

研究課題(テーマ)	有機化学系機器分析技術習得のための教育プログラムの開発		
研究者	所属学科等	職	氏名
代表者	生物工学科	教授	占部 大介
	生物工学科	教授	五十嵐 康弘
	生物工学科	准教授	奥 直也
	生物工学科	助教	深谷 圭介
研究結果の概要			
<p>R2,3年度を通して、生物工学科で行う有機化学系の研究活動で必須となり、また研究者として企業に求められる有機化合物の構造決定技術の向上を目的として、微生物工学講座と生物有機化学講座が共同で、核磁気共鳴装置(NMR)と質量分析装置(MS)の解析を中心とした有機化合物構造決定プログラムを開発してきた。今年度は本事業の継続として、分光光学スペクトルの計算シミュレーションを簡便に実行する python ライブラリ(ACCeL と命名)を開発した。</p> <p>分光光学スペクトルの計算シミュレーションは、構造不明分子の構造決定に極めて有用であるが、通常、分子の安定配座群のシミュレーションや、それら個々のスペクトル計算、Boltzmann 平均化など、煩雑な作業と専門的知識を要する。今回、学生が日常的に利用している構造描写ソフト ChemDraw より容易に作成できるファイルをインプットとし、自動で分光光学スペクトルの計算シミュレーションを実行する python ライブラリ ACCeL とその派生プログラムを開発した。</p> <p>実際に学生に ACCeL を使用してもらった結果、分光光学スペクトルだけでは解析しきれない構造、例えば複雑な構造のため、一義的にはスペクトル解析から決定できない異性体などについても、実験スペクトルと計算スペクトルとの比較により簡便に区別し、決定することができた。</p> <p>申請時には、学生自身の手による計算シミュレーションの実行と構造決定を目標としていた。生物工学科では有機化学を主体とした教育を実施している一方で、本学科学生はこれまで計算化学にほとんど触れてこなかったこともあり、要所要所で人の介入を必要とする計算シミュレーションの実行は長大な時間と労力を要し、一部の学生のみが実行可能であったが、ACCeL を利用した自動化計算シミュレーションは容易で、多くの学生が実行できていた。</p> <p>生物工学科にはコンピューターやデータサイエンスを苦手とする学生が多いが、研究室内で自由に計算シミュレーションを利用できる環境を整えた結果、自身の研究にも自主的に応用する学生が現れた。これは、本プログラムが上手く機能し、研究のDX化を促進したことを示している。本プログラムを利用した研究成果は、本学科微生物工学講座との共同研究として国際学術論文を6報発表した。</p>			
今後の展開			
<p>現在、開発したプログラムは生物工学科生物有機化学講座内に設置しており、主に当該講座に所属する学生が使用している。一方で、研究を遂行する上で、有機化合物の構造決定を必須とする研究室は他学科にもある。DXセンターに設置された高性能計算サーバーの利用を視野に入れて、大学内で共用できる環境作りに務め、迅速な有機化合物の構造決定を基点とした有機化学研究の促進を目指したい。</p>			