

## AIの化学への応用が進展してきた

### ◆MIによって超電導物質が発見された

2018年8月、物質・材料研究機構と愛媛大学の研究チームは、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）という手法を用いて、新しい超伝導物質を発見したと発表した。MIは、膨大な情報をもとに必要な知識を取り出すデータマイニングなどの情報科学を通じて、新材料や代替材料を効率的に探索する取り組みである。人工知能（AI）技術の一つである。

研究チームは、10万個以上の無機物質の結晶構造データが蓄積されているデータベースから、電子状態を計算できる候補物質、約1,500個を選択し、さらに27個に絞り込んだ。この27個のうち、実際に合成しやすい物質としてSnBi<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>とPbBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>という2つの物質が得られた。この2つの新しい物質は、高圧力下で超電導を発現することが確認された。

今回開発された手法をさらに展開することで、室温超伝導物質などの革新的な機能性物質を発見する可能性が開けてきた。

### ◆AIによって化学物質の毒性の予測が動物実験よりも正確になってきた

18年6月、米国Johns Hopkins大学の研究チームは、ビッグデータのデータマイニングによって化学物質の毒性を予測できたと発表した。2年前に研究チームが作成した世界最大の化学データベースを用いて、AIによって10,000の化合物と800,000の毒性データを解析した。

皮膚刺激性やDNA損傷などの毒性について9種類の動物テストの結果と比較して、AIによる解析では87%の正確さで予測が的中した。ちなみに実際の動物実験における予測の精度は81%であった。研究チームはコンピュータ解析による毒性予測が動物実験に置き換わり、より正確な予測が可能になると考えている。

構造活性相関やコンビナトリアルケミストリーなどの技術が開発されたときにも、化学品の合成や機能の予測が可能になるといわれたが、期待されたほどの発展は見られなかった。AIによる化学合成やその機能の推定に期待しすぎるのも危険だが、新しい技術としての発展を見守りたい。

【松村晴雄】