配布先：学長定例記者会見参加報道機関

PRESS RELEASE

山形大学 Yamagata University

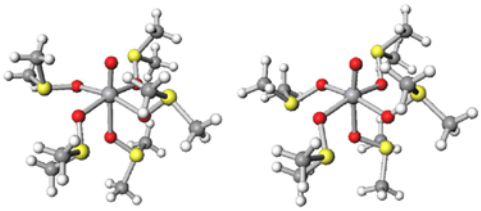
令和２年（2020年）3月19日

ＡＩが柔軟な分子の立体構造予測に成功

～8000以上ある候補から正解を的中～

【本件のポイント】

●基本となる分子構造をAIに学習させることで分子構造予測に成功
●AIによる柔軟な金属錯体の構造予測は、世界初
●材料設計や薬剤開発におけるAIの守備範囲が広がった



実際の立体構造　　予測した立体構造

【概要】

山形大学学術研究院の﨑山博史教授（錯体化学）らは、柔軟な金属錯体分子の立体構造を AI（人工知能）に予測させることに成功しました。分子の立体構造予測は、物質の性質を理解したり、生命の謎を解き明かしたりするだけでなく、有用な機能を持つ物質を作り出したり、薬剤を開発したりする応用分野でも必要とされています。しかし金属元素が含まれる分子（金属錯体分子）では立体構造予測が難しく、ほとんど行われていません。この問題を解決するために、分子がとりうる立体構造をすべて見つけ出し、その構造の中から正解を AI に予測させる戦略をとりました。今回、基本データとなる対称性の高いマグネシウム錯体の構造を多数 AI に学習させることで、より対称性の低いバナジウム錯体の構造を 8000 以上の可能性の中から見事に的中させました。分子構造予測の分野では、早く正確に分子の形を見つけ出すことが要求されますが、今回の予測では、膨大な計算なしで、一瞬で正解を導き出すことができました。金属錯体は、電池の電解液や酵素の活性中心でも活躍する重要な化合物です。AI による柔軟な金属錯体の構造予測は世界で初めてであり、材料設計や薬剤開発における AI の守備範囲が広がったと言えます。今後は、基礎、応用の両面での研究開発の進展が期待されます。なお、本研究成果は、英国王立化学会誌「RSC Advances」に 3 月 6 日付で掲載されました。

【背景】

科学が発展した現代においても柔軟な分子の立体構造予測は難しく、近年は、タンパク質の立体構造予測や、結晶構造予測の世界コンテストが実施されるなど、世界中の研究者がしのぎを削っています。金属錯体は、電池の電解液や酵素の活性中心でも活躍する重要な化合物ですが、小さな分子でも、とりうる形の数が多く、構造予測が難しい物質の一つです。

【研究手法・研究成果】

AI（人工知能）技術のひとつであるディープラーニングを用い、コンピュータに情報を学習させ、コンピュータに立体構造を予測させました。どのような情報をどのように学習させるかが結果の明暗を分けるのですが、今回は対称性が高いマグネシウム錯体の構造を多数学習させ、より対称性の低いバナジウム錯体の構造を予測させました。このバナジウム錯体は 52 個の原子からなる比較的小さな分子ですが、8000 以上の可能な形が存在します。今回のデモンストレーションには答え合わせが必要であるため、バナジウム錯体結晶中の実際の立体構造を X 線結晶構造解析という手法で調べておいたのですが、AI による立体構造予測は、実際の立体構造と一致する結果を導き出しました。

【今後の展望】

電池から酵素まで、金属錯体が活躍しています。AI を産業利用するうえで、金属錯体が取り扱えるようになれば、材料設計や薬剤開発における AI の守備範囲は一段と広がります。今後、基礎・応用の両面で進展が期待されます。

お問い合わせ
山形大学 学術研究院 教授 﨑山（さきやま） 博史（ひろし）　（錯体化学）
TEL　023-628-4601　　メール saki@sci.kj.yamagata-u.ac.jp

※用語解説

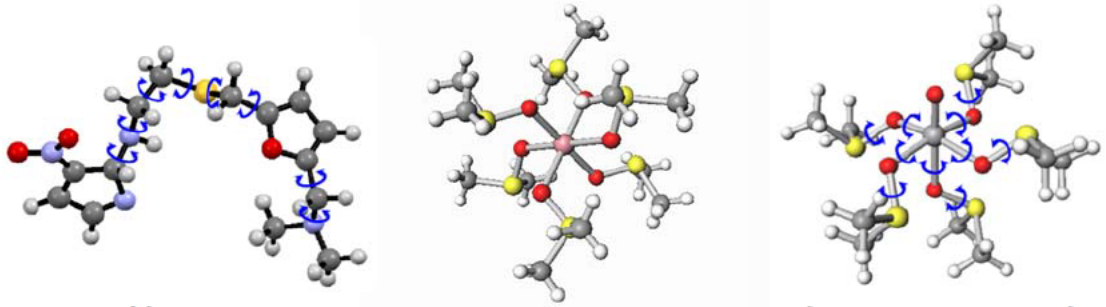
1．柔軟な分子：変形可能な分子。人間で言えば、肘や肩の関節を回すように変形する。
2．柔軟な分子の立体構造：人間で言えば、姿勢にあたる。人間も立ったり、座ったり、手を挙げたり、いろいろな姿勢をとることができるように、柔軟な分子はいろいろな立体構造をとりうる。
3．柔軟な分子の立体構造予測：人間で言えば、とりやすい姿勢を予測することにあたる。「この仕事場では座った姿勢の人が一番多い」というように一番多い姿勢を予測することもあれば、「座っている人が 8 割、立っている人が 2 割、寝ている人はほとんどいない」というように分布を予測することもある。
4．金属錯体：金属元素を含む化合物。血液の赤い色は鉄錯体の色。ビタミン B12 はコバルト錯体。
5．酵素の活性中心：酵素の中で化学反応が進行する場所。
6．X 線結晶構造解析：この方法を用いることで、結晶中の分子の立体構造を調べることができる。

【論文情報】

雑誌名：RSC Advances
論文タイトル：Detailed magnetic analysis and successful deep-neural-network-based conformational prediction for $[VO(dmso)_5][BPh_4]_2$
著者名：﨑山博史、安孫子誉晃、吉田光佑、正村薫、三橋了爾、香山祥輝、御厨正博、鯉川雅之、満身稔
所属： 山形大学、金沢大学、関西学院大学、佐賀大学、岡山理科大学
URL：https://doi.org/10.1039/D0RA00854K
公表：2020 年 3 月 6 日

ＡＩが柔軟な分子の立体構造予測に成功
～8000以上ある候補から正解を的中～

金属元素を含む柔軟な分子の立体的な形を予測



柔軟な分子　　**分子の動き**　　**今回の予測対象**
(8271個の形)

身の回りの物質はすべて、分子レベルの立体的な形をち、その形を知ることは、物質の性質を深く理解するうえで重要です。特に変形可能な**柔軟な分子**の形は実際に調べることが難しく、**予測**が重要になります。しかし**金属元素を含む柔軟な分子**の場合、**とり得る形**が多く、しらみつぶしに検討すると時間がかかります。そこでAIに予測してもらうことを考えました。

オリジナリティー：金属元素を取り扱った点、すべての形を考慮した点、形の情報として原子間距離の集まりを用いた点

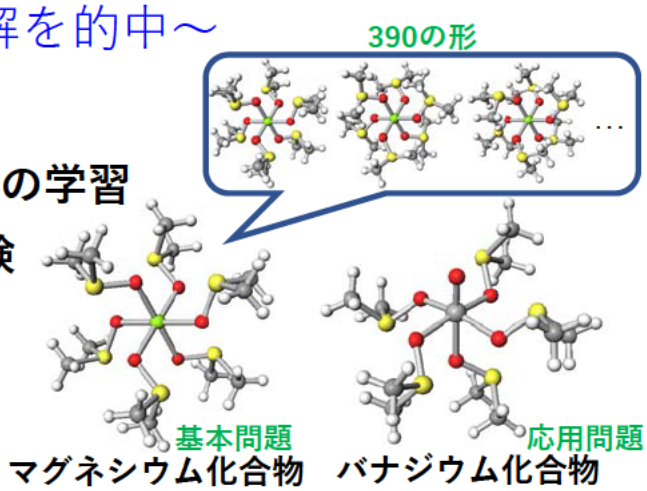
ＡＩが柔軟な分子の立体構造予測に成功
～8000以上ある候補から正解を的中～

AIによる学習と予測

訓練：基本問題(練習問題)の学習

試験：別の基本問題で試験

予測：応用問題に挑戦



マグネシウム化合物　**バナジウム化合物**

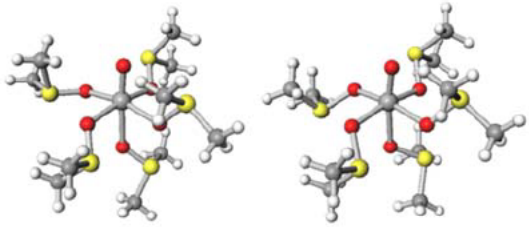
今回、対称性の高い六枚羽根のマグネシウム化合物の形(390個) について、**原子間距離の集まりのデータ**と五段階評価による可能性の高さのデータの関係を**基本問題**として準備しました。この基本問題の7割(273問)を練習問題としてAIに学習させ、残りの３割(117問)を試験問題としてAIの到達度判定に用いました。

AIが十分に学習したら、応用問題として対称性の低い五枚羽根のバナジウム化合物の形を予測させます。

オリジナリティー：形の情報として原子間距離の集まりを用いた点

ＡＩが柔軟な分子の立体構造予測に成功
～8000以上ある候補から正解を的中～

基本となる分子の学習のみで
対象となる別の分子の予測に成功



実際の立体構造　　予測した立体構造

膨大な計算なしで、
一瞬で正解の形を予測！

今回、基本問題しかAIに学習させていないのに、応用問題で正解できた点がポイントです。秘密は学習のさせ方にあり、分子の形を**原子間距離の集まり**として教えたことが鍵となっています。

特定の予測に対して、**決定打となるデータ**もあれば、役立たないデータもあります。今回の予測の特徴は、役立たないデータをすべて捨て、**役立つオリジナルのデータ**を作って用いた点にあります。

金属元素を含む柔軟な分子の立体的な形が予測可能になることで、ドラッグ・デザインやマテリアル・デザインなどの応用分野でも分子構造予測の利用と発展が期待できます。