

生体高分子（被毛）の物性探究に向けた化学計測記述子開発

(理研 CSRS¹・横浜市大院生命医²・名大院生命農³) ○高村 彩里¹・塚本 楓²・坂田 研二¹・菊地 淳^{1,2,3}

Development of chemical measurement descriptors to explore physical properties of biopolymers (hairs) (¹RIKEN CSRS, ²Grad. Sch. of Med. Life Sci., Yokohama City Univ., ³Grad. Sch. Bioagri. Sci., Nagoya Univ.) ○Ayari Takamura,¹ Kaede Tsukamoto,² Kenji Sakata,¹ Jun Kikuchi^{1,2,3}

Polymers exhibit various physical properties depending on the higher-order structures as well as the monomers. Chemical measurement data can involve the structural information of polymers. However, the information extraction and association with the physical properties has been difficult. Herein, we collected biopolymer samples, hairs, from several species. The measurements of physical properties and chemical data (i.e., Autograph, solid-state NMR, TD-NMR, FT-IR, TG-DTA) were performed. The chemical measurement data were processed into the descriptors, then applied to machine-learning modeling to predict the physical properties (Figure 1). Consequently, some contributive factors such as α -helix structure of proteins were selected from over 900 descriptors.

Keywords: Measurement informatics; Polymers; Spectral analysis; Machine learning; Physical properties

高分子は、単量体種だけでなく高次構造の違いにより多様な物性を発現し得る。各種化学計測データは分子の構造情報を含むと期待されるが、その抽出や物性との関連付けは容易でない。本研究では、化学計測データに様々な情報分離・抽出処理を施すことで「化学計測記述子」を生成し、機械学習の回帰モデリングを用いて記述子と物性値間の関連性探索を試みた(図1)。試料は、生体由来の高分子である被毛を多動物種から収集した。引張試験により物性値(伸び率・切断強度・降伏点・弾性率)を評価し、化学計測として核磁気共鳴分光・時間領域核磁気共鳴分析・赤外分光・熱重量示差熱分析を行った。各化学計測データから生成した記述子を用いて、物性値予測モデルを構築したところ、タンパク質 α -ヘリックス構造等との関連性が示唆された。

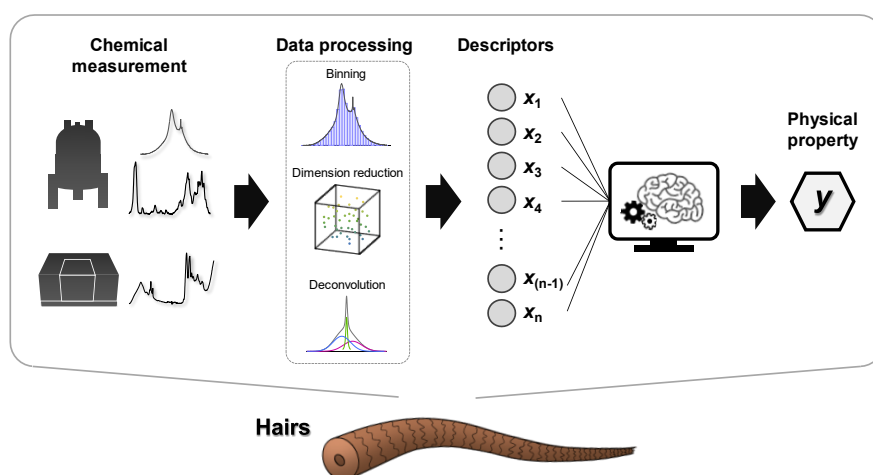


Figure 1. A schematic of generation of chemical measurement descriptors to predict physical properties of biopolymers (hairs).