

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

林 智広（東京工業大学物質理工学院 准教授）

3. 事後評価結果

細胞や生体組織と接する医療用バイオマテリアル開発において、独自の界面解析実験手法とデータ科学手法により、目的に合わせた材料設計の実現を目指した研究である。過去の文献データはデータのばらつきが大き過ぎることから、バイオマテリアルの化学構造と機能に関するビッグデータを生成するための化学傾斜基板技術を新たに確立し、タンパク質吸着、細胞接着実験を行うことで、基礎物性(表面電荷、極性、水への濡れ性など)・機能(タンパク質吸着・細胞接着特性)に関する精度の良いデータを蓄積した。このデータベースを人工ニューラルネットワークで機械学習することにより、単分子膜を構成する分子の化学構造からタンパク質吸着、細胞接着を予測することが可能になった。

本研究は、実験条件にばらつきが出ない実験系を構築しデータを収集することができれば、構造や化学組成が複雑な生体分子を相手にするバイオマテリアル開発であってもマテリアルズインフォマティクスが有用であることを示した、先駆的な成果である。開発された化学傾斜基板技術は大掛かりな装置を必要とせず、手軽に利用できるもので、今後普及が期待される。