

研究成果

戦略的創造研究推進事業さきがけ
研究領域「超空間制御と革新的機能創成」
研究課題「細孔性結晶を用いた微量薬物の分解・代謝過程の可視化」



粘土遊びがヒントに
有機分子で自在にナノ構造体を作る

自在に形を作れる材料は物づくりに欠かせません。目に見えない分子の世界でも重要で、さまざまな合成反応の開発によって、ベンゼンのように大きさが1ナノメートル程度の小さな分子であれば精密に構造を作れるようになってきました。一方、数十～数百ナノメートルの巨大分子には高度な機能をいくつも持たせることができるため、世界中で活発な研究が行われています。しかし、小さな分子から巨大分子を作るとは困難でした。

北海道大学大学院工学研究院の猪熊泰英准教授らは、子どもの粘土遊びを見て、古代から壺や水瓶を作る方法の1つである「巻き上げ技法」に注目しました。そして、柔軟なひも状分子にカルボ

ニル基を多く入れることで「互いにペタペタくっつく」という粘土のような性質を持つ「カルボニルひも」を合成しました。

カルボニルひもは、水素結合などがひものいろいろな部分で起こり、固体状態で直線、S字、コの字など、従来の手法では形の維持が難しかったひも由来の曲線部を持つ構造を簡単に作る事ができる画期的な構造体です。

今後、これまで以上に精密で柔軟な巨大分子が作れるようになり、発光体や電子素子など機能性ナノ材料への応用が期待されます。

粘土を細長くひも状に伸ばし、グルグルと巻き上げながらつないで器を作っている(巻き上げ技法)(左)。同じ巻き上げ技法をカルボニルひも分子で行うと、分子変換のための触媒やガス分子を取り込むための容器を作ることができる。模様はアセチルアセトン誘導体(右)。

合成に成功した最長のカルボニルひもとベンゼンの比較(左)。柔軟なカルボニルひもは、例えば棒状の分子に巻き付くことで螺旋状に形を変えられる(右)。

研究成果

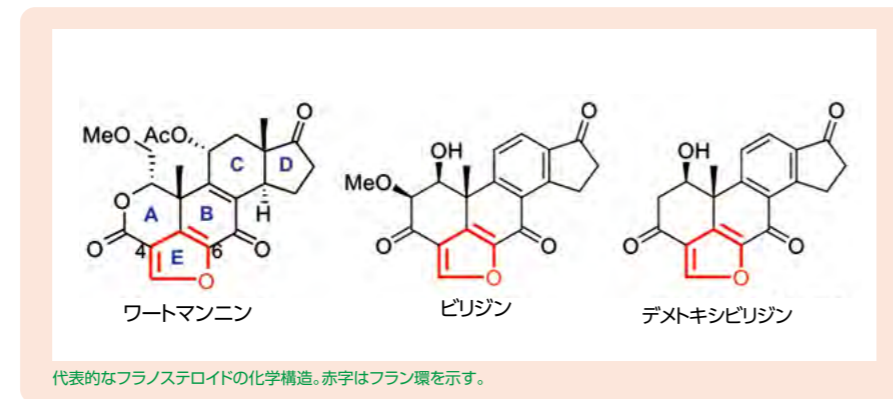
国際科学技術共同研究推進事業 戦略的国際共同研究プログラム(SICORP)
研究領域「日本-中国共同研究「生物遺伝資源分野」」
研究課題「植物共生菌相互作用の包括的利用による二次代謝産物の網羅的解析」



微生物の休眠遺伝子を目覚めさせて
新たなステロイド生合成経路を発見

自然界の生物は、分子量の小さい低分子化合物を介して互いに生育を促進したり阻害したりして共生していますが、研究室では一種類の微生物ごとに培養されるため、一部の化合物しか合成されていないと考えられています。実際に、生成物の知られていない生合成遺伝子が数多く存在し、これらは研究室の培養条件では発現しない「休眠遺伝子」と呼ばれています。眠っている遺伝子を覚醒させ、生合成の経路を解析する方法を確立できれば、新たな活性物質の生産につながると考えられます。

東京大学大学院薬学系研究科の阿部郁朗教授および、中国暨南(ジナン)大学薬学部の高オ・ハオ(高昊)教授、フダン(胡丹)副教授らの国際研究チーム



は、植物と共生している糸状菌が、抗炎症治療薬として働くフラボノイド化合物を生合成する機能を持つことに着目。ゲノム編集技術を用いて酸化酵素遺伝子を破壊し、その過程で蓄積する化合物や生合成に関わる反応経路を発見しました。

今後、共生微生物の遺伝子や化合物資源の解析法、活用法が構築されたり、医薬品や化合物などの類似化合物の合成に大きく役立つことが期待されています。

話題

情報企画部

急増する中国語の論文を日本語で読める
高精度な日中・中日機械翻訳システムの提供を開始

謝謝
ありがとう

你好
こんにちは

科学技術分野における中国の躍進はめざましく、中国語の論文などを日本語で検索、閲覧したいという需要が高まっています。しかし科学技術についての資料は、さまざまな専門用語や最新技術を表す新しい言葉が次々に出てくるため、技術内容を正しく伝える、より高い精度を持つ機械翻訳が望まれていました。

JST情報企画部と京都大学大学院情報学研究所(黒橋禎夫教授)は、中国科学技術情報研究所と連携して、2013年から科学技術論文を対象とした高精度の機械翻訳システムの実用化を推進する「日中・中日機械翻訳実用化プロジェクト」に取り組み、ニューラルネットワークを用いた高精度な日中・中

日機械翻訳システムを今年5月に公開しました。

科学技術論文などを基に400万件以上の中国語・日本語の対訳コーパス(同じ内容について複数の言語で書かれた対訳文)を整備し、開発したニューラル機械翻訳エンジンで学習させました。また、対訳辞書の整備によって誤訳、訳抜けを減らし、翻訳精度の向上を図りました。その結果、開発時に設

開発した日中・中日機械翻訳システム

日中・中日機械翻訳システム:
<https://webmt.jst.go.jp/>

定した評価基準で「ほとんどの重要情報が含まれる」が97パーセント、「情報に過不足がなく容易に理解可能」が約60パーセントの翻訳精度を達成しました。

研究成果

戦略的創造研究推進事業さきがけ
研究領域「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」
研究課題「超高速スクリーニング法を駆使したエネルギー変換材料の探索」



有機太陽電池の材料を人工知能で予測

有機太陽電池は、安価で軽量なことから実用化に向け世界中で研究が進められています。n型材料であるフルレネン誘導体など低分子化合物とp型材料である高分子化合物の混合物を溶かして塗布することで作られますが、高分子の構造には無数の組み合わせが存在します。混合膜の構造や太陽電池の性能は計算で予測できないため、これまでの方法では探索に限界がありました。

大阪大学大学院工学研究科の佐伯昭紀准教授らは、情報科学の力を使って、高分子構造を一瞬で選別し、性能を予測する手法を開発しました。

今回、手作業で集めた1200個の混合膜材料の化学構造や性能のデータ

セットを基にランダムフォレストを用いた分類器を構築し、人工知能(AI)による機械学習を行って、材料のデータから性能の予測ができるようになりました。その結果、すでに学習した化学構造に対しては95パーセント以上の正答率が得られました。

今後は、この手法を低分子材料にも応用

し、より高効率な太陽電池材料の探索を進めていきます。

電子供与基、電子吸引基、アルキル鎖から構成される高分子構造の例(上)。化学構造を指紋キーに変換し、ランダムフォレストで変換効率を分類する(中央)。機械学習、実験科学、研究者による判断の双方向の融合(下)