

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ  
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

林 智広

東京工業大学  
准教授

マテリアルズインフォマティクスと実験の融合による階層的マルチスケールバ  
イオ界面の解析と医療用バイオマテリアルの開発

## § 1. 研究成果の概要

当該年度は金-チオール系の単分子膜を用いて、原子レベルで定義されたモデル有機表面の巨視的な水の接触角・タンパク質吸着量・細胞接着密度に関するデータ取得を行い、それらのデータを用いて機械学習を行い、単分子を構成する分子の化学構造との相関を解析した。文献値を用いた機械学習による予測は、正確性が低いのに対し、統一化

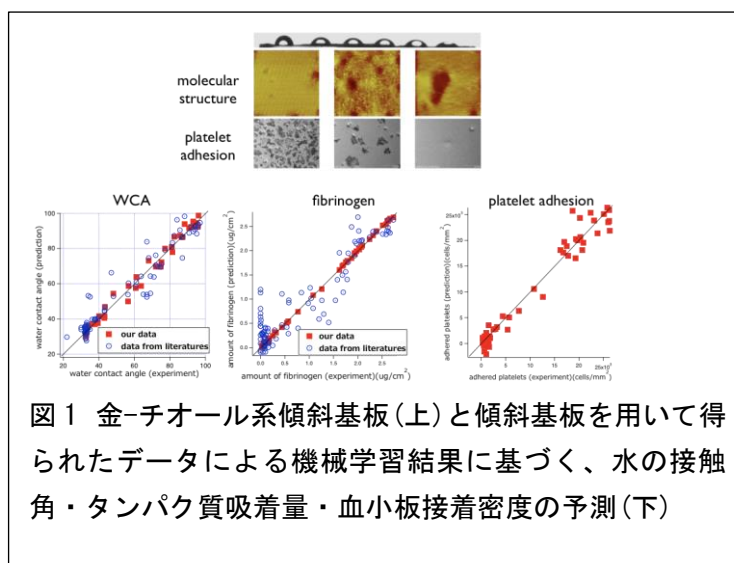


図1 金-チオール系傾斜基板(上)と傾斜基板を用いて得られたデータによる機械学習結果に基づく、水の接触角・タンパク質吸着量・血小板接着密度の予測(下)

された条件で得られたデータを用いた機械学習による予測は非常に正確性が高いことが証明された。計算科学を用いたデータの生成が不可能であるバイオの分野では、実験条件を標準化し、高品質なデータベースの構築が、バイオマテリアル設計において必要不可欠である事を明らかとした。

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 林 智広 (東京工業大学物質理工学院材料系 准教授)
- ② 研究項目
  - 人工物と接触した生体分子・細胞の応答に関するビッグデータを生成するプラットフォームの構築
  - 機械学習を用いた材料に対する生体分子・細胞の応答を予測する技術の開発
  - 人工物と細胞の界面における分子プロセスの解析