

# 大学院教育支援機構 (DoGS) 海外渡航助成金 報告書

## Outcome report

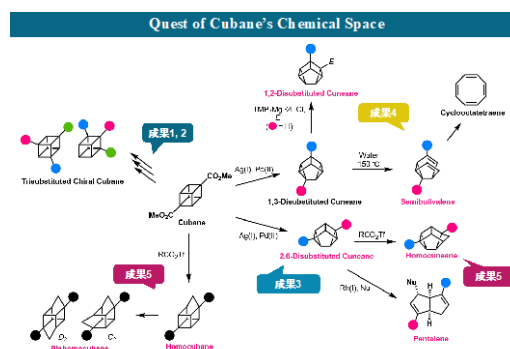
計画名 Plan	物質合成実験データベース設計に関する EU 加盟国における現状調査
氏名 Name	竹邊日和
研究科・専攻・学年 Graduate school/Division/Year level	工学研究科材料化学専攻博士後期課程 2 年
渡航国 Country	ドイツ・ベルギー
渡航日程 Travel schedule	2024 年 8 月 21 日 ~ 2024 年 11 月 16 日

- ページ数に制限はありません。No limits on the number of pages
- 写真や図なども組み込んでいただいて結構です。You can include pictures or illustrations.
- 各項目について具体的に記述してください。Please fill in each item specifically.
- 日本語または英語で記載ください。Please use Japanese or English.

### 渡航計画の概要 Outline of the travel plan

アーヘン工科大学の EGBERT Figgemeier 教授が主宰する研究室に、訪問研究員として滞在する。本渡航の目的は、申請者がこれまでに開発してきたキューバン周りの化合物空間(Chemical Space; 右図上), および、有機材料の開発研究における分子群をデータベース化する(右図下)ことで、ネットワーク型データベースの基本構造を決定する。また、データベース構築における FAIR 原則、特に先進地域である EU 諸国での思想・観点を身につけることを目的とする。

今日、医薬品・有機材料開発において DX 手法を使用することは非常に注目されている。DX 手法をとる際は、対象有機分子に関するデータベースが必要となる。有機化学において様々なデータベースが存在するが、例えば、SciFinder のようなデータベースでは個々の分子の情報が合成手法や反応性などと共に記載されている。既存の DX 手法では、有機分子は「分子記述子」によって分子単独の特徴量を表現する。しかし、有機分子は分子変換により互いにリンクし、化合物空間(Chemical Space)を形成している。この化合物空間 (Chemical Space) における相対的位置を明確に示すデータベースは未発展である。このデータベースのように分子を化合物群として捉えないと実際の分子の情報が得られない。したがって、従来の分子記述子に分子の化合物空間における相対的位置を加えて分子表現することで、より正確な分子表現を行得るようなデータ群の構築が課題である。



The screenshot shows a 'Molecule Reaction Process Graph' interface. It displays chemical structures and reaction details for '4-methylpentylcubane-1-carboxylic acid'. The interface includes fields for Name, Formula, CAS, SMILES, and Wikipedia Link. The structure is shown as a cubane ring with a methyl group and a carboxylic acid group.

### 成果 Outcome

データベース構築やデータマネジメントにおける FAIR 原則、特に先進地域である EU 諸国での思想・観点を身につけることができた。現在の受入研究機関でのデータベース構築において決定的に欠けているのは、FAIR 原則の観点であると感じた。FAIR 原則はデータ共有の原則として世界で広まっており、特に、派遣先のドイツを含む欧州ではプロジェクト申請時にデ

ータをどのように扱うのか表記する必要がある。日本の学術領域ではまだ馴染みのない「データスチュワード」という役職についても知ることができた。

アーヘン工科大学, IAS-9, BASF などの研究者とデータマネジメントに関して意見交換を行ったが, 全体として, FAIR を意識してはいるものの, 実態は発展途中であり現場レベルではまだ浸透していない, あるいは実行がなかなか進んでいないように感じた。興味深かったのは, COVID-19 をきっかけにデータをオンライン共有するようになり, データ保存に関しても FAIR を意識するようになった機関があった点である。IAS-9 ではデータベースについて議論を行い, メタデータの取り扱いは特に重要であることを再認識した。アーヘン工科大ではセミナーで発表を行い, 現在構築中のデータベースの今後の展望などについて議論を深めた。

## **今後の展望** Prospects for the future

今回ドイツにて学んだことをもとに, 現在構築中のデータベースを見直し, 必要に応じてデータ入力形態や保存形式を再検討する。また, 今回さまざまな機関に訪問した際に得た研究者のネットワークは研究者としてのキャリア形成の意味でも貴重な機会となり, 今後の研究に活かしていきたいと考えている。

最後に, このような貴重な機会へのご支援をいただきましたことを心から御礼申し上げます。