

1・はじめに

液晶ディスプレイ（LCD）は、1968年に提案されたDS（Dynamic Scattering）方式に始まり、さらに低消費電力化が可能なTN（Twisted Nematic）方式、STN（Super Twisted Nematic）方式、TFT（Thin Film Transistor）を用いたアクティブマトリックスLCDと表示品位が向上され、時計・電卓からワープロ、携帯電話、PCモニター等に採用されてきた。

近年においては、LCDの視角依存性を軽減することを目的にIPS(In Plane Switching)方式やMVA(Multi-domain Vertical Alignment)方式が提案され大型テレビにまで用途が拡大している。

これらの表示方式は、液晶材料のもつ分子の長軸、短軸における誘電率異方性 ($\Delta \epsilon$)、屈折率異方性 (Δn) などの性質を用い、電場の印可により生じる電気光学効果を利用しているが、各表示方式により要求される液晶材料の特性はそれぞれ異なる。

液晶化合物の開発においては、各表示方式に要求される特性に合わせた分子設計を行う必要があるが、誘電率異方性や屈折率異方性を制御する化学修飾は比較的容易であり、また、これらの物性を理論的に予測することも可能である[1]。しかし、基本となる分子構造に対し誘電率異方性や屈折率異方性を制御するために行う化学修飾により、表示素子に必要なネマチック相を消失または表示素子に不適当なスメクチック相に変化させてしまう場合がある。

このように、液晶材料の特性を制御するために行う化学修飾に伴う液晶相の変化を合成前に予測できれば、好ましい液晶化合物を効率よく開発することができる。

そこで、我々はQSAR手法により化合物の構造情報のみからネマチック相発現の有無を高い精度で予測するモデルを開発することを目指して、ニューラルネットワークを用いた分子構造と液晶相の相関を解析する研究を行い、どの程度の的中率でネマチック相発現の有無を予測できるか検討した。

2・計算手法

2. 1 ニューラルネットワークの構造

本研究では、ニューラルネットワークは入力層、中間層、出力層各 1 層から成る 3 層構造のニューラルネットワークを使用した。入力層に化合物の構造を特徴づける記述子を入力し、出力層には各化合物のネマチック相の有無を教師データとして入力した。したがって入力層のユニット数は記述子の数とし、出力層のユニット数は 1 とした。

2. 2 解析に使用した化合物

液晶化合物の基本的な化学構造は図 1 に示すような一般式で表すことができる。すなわち、C1-X1-C2-X2-C3 で代表されるコア部分と R1、R2 で示されるパラ位の末端置換基からなっている。本研究で使用した化合物は自社で相転移点を測定した化合物の中から、ニューラルネットワークの実用性を検証するためにも、なるべく類似性の少ない多様性に富んだ図 1 に示した部分構造を有する化合物を 200 種選択した。

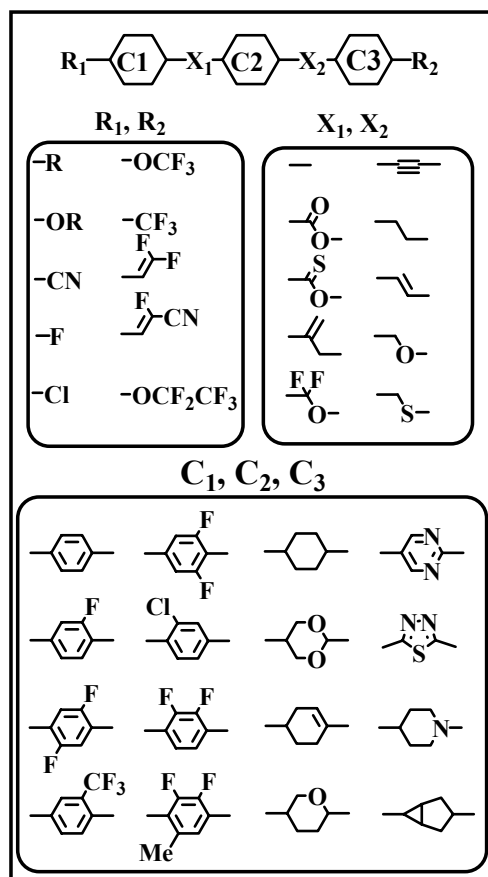


図 1 解析に使用した化合物

*m.ushioda@chisso.co.jp

2. 3 記述子データの作成と選択

解析に使用した記述子は、各化合物についてMOPAC Ver. 6.0 AM1法[2]による分子軌道計算を行い、得られた分子構造を基に分子の長さや幅、体積といった幾何情報及び双極子モーメントや分極率といった物理的情報を60種類程作成し、先験的知識と影響度解析により、以下の8種の記述子を選択した。

構造記述子としては各化合物における、分子体積、log P、最大正電荷、分子短軸方向の分極率、双極子モーメント、分子第一軸の慣性モーメント、HOMO-LUMOのエネルギー差、LUMO+1の軌道エネルギーを用いた。ここでlog Pには実測値ではなく、Nysのパラメータ[3]を基にした化学構造からの推算値log Pを用いた。したがって、8種の記述子はいずれも化学構造から簡単に計算できる量であり、実測値は用いていない。ニューラルネットワークに入力する際の構造記述子は0.1～0.9の範囲に収まるように規格化した数値を用いた。

出力層の教師データにはネマチック相を発現する化合物に0.9、発現しない化合物に0.1の値を入力した。このように、教師データを0～1でなく、0.1～0.9に規格化したのは、ニューラルネットワークのユニット(ニューロン)において数値変換に使われているsigmoid関数の特性を考慮したためである。また、テスト化合物の予測的中率の判定においては、出力層の値が0.5以上ならネマチック相あり、0.5以下ならネマチック相なしと判定した。

2. 4 ニューラルネットワークの学習

本研究では、ニューラルネットワークのソフトウェアは富士通のNEUROSIM/Lを用い、学習はエラーバックプロパゲーション法で行った。エラーバックプロパゲーションのアルゴリズムにおける重みの修正量を計算する式に現れる学習定数の値はNEUROSIM/Lのデフォルトであるlearning rate (ϵ) = 5.0、momentum term (α) = 0.1を用いた。ニューラルネットワークの学習の収束条件としては、すべての学習データについて出力値と学習データ値との差が0.4以下、すなわち、ネマチック相を発現する化合物では出力値が0.5以上、ネマチック相が発現しない化合物では出力値が0.5以下になれば学習が収束したと見なした。

今回使用した200種の化合物は学習用150種と検証用50種にふりわけ、学習用化合物のみを用いてニューラルネットワークを学習し、検証用化合物50種の計算結果を基に的中率を判定した。

3. 結果及び考察

150種の学習データを使用して図2に示すニューラルネットワークで学習させた結果、約3000回の学習により全データが収束した。

この結果を基に、表1に示す検証データ50種による検証を行ったところ、ネマチック相を持つ化合物34種の内31種を、ネマチック相を持たない化合物16種の内15種を正確に判別し、その的中率は92%であった。

これらの結果より、液晶相の予測においてニューラルネットワークが有効な解析手段であることを確認した。

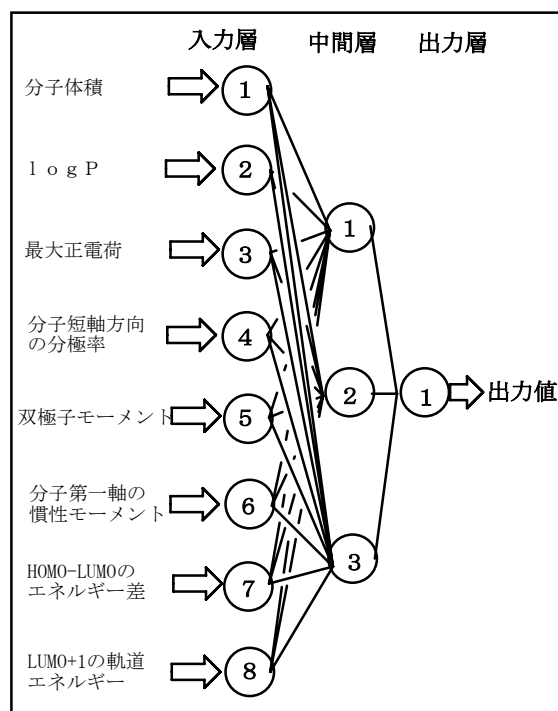


図2 ネマチック相発現予測に用いたニューラルネットワーク

表1. ニューラルネットによる分類結果

学習データ内訳 (150)		検証データ内訳 (50)		正解数 (46)
N相有り (90)	N相無し (60)	N相有り (34)	N相無し (16)	的中率 92%

・ 参考文献

- [1] A.Fjita, M.Ushioda, H.Takeuchi, T.Inukai, and D.Demus, Mol.Cryst. Liq. Cryst., 331,305(1999)
- [2] M.J.S.Dewar, E.G.Zoebisch, E.F.Healy, and J.J.P.Stewart, J.Am.Chem.Soc.,107,3902(1985).
- [3] G.G.Nys, and R.F.Perker, Eur.J.Med.Chem., 4, 361(1974).