

令和 2 年 6 月 16 日現在

機関番号：12608

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K20095

研究課題名（和文）データ駆動的バイオマテリアル設計ストラテジーの開発

研究課題名（英文）Design of biomaterials using informatics

研究代表者

林 智広（Hayashi, Tomohiro）

東京工業大学・物質理工学院・准教授

研究者番号：30401574

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では情報科学の手法を用いて、過去の実験データを基にして作成したデータベース中のデータを用いた機械学習によって、求める生体分子・細胞の応答を誘起するバイオマテリアルの設計を可能とするアルゴリズムの開発に成功した。とくに単分子膜を構成する分子の高精度設計を目指し、学習後のニューラルネットワークを用いた材料スクリーニングの方法論に関する報告も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の挑戦的研究の意義は以下に集約される。経験に基づく試行錯誤的なアプローチではなく、統計解析に基づいて定量的にバイオマテリアルをデザインするという、全く新しいアプローチを提案した点である。ここでは、材料設計に経験的なフィードバックと試験を繰り返す方法から完全に脱却し、統計解析から得られた化学特性と細胞応答の定量的な相関を逆に辿ることで、要求する細胞応答を誘起するために必要な材料の化学特性を明確に提示することが可能となった。

研究成果の概要（英文）：In this research, we succeeded in designing biomaterials that induce the desired biomolecule / cell response by machine learning using data in a database created based on past experimental data using information science techniques. In particular, aiming at high-precision design of molecules that compose monolayers, we also reported the methodology of material screening using neural networks after the machine learning.

研究分野：表面・界面科学、バイオ界面

キーワード：バイオマテリアル ナノバイオテクノロジー

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

バイオマテリアルの開発は目的の機能を発現する材料の発見に至るまで、元素組成、化学結合の分布などの多次元の材料のパラメータの系統的な改変と材料の評価(物性解析、生物学的評価、動物実験など)の繰り返しによる、試行錯誤的な材料探索のアプローチを行わざるを得ない状況にある。また、本材料分野は材料評価に生体分子、細胞などを扱う必要があるために、計算科学との親和性が低い研究分野であった。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、要求する細胞挙動を確実に誘起するバイオマテリアルの化学特性を明確に提示する新しい材料設計戦略の確立である。本研究では過去の数万におよぶ様々な材料の化学特性と細胞挙動のデータの相関の網羅的統計解析に基づいて、目的材料に求められる化学特性を直接的に提示する手法を開発する。さらに、相関解析では明らかに出来ない重要因子である、細胞応答における足場タンパク質の役割を我々独自の界面解析技術(吸着タンパク質解析、細胞接着サイトのナノスケールマッピング)によって定量的に解明する。統計解析と実験の相補的かつ高レベルでの融合により、材料に接した細胞応答決定のメカニズムの包括的な学術的理解に基づく、全く新しいバイオマテリアル設計戦略を確立する。

本研究ではバイオマテリアル分野でも、特にメカニズムの理解と材料設計の双方において未解決の問題が多い血液適合性に焦点を当て、人工血管、ステントなどの体液が循環する箇所で行われる体内埋設材料に求められる高抗血栓性の実現をそのメカニズムの理解と共に達成することを目標とした。

### 3. 研究の方法

材料の化学的パラメータ(元素組成、化学構造など)と細胞接着結果の相関解析を行う。我々は、単分子膜の化学特性とフィブリノーゲンの吸着量の相関解析、各々の化学特性の重要性の定量化には人工ニューラルネットワークモデル(ANN)による機械学習が有効である事を示した。本研究ではこれを拡張し、細胞接着応答(接着密度、接着面積、接着形状)を出力情報として、過去の全約 200 報の論文データを基に機械学習を行い、相関解析・重要性解析を行う。

材料設計のためには、要求する細胞応答を誘起する単分子膜設計のために、同じデータベースを用い、求める化学特性を出力情報とする ANN を構築し機械学習を行い、その相関関係を基に化学特性を算出する。この作業をそれぞれの化学特性について行うことで、未知の材料の設計(化学パラメータ)を決定した。

### 4. 研究成果

当該年度においては以下の 3 点を行った。

1. 材料表面へのタンパク質吸着、細胞接着のデータを系統的に取得するための化学傾斜基板(図 1)の作製技術の確立および改良

2. 1 で作製した基板を用いたタンパク質吸着・細胞接着データの取得

機械学習を用いて単分子膜を構成する分子構造からタンパク質吸着、細胞接着密度を予測するための手法の確立

これらによって、データ科学を用いた材料に対するタンパク質吸着・細胞接着を予測するための基盤技術を確立した。

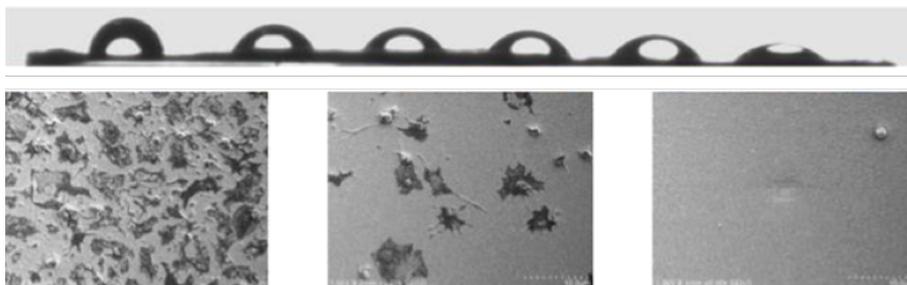
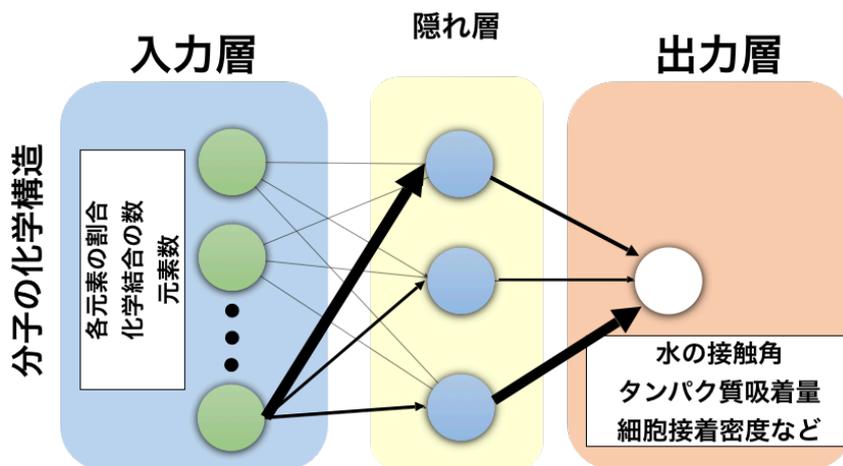


図 1 (上図)傾斜基板に対する水の接触角試験 (下図) 傾斜基板への細胞接着実験の結果

3 では人工ニューラルネットワークモデル(図 2)を用いた機械学習により、実験データを学習することで、分子構造(総原子数、化学結合の種類・数)とタンパク質(フィブリノーゲン)吸着量の相関を機械学習によって予測した結果を示す(図 3)。ここでは、2 種類のデータベースを用いて学習し、その予測結果を比較した。1 つ目のデータベースは約 200 報の過去の学術論文からデータを抽出し構築したものである。もう一方のデータベースは筆者らの開発した組成傾斜基板を

用いて、データを取得したものである。図3から明らかなように、筆者らが構築したデータベースを用いた予測よりも、文献データを用いた機械学習による予測はエラーが大きいことが分か



る。

図2 人工ニューラルネットワークモデル: それぞれのパラメータはニューロンと呼ばれる要素(数値)で表現され、ニューロン間は”重み”により接続される。学習プロセスによって、それぞれの重みが最適化され、入力データから出力データを予測することが可能となる。

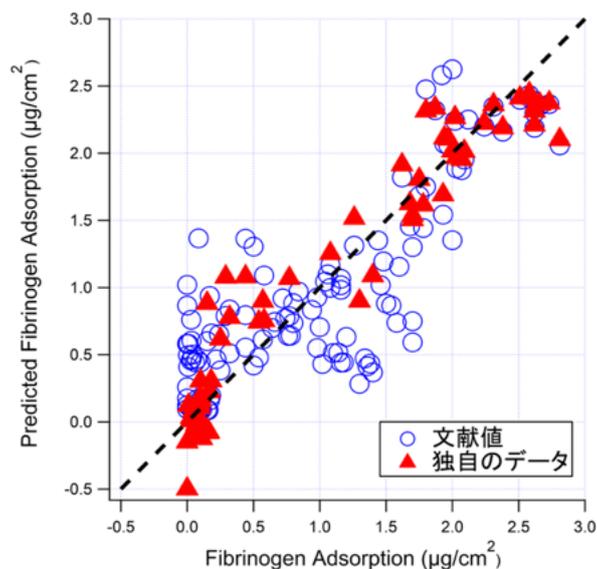


図3 単分子膜を構成する分子の化学構造からのタンパク質吸着の予測: ここでは筆者らが独自に構築したデータベースによる学習による予測、文献データを基にした予測の比較を示す。

文献値データを用いた機械学習による予測の精度の低さは、研究グループごとの実験条件の違い(測定手法、タンパク質溶液条件、タンパク質溶液の輸送速度)によるエラーが学習されてしまい、予測精度が低くなったと考えられる。細胞実験の場合は、細胞のロット、培養条件などの違いによって、さらにエラーは顕著となる事が明らかになっており、これらの結果はデータベースを作成する際には、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肝要であるということが明らかとなった。このため、材料に対する生体分子、細胞の応答の情報を得るためには、紹介した組成傾斜表面などのコンビナトリアルな手法が適していると考えられる。また、学習後の人工ニューラルネットワークを利用して、架空の分子で構築した SAMs へのタンパク質吸着も予測することができる。これにより、はずれの少ない材料設計なども可能になると考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計19件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Araki Yuki, Sekine Taito, Chang Ryongsok, Hayashi Tomohiro, Onishi Hiroshi	4. 巻 8
2. 論文標題 Molecular-scale structures of the surface and hydration shell of bioinert mixed-charged self-assembled monolayers investigated by frequency modulation atomic force microscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 24660 ~ 24664
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ra03569e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Chang Ryongsok, Asatyas Syifa, Lkhamsuren Ganchimeg, Hirohara Makoto, Mondarte Evan Angelo Quimada, Suthiwanich Kasinan, Sekine Taito, Hayashi Tomohiro	4. 巻 50
2. 論文標題 Water near bioinert self-assembled monolayers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Polymer Journal	6. 最初と最後の頁 563 ~ 571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41428-018-0075-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hamamoto Ryo, Ito Hidemi, Hirohara Makoto, Chang Ryongsok, Hongo-Hirasaki Tomoko, Hayashi Tomohiro	4. 巻 34
2. 論文標題 Interactions between protein molecules and the virus removal membrane surface: Effects of immunoglobulin G adsorption and conformational changes on filter performance	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biotechnology Progress	6. 最初と最後の頁 379 ~ 386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/btpr.2586	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sekine Taito, Kanayama Naoki, Ozasa Kazunari, Nyu Takashi, Hayashi Tomohiro, Maeda Mizuo	4. 巻 34
2. 論文標題 Stochastic Binding Process of Blunt-End Stacking of DNA Molecules Observed by Atomic Force Microscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 15078 ~ 15083
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.8b02224	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sung Taehyun, Seong Sicheon, Han Seulki, Son Young Ji, Ishida Tomoya, Hayashi Tomohiro, Hara Masahiko, Noh Jaegeun	4. 巻 18
2. 論文標題 Well-Ordered Domains of 4-Fluorobenzenethiol Self-Assembled Monolayers on Au(111) Guided by a Displacement Reaction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Nanoscience and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 7053 ~ 7057
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1166/jnn.2018.15501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tahara Hiroyuki, Nyu Takashi, Mondarte Evan Angelo Quimada, Maekawa Tatsuhiro, Hayashi Tomohiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Application of Fuzzy Logic Algorithm to Single-Molecule Force Spectroscopy of the Streptavidin-Biotin System	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advances in Materials Physics and Chemistry	6. 最初と最後の頁 217 ~ 226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4236/amc.2018.85014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 林智広	4. 巻 162
2. 論文標題 [談話室] 林研究室の紹介: 研究内容・研究室内コミュニケーションについて	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 News Letter	6. 最初と最後の頁 40-44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 田原寛之 林智広	4. 巻 18
2. 論文標題 データ駆動的手法を用いたバイオマテリアルの設計-現状と今後の展望	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 PHARM STAGE	6. 最初と最後の頁 43-46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 張嶺碩, 関根泰斗, Syifa Asatyas, Ganchimeg Lkhamsuren, 大橋智幸, 林智広	4. 巻 68
2. 論文標題 生体適合性をもつ単分子膜-表面・界面科学の手法を利用したメカニズムの解明~	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 化学工業	6. 最初と最後の頁 886-890
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ryo Hamamoto, Hidemi Ito, Makoto Hirohara, Ryongsok Chang, Tomoko Hongo-Hirasaki, Tomohiro Hayashi	4. 巻 34
2. 論文標題 Interactions between protein molecules and the virus removal membrane surface: effects of immunoglobulin G adsorption and conformational changes on filter performance	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Biotechnology Progress	6. 最初と最後の頁 379-386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/btpr.2586	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Myoung-Soo Han, Kyungbin Ku, Hungu Kang, Rina Ohashi, Tomohiro Hayashi, Masahiko Hara, Jaegeun Noh	4. 巻 17
2. 論文標題 Formation and Structural Changes of 4-Fluorobenzenethiol Self-Assembled Monolayers on Au(111)	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Nanoscience and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 5597-5600
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1166/jnn.2017.14162	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mochizuki M, Lkhamsuren G, Suthiwanich K, Mondarte E. A, Yano T. A, Hara M, Hayashi T.	4. 巻 9
2. 論文標題 Damage-free tip-enhanced Raman spectroscopy for heat-sensitive materials	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 10715-10720
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7nr02398g	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Myoung-Soo Han, Kyungbin Ku, Hungu Kang, Rina Ohashi, Tomohiro Hayashi, Masahiko Hara, Jaegeun Noh	4. 巻 17
2. 論文標題 Standing-Up Phase of Hexanedithiol Self-Assembled Monolayers on Au(111) Induced by Displacement Reaction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Nanoscience and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 5780-5783
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1166/jnn.2017.14163	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taito Sekine, Syifa Asatyas, Chikako Sato, Shigeaki Morita, Masaru Tanaka, Tomohiro Hayashi	4. 巻 28
2. 論文標題 Surface force and vibrational spectroscopic analyses of interfacial water molecules in the vicinity of methoxy-tri(ethylene glycol)-terminated monolayers: mechanisms underlying the effect of lateral packing density on bioinertness	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Biomaterials Science: Polymer Edition	6. 最初と最後の頁 1231-1243
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/09205063.2017.1303120	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kosuke Hara, Takaaki Yano, Kouta Suzuki, Masaaki Hirayama, Tomohiro HAYASHI, Ryoji KANNO, Masahiko Hara	4. 巻 33
2. 論文標題 Raman imaging analysis of local crystal structures in LiCoO <sub>2</sub> thin films calcined at different temperature	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Anal. Sci.	6. 最初と最後の頁 853-858
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/analsci.33.853	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Lkhamsuren, G. Mochizuki, M. Suthiwanich, K. Hayashi, T.	4. 巻 636
2. 論文標題 Fabrication of mechanically stable Au-coatings on probes of atomic force microscopes for nano-mechanical and -optical measurements	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Thin Solid Films	6. 最初と最後の頁 478-484
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tsf.2017.06.046	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ryongsok Chang Syifa Asatyas Ganchimeg Lkhamsuren Makoto Hirohara Evan Angelo Quimada Mondarte Kasinan Suthiwanich Taito Sekine Tomohiro Hayashi	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Water near bioinert self-assembled monolayers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Polymer Journal	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taehyun Sung Sicheon Seong Seulki Han Young Ji Son Tomoya Ishida Tomohiro Hayashi Masahiko Hara Jaegeun Noh	4. 巻 18
2. 論文標題 Well-Ordered Domains of 4-Fluorobenzenethiol Self-Assembled Monolayers on Au(111) Guided by a Displacement Reaction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Nanoscience and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 林智広	4. 巻 162
2. 論文標題 [談話室] 林研究室の紹介: 研究内容・研究室内コミュニケーションについて	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 News Letter	6. 最初と最後の頁 40-44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計40件 (うち招待講演 18件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Syifa ASATYAS Taito SEKINE Ryonsok CHANG Tomohiro HAYASHI
2. 発表標題 The Role of Interfacial Water in Bioinertness of Methoxy-Tri(Ethylene Glycol)-Terminated Monolayers Studied by Surface Force and Vibrational Spectroscopy
3. 学会等名 ChemCYS 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Mondarte, E.A. Maekawa, T. Nyu, T. Tahara, H Hayashi, T.
2. 発表標題 Ultrafast monitoring of the streptavidin-biotin bond dynamics
3. 学会等名 19th International Microscopy Congress (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Evan Angelo Quimada Mondarte Tatsuhiro Maekawa Takashi Nyu Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 A Closer Look to Streptavidin-biotin Intermolecular Dynamics Directly Probed via Atomic Force Microscopy
3. 学会等名 CEMSupra 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Evan Angelo Q. Mondarte Hiroyuki Tahara Takashi Nyu Tatsuhiro Maekawa Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Detection of intermediate transient states of the streptavidin-biotin bond by atomic force microscopy
3. 学会等名 第79回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroyuki Tahara Evan Angelo Quimada Mondarte Takashi Nyu Tatsuhiro Maekawa Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Single-molecule and real-time measurements of Streptavidin-biotin bond by atomic force microscopy
3. 学会等名 10th International Symposium on Organic Molecular Electronics (ISOME) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 張嶺碩 林智広
2. 発表標題 双性イオン型ヘプチド単分子膜の抗付着性メカニズムに関する研究
3. 学会等名 ナノバイオ界面制御技術による機能性材料創成研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 張嶺碩 関根泰斗 柏崎亜樹 Syifa Asatyas Ganchimeg Lkhamsuren 村上大樹 田中賢 林智広
2. 発表標題 生体分子で作る生体分子を吸着させない表面
3. 学会等名 日本表面真空学会 関東支部講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Toward a Data-Driven Strategy for Designs of Biomaterials
3. 学会等名 31st International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Interfacial water endowing materials with bioinertness
3. 学会等名 The 3rd Aquaphotomics International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 表面科学的手法を用いた階層的バイオ界面の解析
3. 学会等名 日本学術振興会 ナノプロブテクノロジー第167委員会第88回研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 生体適合性材料の界面プロセスのイメージ化とデータ科学を用いた材料設計
3. 学会等名 日本顕微鏡学会74回学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 中間水によって引き起こされる界面相互作用
3. 学会等名 鶴田・赤池フォーラム「バイオ界面における水分子の役割の理解と制御」（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 バイオ界面における分子プロセス：抗付着性のメカニズムの解明からデータ科学を利用した材料設計へ
3. 学会等名 神奈川 R & D 推進協議会 研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 実験と情報科学を融合させた生体材料設計
3. 学会等名 帝人分析フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 生体分子が引き起こす特異的相互作用と抗付着性
3. 学会等名 日本学術振興会第174委員会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 抗生体分子吸着・抗細胞接着性を発現する界面分子プロセスの解析
3. 学会等名 第65回繊維応用技術研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 バイオデバイス・バイオ材料の表面設計~プローブ顕微鏡を用いた解析からデータ科学を利用した材料設計へ
3. 学会等名 日本顕微鏡学会走査型プローブ顕微鏡分科会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 バイオマテリアル(生体材料)表面の評価・解析と材料設計～生体適合性評価・マテリアルズインフォマティクス活用等～
3. 学会等名 情報機構セミナー(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 生体親和性材料表面のプローブ顕微鏡による局所水和構造観察
3. 学会等名 ナノバイオ界面制御技術による機能性材料創成研究会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Lkhamsuren Ganchimeg Hayashi Tomohiro
2. 発表標題 Interactions of amino acids with gold surfaces analyzed by surface-enhanced infrared absorption spectroscopy
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Design of biomaterials using material informatics
3. 学会等名 第27回日本MRS-J年次大会(招待講演)
4. 発表年 2017年

1 . 発表者名 S. Han, T. Hayashi, M. Hara, J. Noh
2 . 発表標題 Formation and Structure of Self-Assembled Monolayers of Alkaneselenocyanates on Au(111)
3 . 学会等名 ISSS-8
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 T. Hayashi, T. Sekine, S. Asatyas, R. Chang
2 . 発表標題 Physicochemical origin of bioinertness expressed by organic and biological molecule-based self-assembled monolayers
3 . 学会等名 ISSS-8
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Y.J. Son, T. Hayashi, M. Hara, J. Noh
2 . 発表標題 STM Observation on the Formation and Structure of Self-Assembled Monolayers by Adsorption of Unsymmetric Adamantyl Alkyl Disulfides on Au(111)
3 . 学会等名 ISSS-8
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Tomohiro HAYASHI, Syifa ASATYAS, Taito SEKINE, Ryongsok CHANG
2 . 発表標題 Mechanism underlying bioinertness of nonfouling self-assembled monolayers: surface forces and vibrational analyses
3 . 学会等名 IUMRS- ICAM2017 (招待講演)
4 . 発表年 2017年

1. 発表者名 Takashi NYU, Tatsuhiro MAEKAWA, Kasinan SUTHIWANICH, Tomohiro HAYASHI
2. 発表標題 Nanoscale Imaging of Molecular Recognition Sites by Atomic Force Microscopy
3. 学会等名 IUMRS-ICAM2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 張嶺碩, 関根泰斗, LkhamsurenGanchimeg, 林智広, AsatyasSyifa
2. 発表標題 双性イオン型ペプチド単分子膜の抗付着性のメカニズム
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kasinan Suthiwanich, Yukari Hiraguchi, Takashi Nyu, Madoka Takai, Tomohiro HAYASHI
2. 発表標題 Nanoscale Characterization of Phase-Separated Polymer Thin Film with Static and Dynamic Atomic Force Microscopies
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 丹生隆, SUTHIWANICHKasinan, 林智広
2. 発表標題 ナノメートルスケール空間に挟まれた水の動力学的応答
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 前川達洋, 丹生隆, SUTHIWANICHKasinan, 林智広
2. 発表標題 振幅変調型原子間力顕微鏡法による分子認識部位のナノスケール分解能イメージング
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tomohiro Hayashi, Lkhamsuren Ganchimeg
2. 発表標題 Interactions of amino acids with gold surfaces analyzed by surface-enhanced infrared absorption spectroscopy
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Jason Kwaria, Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Analysis of Correlation between Physicochemical Properties of Self-Assembled Monolayers (SAMs) and Molecular Structures of SAMs Using Artificial Neural Network
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Asatyas Syifa 関根泰斗 佐藤千香子 森田成昭 田中賢 林智広
2. 発表標題 Molecular-level understanding of the mechanisms underlying bioinertness of oligo(ethylene glycol)-terminated alkanethiolate monolayers: Surface force and vibrational spectroscopic analyses
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 関根泰斗, 金山直樹, 尾笹一成, 丹生隆, 林智広, 前田瑞夫
2. 発表標題 コロイドプローブ原子間力顕微鏡法による DNA 平滑末端間での特異的な疎水性引力の直接測定
3. 学会等名 第37回表面科学学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Taito Sekine, Naoki Kanayama, Kazunari Ozasa, Takashi Nyu, Tomohiro Hayashi, Mizuo Maeda
2. 発表標題 Direct measurement of blunt end stacking between DNA layers by atomic force microscopy: For understanding mechanisms underlying self-assembly process of DNA molecules
3. 学会等名 IUMRS-ICAM2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 分子レベルで議論する生体不活性特性: メカニズムの解明からデータ科学を利用した材料設計へ
3. 学会等名 日本分析化学会 第 33 回分析化学緑陰セミナー (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tomohiro Hayashi
2. 発表標題 Understanding of bioinertness at molecular levels: physical origin of protein and cell resistance
3. 学会等名 INST symposium (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 中間水によって引き起こされる界面相互作用
3. 学会等名 鶴田・赤池フォーラム「バイオ界面における水分子の役割の理解と制御」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林智広
2. 発表標題 バイオ界面における分子プロセス: 抗付着性のメカニズムの解明からデータ科学を利用した材料設計へ
3. 学会等名 神奈川 R & D 推進協議会 研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Syifa ASATYAS Taito SEKINE Ryonsok CHANG Tomohiro HAYASHI
2. 発表標題 The Role of Interfacial Water in Bioinertness of Methoxy-Tri(Ethylene Glycol)-Terminated Monolayers Studied by Surface Force and Vibrational Spectroscopy
3. 学会等名 ChemCYS 2018
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計4件

1. 著者名 田原寛之 Rudolf Jason Kwaria 林智広	4. 発行年 2018年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 237
3. 書名 「マテリアルズ・インフォマティクス」の1節 「マテリアルズインフォマティクスによる生体材料表面設計」	

1. 著者名 田原寛之 Rudolf Jason Kwaria 林智広	4. 発行年 2018年
2. 出版社 情報機構	5. 総ページ数 237
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクス～データ科学と計算・実験の融合による材料開発～ 第8節 「マテリアルズ・インフォマティクスを用いたバイオマテリアルの設計の現状と今後の展開」	

1. 著者名 田原寛之 Rudolf Jason Kwaria 林智広	4. 発行年 2018年
2. 出版社 情報機構	5. 総ページ数 7
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクス～データ科学と計算・実験の融合による材料開発～ 第8節 「マテリアルズ・インフォマティクスを用いたバイオマテリアルの設計の現状と今後の展開」	

1. 著者名 田原寛之 Rudolf Jason Kwaria 林智広	4. 発行年 2018年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 印刷中
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクス	

〔産業財産権〕

〔その他〕

林研究室WEB/ページ  
<http://lab.spm.jp/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----