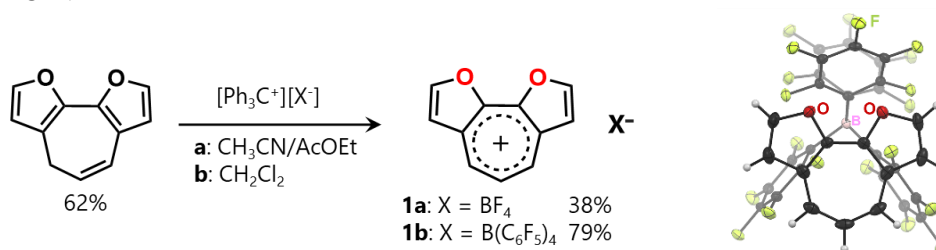
Structure Hunting of Annelated Molecules by a Molecule Generation Program and their Synthesis. (¹Department of Chemistry, Graduate School of Science and Engineering, Saitama University; ²MI-6 Co., Ltd.) ○Misato Yokota,¹ Shunsuke Furukawa,¹ Seiji Sasaoka,² Mitsuru Irie,² Masaichi Saito¹

The molecular designs for π -conjugated molecules have generally been based on the knowledge and intuition of researchers. However, by applying a computation program to find molecules, we chemists would meet new frameworks beyond the scope of human thought. In this study, we carried out an exhaustive search of new π -conjugated skeletons by using our original molecule generation program.

We set restrictive conditions to generate molecules, "a simple structure with high symmetries", to avoid complicated molecular structures that are difficult to synthesize. This search found 141 new molecules, and the mouse-like molecule **1** was selected as the synthetic target. We succeeded in synthesizing the target molecule **1** and elucidating its molecular structure (Fig. 1).
Keywords : Materials Informatics; π -Conjugated Molecule; Tropylium; Molecular Design

従来までの π 共役化合物の新規骨格の探索は、研究者の知識と直感を基に行われてきた。しかし、このような分子探索にビッグデータを活用したプログラムを適用することで、ヒトの知見や発想による制限を離れた新規骨格を発見できると考えられる。本研究では、独自の分子発生プログラムを構築することで新規 π 共役骨格の網羅的な探索を行った。

探索する新規骨格の発生条件は、合成困難な複雑分子系を避ける目的で、「対称性の高いシンプルな構造」とした。使用元素を水素、炭素、酸素に限定し、かつ天然物によくみられる 3-8 員環の縮環構造をモチーフとして組み込むこととした。探索の結果、新規分子が 141 個得られ、その中からねずみ型分子 **1** を合成ターゲットとして選定した。硫黄類縁体¹⁾の合成法を参考に、目的分子 **1** を合成し、その構造を明らかにした(Fig. 1)。



1) Asai, K.; Fukazawa, A.; Yamaguchi, S. *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 17571–17575.