MCBJ 法を用いた神経伝達物質の機械学習識別

Machine learning discrimination analysis of neurotransmitters measured with MCBJ method

阪大産研 [1]，　°小本祐貴 [1]，大城敬人 [1]，鷹合孝之 [1]，吉田剛 [1]，鷲尾隆 [1]，谷口正輝 [1]

°Yuki Komoto[1], Takahito Ohshiro[1], Takayuki Takaai[1], Takeshi Yoshida[1], Takashi Washio[1], Masateru Taniguchi[1]

E-mail: komoto@sanken.osaka-u.ac.jp

【序】　弾性基板の金属細線を破断させナノギャップを形成させ、架橋した分子の電気伝導度を計測する Mechanically controllable break junction (MCBJ)法は単一の分子を単分子伝導度から判別することができる。近年では、MCBJ 法による新原理の DNA シーケンサーの実現が期待されている。さらに、MCBJ 法は DNA だけでなくペプチドの識別検出が報告され、幅広い生体分子の識別法として期待されている。識別が難しく、新たな検出手法が期待される生体分子に神経伝達物質であるセロトニンとドーパミン(Fig.1)がある。

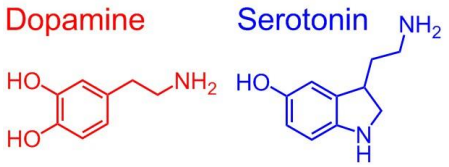

Fig.1 Molecular Formula of dopamine and serotonin.

従来の単分子解析手法では、平均的な単分子伝導度しか求めないため、伝導度の近い分子の識別ができない。単分子計測の測定対象を幅広くするためには、判別に伝導度以外の情報を用いることが望まれる。そこで、本研究では、統計平均を用いない手法として機械学習に着目し、MCBJ 法によるセロトニンとドーパミンの識別手法を構築することを目的とした。

【実験】　MCBJ 基板上にドーパミン、セロトニン 1μM 水溶液を滴下した。その後、ピエゾにより基板を押し曲げ、金接合を破断させ生じたギャップ間隔を一定に保ちながら、電流測定を行った。得られた電流トレースからシグナルを抽出した後、得られた単分子シグナルを、機械学習を用い、識別を行った。

【結果・考察】　MCBJ によりドーパミンとセロトニンの単分子シグナルを得た。2 種の分子の電流ヒストグラムは極めて似通っており、従来手法ではドーパミンとセロトニンの識別ができなかった。

得られたシグナルを、機械学習を用いて分類した。結果を Table 1 に示す。電流ヒストグラムで判別できない 2 種の分子種を精度 0.7 以上で分類することに成功した。

Table 1 Confusion matrix of classifying of Dopamine (D) and Serotonin (S)

		Predicted molecule	
		S	D
True molecule	S	**0.74**	0.25
	D	0.27	**0.72**

機械学習を用いることで、分子構造に起因すると考えられる電流変化の仕方の差を捉えることができ、電流ヒストグラムにより決定される単分子伝導度だけでは区別できない 2 種の分子を識別することに成功した。

© 2018年 応用物理学会