

Physical Organic Chemistry Lab



研究方針

横浜国立大学 理工学部 化学生命系学科 化学EP 物理有機化学・分子設計研究室

Gotoh lab Since 2018

Mission

物理有機化学/化学情報学を活用して 分子と反応を設計する

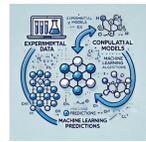
Vision

セントラルサイエンスである化学を基盤に データ駆動型アプローチで持続可能な未来を創る

Value 1

3つを組み合わせ(実験、計算、機械学習)

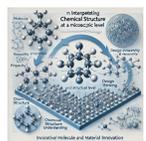
実験データ、計算モデル、そして最先端の機械学習アルゴリズムを統合し、予測と実証を高速に繰り返すことで、効率的かつ効果的な化学研究を推進します。この融合によって、化学の新たな発見を加速させます。



Value 2

ミクロな視点から解釈(分子や電子レベル)

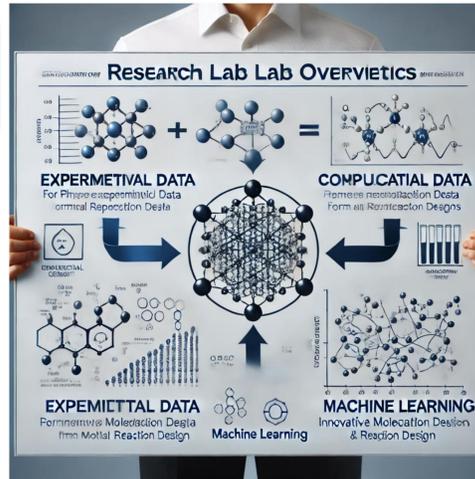
化学構造の理解を基盤に、分子レベルや電子レベルでの特性や反応性を探求し、それをもとに設計思考を展開します。化学構造や電子状態が示す根本的な性質に基づいて、革新的な分子や材料を設計したり、分子同士の反応メカニズムについて考察し、新しい可能性を追求します。



Value 3

概念実証(合成や測定)

新しいアイデアや手法の実用性を迅速に検証し、失敗を恐れずに挑戦を続けることで、革新的な成果を引き出します。実験(合成や測定)を含むPoC (Proof of Concept: 概念実証)を通じて、実用性の確認を迅速に行い、次のステップへ進む判断を下します。



Generated by ChatGPT

Value 4

グローバルで最適化(普遍的、持続可能)

国際的な視点を持ち、研究の成果が世界中で適用できるように、普遍的かつ持続可能なソリューションを追求します。グローバルな課題に対応するための最適なアプローチを考慮し、全体としてのベストプラクティスを実行します。



Value 5

開かれた研究開発(異分野融合、産官学協力)

知識や成果をオープンに共有し、他分野の研究者や産業界とのコラボレーションを積極的に推進します。オープンイノベーションを通じて、全体の科学技術の進展を加速させます。



Value 6

楽観主義(素直さ、明るさ、情熱)

楽観主義は研究のモチベーションを保つ原動力です。失敗を恐れず、積極的に新しいことに挑戦する姿勢を大切に、研究チーム全体で情熱を持って目標達成に向けて取り組みます。



研究内容

Outcome: 構造が関わる事象

構造が関わる分野では、分子の形状や特性から予測される「物性」に焦点を当て開発や探索を行う

材料開発

色素/重合開始剤/重合禁止剤など

- 目に見えない活性酸素の発生を3次元的に可視化する材料を開発
- 活性酸素による色がつく材料や組成を選定
- 発色量を計算やシミュレーションにより計算

Open Access Medical Physics, 2024

生理活性物質探索 医療/農業/食品科学/毒性判定 など

- Word2Vecを用いて抗酸化能に関する論文を1744報を分析
- 化合物名を表す1294個を抽出し、10個の異なるクラスに分類
- カーネル密度推定による視覚化で、特定の化学的な記述子とクラスとの強い関連性が示した

J. Chem. Inf. Model., 2024, 64, 1, 119



Target

物性予測: 化合物の構造から物理化学的性質(融点、沸点、溶解度など)を定量的に予測する。
構造活性相関: 化合物の構造とその生物活性や物性の関係性を定量的に解析する。

分子構造の部分的な重要度解析などにより要因を定量的に解析

構造

機能性分子設計: 定性的な性質の予測に基づいて機能性材料となる新規化合物を設計する。
構造類似性解析: 化合物の類似性を評価し、類似構造を持つ既存化合物の情報に基づいて新たな化合物の特性を推測する。

物性によって適切な分子の表現方法を選定

定量的

反応速度論: 反応の進行を定量的に評価し、速度論的データをもとに最適な反応条件を決定する。
選択性の評価: 反応の選択性を定量的に測定し、特定の生成物を得るための条件を探る。

反応

反応メカニズムの予測: 反応がどのように進行するか、反応機構を定性的に分析し、新しい反応経路を探る。
基質特異性の評価: 反応がどの基質で進行するかを定性的に予測し、基質特異性を確認します。

定性的

データ駆動型アプローチで解析

反応データ予測のためには活性化エネルギー差という質の高い情報を収集する。効率的な収集方法を開拓

反応データ予測のためには活性化エネルギー差という質の高い情報を収集する。効率的な収集方法を開拓

立体因子 静電因子

favor

disfavor

機械学習や計算化学により得られた結果を比較検討して反応経路や要因について分析

Outcome: 反応が関わる事象

反応が関わる分野では、化学変化を経て生成される「生成物」や「反応条件(触媒、反応剤、溶媒、温度など)」に注目し、分子同士の相互作用に解析して反応の理解を深める

選択性予測と原因説明

立体選択性/位置選択性など

- 立体選択性を予測する機械学習モデル開発。
- 本手法で323反応の解析したところ高い精度の定量的予測を達成
- 立体選択性の違いを説明

反応の指標化

立体障害/反応適用範囲など

- 立体障害の動的パラメータ(DPSH)を提案、43種のラジカルについて立体障害を評価
- 反応時のエネルギー障壁を考慮した動的な評価方法を開発
- 平衡構造による指標と遷移状態構造による指標との違いを比較し説明

Open Access Scientific Reports, 2019, 9, 20339

研究室情報

- 研究室のアドレス
 - 研究室の場所: 横浜国立大学化学棟 3階
 - ホームページ: <https://poclab.notion.site/>
 - 主任研究者名: 五東弘昭 (Gotoh Hiroaki)
 - メールアドレス: gotoh-hiroaki-yw@ynu.ac.jp
- 情報公開場所
 - github
 - zenn
 - Streamlit
 - などで情報公開中
- 研究者のデータベース情報公開
 - ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1920-6020>
 - google scholar: <https://scholar.google.com/citations?user=R-J5YzAAAA>
 - 横浜国立大学の研究者総覧: [五東弘昭 基本情報](#)
 - 科研費: <https://nrid.nii.ac.jp/ja/nrid/1000080635235/>
- 関連講義や担当講義
 - データサイエンス実践基礎
 - AI実践基礎
 - 情報化学実験
 - 物理有機化学
- 共同研究や学術指導
 - 共同研究: 化学メーカー、材料メーカー、食品メーカーなどとの共同研究の実績があります。
 - 学術指導: 社内教育などの充実を行うために、機械学習、計算化学、理論的な背景などをお伝え可能です。
- ROUTE学生(横国学生向け)の募集
 - 研究室配属前でも研究に参加できるROUTE学生を募集しています。
 - 研究室見学なども受け付けています。メールなどで事前に連絡をください。
- 大学院からの進学希望学生の募集
 - これまでに東京農工大、北里大学、東京都市大学等から当研究室へ来た学生がいます。
 - 大学院からの学び直しについても応援いたします。初学者向けの資料も充実させています。