

2024 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

京都府立大学 大学院生命環境科学研究科
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

グループ 1 では、中間目標の一つである、ベンゼン H6/D6 の分離を目的として、グラフェンを固定化した新たな分離固定相の作製と分離カラムとしての保持選択性を評価した。最適化条件で作製したカラムを用いて、移動相にヘキサンを用いた HPLC 評価において、ベンゼン H6/D6 のベースライン分離に近い分離が達成された。また、その他の成果として、フッ化アルキル型固定相、酸化金属ナノワイヤー固定相などの新規分離カラムの開発にも成功し、本研究の新たな分子間相互作用の獲得に成功した。

グループ 2 では、溶液状態サンプルの放射光計測に必要な溶液セルの開発及びこれらを用いた放射光計測に注力した研究を行った。その結果、各種溶液サンプルの放射光計測による分子構造決定や電子状態・相互作用決定に成功し、物理化学的特性を表す記述子(電子状態、物性、溶解性)に直結する物理パラメータの取得に成功した。また、Grignard 試薬などの有機金属反応剤・触媒を用いる新規手法の開拓に取組んだ。その結果、C60/C70 を高効率・高選択的にモノスリカに導入・担持するための C60/C70 誘導体の合成に成功した。

グループ 3 では、液相分離データベースと機械学習・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。当該年度は、複数のカラム・移動相の液相分離データの集合体である RepoRT (Kretschmer et al., *Nature Methods* 21, 153–155 (2024)) と当グループが開発している分子動力学シミュレーションデータベース RadonPy を用いて、保持時間予測基盤モデルのプロトタイプを構築した。さらに、特定のカラム・移動相のデータを用いた転移学習において、スケーリング則が成り立つことを明らかにした。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Novel separation media with metal oxide nanostructures for capillary electrochromatography, K. Nakano, R. Kamei, E. Kanao, T. Hosomi, S. K-Yamada, Y. Ishihama, T. Yanagida, **T. Kubo***, *ACS Meas. Sci. Au*, 5, 199-207, 2025
- 2) Evaluation of fluororous affinity using fluoroalkyl-modified silica gel and selective separation of poly-fluoroalkyl substances in organic solvents, A. Tadano, Y. Watabe, T. Tanigawa, S. K-Yamada, **T. Kubo***, *J. Sep. Sci.*, 47, 2400121, 2024
- 3) Advancing extrapolative predictions of material properties through learning to learn using extrapolative episodic training, K. Noda, A. Wakiuchi, **Y. Hayashi**, **R. Yoshida***, *Commun. Mater.*, 6, 36, 2025
- 4) SPACIER: on-demand polymer design with fully automated all-atom classical molecular dynamics integrated into machine learning pipelines, S. Nanjo, Arifin, H. Maeda, **Y. Hayashi**, K. Hatakeyama-Sato, R. Himeno, T. Hayakawa, **R. Yoshida***, *npj Comput. Mater.*, 11, 16, 2025
- 5) Shotgun crystal structure prediction using machine-learned formation energies, C. Liu, H. Tamaki, T. Yokoyama, K. Wakasugi, S. Yotsuhashi, M. Kusaba, A. R. Oganov, **R. Yoshida***, *npj Comput. Mater.* 10, 298, 2024