

2023 年度年次報告書

社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出

2023 年度採択研究代表者

久保 拓也

京都大学 大学院工学研究科
准教授

分子・情報技術の創発による液相分離の限界突破と社会実装

主たる共同研究者：

高谷 光（帝京科学大学 生命環境学部 教授）

吉田 亮（情報・システム研究機構 統計数理研究所 教授）

研究成果の概要

高速液体クロマトグラフィー (HPLC) における微弱な分子間相互作用の拡張を目的として、 π 相互作用を強く発現する新規分離剤の開発に着手した。芳香環に起因する π 相互作用を獲得するため、マイクロ波反応を用いて、シリカゲル表面にグラフェンを固定化することに成功した。また、ハロゲン結合のみを利用した分子インプリント樹脂を合成し、HPLC における保持選択性を評価した結果、配向性を持った高い保持選択性が確認された。同様に、フッ化アルキルを含む分離剤を製作し、HPLC 分離剤として利用した結果、効果的なフルオラスアフィニティを確認することができた。

フラーレン結合型分離基材の合成検討を行うため、マグネトロン型および半導体発振型マイクロ波反応装置の開発と反応検討を行った。その結果、収率～40%でフラーレンとリンカー分子の結合反応が進行することを見出した。また、先端放射光 X 線分析では、分離基材の顕微 X 線 CT 撮像および溶液 XASF による分離基材－分離材相互作用評価のための溶液セル開発を行った。久保らが開発したモノリスシリカキャピラリーの顕微断層撮像に成功し、密度分布構造の 3 次元画像化と密度分布の数値化・可視化に成功した。

次に、液相分離データベースと統計的機械学習・分子シミュレーションの先進技術を融合し、広大な分離場空間と物質空間に適用可能な社会実装に資する保持時間予測モデルを構築することを目的として、既存オープンデータベース (METLIN SMRT) の収集と既存手法のベンチマークテストを行った。このデータを用いて分子フィンガープリントやカーネル平均埋め込みに基づく分子記述子から保持時間を予測するモデルを訓練した。その結果、既存手法と同等かそれ以上の予測精度が得られた。また、転移学習という手法を用いることで、モデルの汎化性能を改善できることが確認された。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Noda, K. Wakiuchi, A. Hayashi, Y. Yoshida, R. Advancing extrapolative predictions of material properties through learning to learn, *arXiv preprint*, 10.48550/arXiv.2404.08657
- 2) Kubo, T. Yagishita, M. Tanigawa, T. K-Yamada, S. Nakajima, D. Enhanced molecular recognition with longer chain crosslinkers in molecularly imprinted polymers for an efficient separation of TR active substances, *RSC Advances*, **14**, 12021–12029 (2024), 10.1039/d3ra08854e