

令和 6 年 6 月 7 日現在

機関番号：13301  
研究種目：奨励研究  
研究期間：2023～2023  
課題番号：23H05388  
研究課題名 「やってみよう」これなら使えるAFMー機械学習プログラムの開発

## 研究代表者

魏 威凜 (WEI, WEILIN)

金沢大学・ナノ生命科学研究所・技術職員

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 480,000円

研究成果の概要：本研究は、対象試料の性質からAFM測定を決定できるソフトウェアを開発する、という目標とし、プログラムを組むのに必要なデータを取得するため、鉱物、化合物の結晶、ポリマー、タンパク質、細胞（eg. がん細胞）、ペプチドなど、多様な分野の代表とする試料の物性とAFM画像を取得してきた。採択期間中は主に、異なる金属とリガンドを含むポリマー、鉱物（金属とリガンド錯体の配合体）、生体分子のDNAオリガミ、タンパク質、タンパク質と膜質の結合などの代表対象物を測定した。

## 研究成果の学術的意義や社会的意義

従来、各種AFMの特徴と適用する多様な試料との間に相関するデータベースは存在しなかったため、本研究課題では対象試料の特徴や物性などの情報から、試料に最適なAFM測定を推測できるAI技術開発を進めており、「初心者に対するAFM測定の啓蒙」を目指す。本研究が達成できれば、異分野におけるAFMの応用範囲もさらに広がる。

研究分野：原子間力顕微鏡・化学

キーワード：原子間力顕微鏡（AFM） AFM測定

## 1. 研究の目的

原子間力顕微鏡 (AFM) は、類い希な特徴があり、試料表面のトポグラフィー (表面構造) をナノスケールで測定する手法として、他の計測装置には追従できない利点がある。特にバイオ系の試料測定にあたっては、生体内に近い環境で生体分子の動態を、三次元で測定することが可能である。しかし、必ずしも研究者が研究している試料が AFM で観察できるか理解しているわけではない。あるいは興味があるものの、どのように AFM を利用したらよいか明確ではなく、研究の 'もう一步先' へ進めない。本研究では、より多くの分野の研究者に AFM の利点を啓蒙し、対象試料の特徴や物性などの情報から、性格診断テストのような試料に最適な AFM 測定を推測できる AI 技術開発し、AFM を活用した研究に貢献することを目的とした。

## 2. 研究成果

本研究では、研究手法としては機械学習の一つである「決定木学習」を用いて、試料の性質から AFM 測定を決定できるソフトウェアを開発するとした。プログラムを組むのに必要なデータを取得するため、鉱物、化合物の結晶、ポリマー、タンパク質、細胞 (eg. がん細胞)、ペプチドなど、多様な分野の代表とする試料の物性と AFM 画像を取得してきた。一つの対象試料につき、測定可能ないくつかの AFM の画像を取得し、それぞれの AFM 画像の特徴を分析した。どのような目的で対象試料を観察したいのか、試料の画像からどのような情報を得たいのかは研究分野により異なる。そのため上記の分析により、同じ試料でも違う AFM 観察でその試料表面構造から様々な情報を得ることが可能となる。このようなデータを収集することで、研究で用いた試料と AFM 測定条件のデータを数多く蓄積し、プログラム組むための膨大なデータベースを準備している。

採択期間中は主に、異なる金属トリガンドを含むポリマー、鉱物 (金属トリガンド錯体の配合体)、生体分子の DNA オリガミ、タンパク質、タンパク質と膜質の結合などの代表対象物を測定した。それぞれのサンプルの測定に対応する AFM を用いて測定し、画像の違いを比較した。例えば、鉱物の表面構造は高分解能の装置を観察することで、表面の構造が原子レベルで観察できる。また、測定するカンチレバーの種類により、取得できる画像の質も変化する。このような情報を得たことで、プログラムにインプットできるデータが増え、機械学習の正確性が向上すると期待できる。

今後も多様なサンプル、代表的な試料のデータ取得も継続して行う予定である。

主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1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 Soeta, T.; Kurobe, S.; Nirei, Y.; Kurokawa, N.; Wei, W.L Yurtsever, A.; Fukuma, T.; Ukaji, Y	4. 巻 29
2. 論文標題 Molecular Assembly and Gelating Behavior of (L)-Alanine Derivatives	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 なし
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/chem.202300455	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 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 黒部 翔太, 楡井 悠太郎, 魏 威凜, Yurtsever Ayhan, 福間 剛士, 添田 貴宏, 宇梶 裕
2. 発表標題 (L)-アミノ酸から誘導した機能性低分子ゲル化剤の開発とその物性評価
3. 学会等名 2023年、第20回ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zoya Leonenko ; Carina T Filice ; Nanqin Mei ; Yue Xu ; Danielle McRae ; Weilin Wei ; Ayumi Sumino ; Takeshi Fukuma
2. 発表標題 THE ROLE OF MEMBRANE STRUCTURE AND PROTECTIVE EFFECT OF MELATONIN AND TREHALOSE AGAINST AMYLOID-BETA- INDUCED DAMAGE IN MODEL LIPID MEMBRANES
3. 学会等名 2024 Tahoe BPS Conference (biophysics.org) (国際学会)
4. 発表年 2023年～2024年

1. 発表者名 Nanqin Mei, Carina T. Filice, Julia I. Lumini, Jingwen Liang, Danielle M. McRae, Weilin Wei, Ayumi Sumino, Takeshi Fukuma and Zoya Leonenko
2. 発表標題 Protective Effect of Melatonin against Amyloid- $\beta$ -induced Damage in Model Lipid Membranes.
3. 学会等名 BPS 2024 Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年～2024年

1. 発表者名 松本陽斗、荒磯裕平、長屋聡美、桑島大和、喜多慎太郎、今井湧太、安田 芽生、魏威凜、太村理沙、古寺哲幸、森下英理子
2. 発表標題 出血性異常プロトロンビンのリン脂質結合能解析およびリン脂質結合動態の可視化
3. 学会等名 日本血栓止血学会2024
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

研究組織（研究協力者）

氏名	ローマ字氏名
----	--------