

NEDO 海外レポート

2025.1.27.

1142

1	【バイオテクノロジー分野】	2024/6/20公表	
	より優れた酵素を作るアルゴリズム（アイルランド）		1
2	【電子・情報通信分野】	2024/7/1 公表	
	物理学の新境地を開拓する世界一正確な原子時計（米国）		4
3	【環境・省資源分野】	2024/7/18 公表	
	炭素回収の「死の谷」に橋を掛けるプラットフォーム（スイス）		8
4	【環境・省資源分野】	2024/8/22 公表	
	化学の言葉を学習する新しいコンピューティングツール（米国）		13
5	【ナノテクノロジー分野】	2024/9/24 公表	
	抗生物質耐性に対処するグラフェンスパイクマットと冷蔵庫の磁石技術（スウェーデン）		17
6	【バイオテクノロジー・材料分野】	2024/10/18 公表	
	樹木からの安価でよりグリーンな工業用化学物質への転換を促進（米国）		22

※ 各記事への移動は Adobe Acrobat の「しおり」機能をご利用ください

URL : https://www.nedo.go.jp/library/kankobutsu_report_index.html

《本誌の一層の充実のため、ご意見、ご要望など下記宛お寄せください。》

海外レポート問い合わせ E-mail : g-nkr@ml.nedo.go.jp

NEDO は、国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構の略称です。

【バイオテクノロジー分野】

仮訳

より優れた酵素を作るアルゴリズム (アイルランド)

2024 年 6 月 20 日

アイルランド・ダブリン大学トリニティ・カレッジ等の科学者らが、酵素の進化の歴史をベースとしたアルゴリズムを開発し、機能改善をもたらす可能性の高い突然変異の導入場所を突き止めた。

大手学術誌 *Nature Communications* に本日発表されたこの研究成果は、食品生産から人間の健康に至るまで、一連の産業全体に重要かつ広範な影響を与える可能性がある。

酵素は生命に不可欠なものであり、社会の課題に対処するための革新的な医薬品やツールを開発する鍵である。酵素は、その立体構造を支えるアミノ酸配列の変化を通じ、何十億年もかけて進化してきた。糸を通したビーズのように、各酵素はその立体構造をエンコードする数百個のアミノ酸配列で構成されている。

20 個のアミノ酸の「ビーズ」うちの 1 個があらゆる場所へ配置される可能性があり、自然な配列の多様性は膨大である。酵素が立体構造を形成することで、食物中のタンパク質を消化したり、化学エネルギーを筋肉で力に変換したり、細胞に侵入した細菌やウイルスを破壊したりといった特定の機能を果たしている。配列を変更すると立体構造が壊れ、それにより酵素の機能が変化し、時には完全に無効になることもある。

酵素の活性を向上させる方法の発見は、多くの産業アプリケーションにとって非常に有益であり、分子生物学の最新のツールを使用してアミノ酸配列に変更を加えることは簡単で費用対効果が高い。しかし、僅か 3~4 個のランダムな配列変更が加わるだけで、酵素の活性が劇的に失われる可能性がある。

今回、同大学の科学者らは、「 β -ラクタマーゼ」と呼ばれる酵素を合理的に操作する有望な新戦略を報告している。米ブロード研究所とハーバード大学医学部の研究者らは、ランダムな突然変異の無秩序な導入手法に代わる、酵素の進化の歴史を考慮したアルゴリズムを開発した。

「この新しいアルゴリズムの特徴は、多くの様々な生物由来の何千もの β -ラクタマーゼ配列を利用した得点機能です。いくつかのランダムな変化ではなく、280 配列で最大 84 の突然変異が生成され、機能性能を向上させます」と、本研究論文の共著者の 1 人であるトリニティ・カレッジ・ダブリン校生化学・免疫学部の准教授 **Amir Khan** 博士は説明する。

「そして驚くべきことに、このようにして設計された新しい酵素では、より高い温度下での活性と安定性の両方が改善されました」。

トリニティ・カレッジの博士課程 2 年生の **Eve Napier** 氏は、X 線結晶構造解析と呼ばれる手法を用いて、新設計の β -ラクタマーゼの実験的な立体構造を特定した。

同氏の立体構造マップでは、そのアミノ酸の 30%が変化しているにもかかわらず、新酵素の構造が野生型 β -ラクタマーゼと同一あることが明らかにされた。また、通常はアミノ酸の個々の変化が酵素構造を損なうこととは対照的に、同時に導入されたアミノ酸の調整的な変化が、いかにして効率的に立体構造を安定化させることが明らかにされた。

Napier 氏は次のように説明する。「つまり、これらの研究結果は、新しい配列空間への劇的な『跳躍』によって活性を向上させるようにタンパク質を操作できることを明らかにしているのです」。

「この研究成果は、食品生産で酵素を必要とするプロセス、プラスチック分解酵素や人間の健康や病気に関係したプロセス等、産業界での幅広いアプリケーションが考えられるため、将来の可能性を非常に楽しみにしています」。

本研究は、米国立衛生研究所(NIH)の一般医科学研究所(NIGMS)、アイルランド科学財団 (SFI)、米国エネルギー省(DOE) Biological and Environmental Research Program、ハーバード大学医学大学院の SynBio HIVE およびダナ・ファーマー癌研究所の支援を受けた。

本研究論文は [こちらのウェブサイト](#)に掲載されている。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、アイルランド・ダブリン大学トリニティ・カレッジの記事

“Scientists devise algorithm to engineer improved enzymes”

(https://www.tcd.ie/news_events/articles/2024/scientists-devise-algorithm-to-engineer-improved-enzymes/) を翻訳したものである。

(Reprinted with permission of Trinity College Dublin, The University of Dublin)

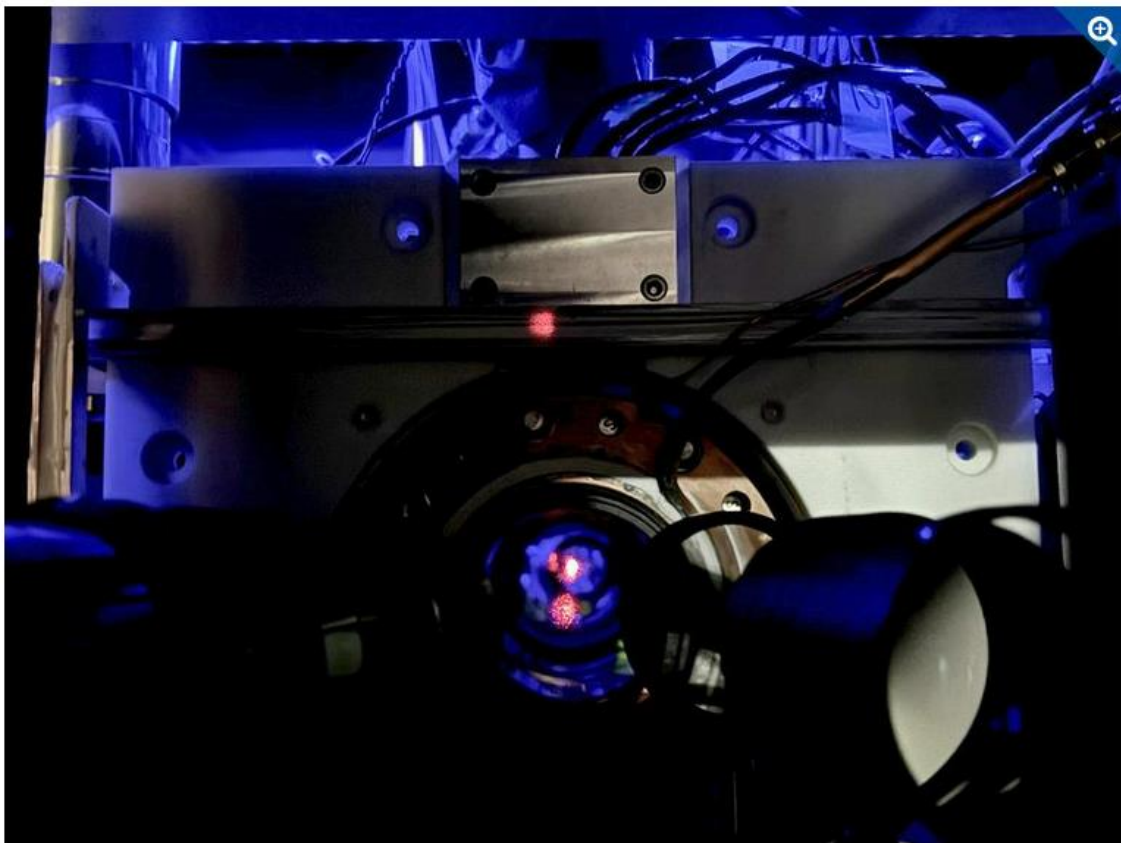
【電子・情報通信分野】

仮訳

物理学の新境地を開拓する世界一精確な原子時計（米国）

2024 年 7 月 1 日

- ・ NIST の研究者らが従来の原子時計に比べてより精密で正確な原子時計を開発。
- ・ 「一般相対性理論」の予測する重力の影響を微視的なスケールで初めて検出した。
- ・ 公式の秒の長さのより正確な定義と新たなアプリケーションの可能性を実証した。



ストロンチウム原子の極低温の気体が光学格子として知られる光の網の中に閉じ込められている。同原子は空気や他のガスのほとんど存在しない超高真空環境に保持され、この真空環境が原子の繊細な量子状態の保持を助けている。この画像中の赤色の点は、原子トラップ創出で使用されたレーザー光の反射。

写真提供: K. Palubicki/NIST

人類が完璧さの探究を刻々と進める中、どの時計よりも精密で正確な原子時計が開発された。この新しい時計を開発したのは、米国立標準技術研究所 (NIST) とコロラド大学ボルダー校の共同機関である JILA の研究者らである。

広大な宇宙空間でのピンポイントのナビゲーションや、新しい粒子の探究を可能にするこの原子時計は、単なる計時の能力を超える最新技術である。精度の向上した次世代原子時計は地下に埋蔵されている鉱物堆積物の存在を明らかにし、前例のない精密さで一般相対性理論等の基礎理論の検証を可能にする。原子時計開発者の目指すところは優れた時計を作ることにとどまらない。宇宙の秘密を解き明かし、今後の世界を形作る技術への道を切り開くことである。

世界の科学コミュニティーは、このような次世代の光原子時計に基づき、国際単位系の定める時間の単位である[秒の再定義](#)を検討している。現行の原子時計では、原子にマイクロ波を照射して 1 秒を測定する。はるかに高い周波数をもつ可視光を原子に照射し、1 秒をより精密に測定している。現行のマイクロ波時計に比べ、次世代の光原子時計では国際的な計時で 300 億年に 1 秒の誤差という精度の実現が期待されている。

しかし、原子時計がこのような高精度で動作するためには、1 秒のうちの極わずかな部分をも測定できる極めて高い精密さが必要となる。高い精度と高い正確さの両方の達成は、非常に大きな影響を及ぼす可能性がある。

時間に捕らわれる

JILA による新しい原子時計は、「光格子」と呼ばれる光の網を使用し、数万個の原子を同時に個別に捕獲して測定する。このような大規模な原子の集合体を持つことは、精度の向上に大きく貢献する。測定される原子が多いほど、原子時計は 1 秒を正確に測定するためのデータをより多く持つことになる。

JILA の研究者らは、以前の光格子時計よりも浅く穏やかなレーザー光の「網」を使用することで新記録を達成した。このような光の網の使用により、原子を捕獲するレーザー光の影響と、原子が過密した場合の原子同士の衝突という、2 つの主要なエラーの原因が大幅に低減した。

本研究の成果は、[Physical Review Letters](#)に掲載されている。

最小スケールでの相対性の測定

「この原子時計は極めて精密なため、一般相対性理論等で予測されている極微小な効果を微視的なレベルでも検出できます」と、NIST と JILA の物理学者である Jun Ye 氏は言う。「この原子時計は、計時による可能性の限界を押し広げているのです」。

一般相対性理論は、空間と時間の歪みによって重力がどのように引き起こされるかを説明するアインシュタインの理論である。同理論の重要な予測の 1 つは時間自体が重力の影響を受けるというもので、重力場が強いほど時間の経過は遅くなる。

新原子時計の設計は、計時における相対論的効果のサブミリメートルスケール(人間の髪の毛 1 本分の太さに相当)での検出を可能にしている。このような極微な距離で原子時計を持ち上げたり下げたりすることで、研究者らは重力の影響で引き起こされる時間の流れの微小な変化を識別することができる。

一般相対性理論の効果を微視的なスケールで観察できるこの能力は、微視的な量子の領域と一般相対性理論で説明される大規模な現象との間のギャップを大きく埋めることができるのだ。

宇宙航行と量子技術の進展

より高精度の原子時計は、宇宙でのより正確な航行や探査も可能にする。太陽系のさらに奥へと進んで行くためには、原子時計は広大な距離をより正確に計時できなくてはならない。計時におけるわずかな誤差は航法誤差につながり、遠くに進むほどその誤差は指数関数的に大きくなる可能性があるのだ。

「宇宙船をピンポイントで火星に着陸させるには、現行の GPS に搭載されているものよりも桁違いに正確な原子時計が必要になります」と Ye 氏は言う。「新しい原子時計は、それを可能にするための大きな一歩となります」。

本研究の原子を捕捉して制御する技術は、量子コンピューティングにも革新をもたらす可能性がある。量子コンピューターで計算を実行するには、個々の原子や分子の内部特性を正確に操作する必要がある。微視的な量子システムの制御・測定の進展は、この試みを大きく前進させている。

量子力学と一般相対性理論が交差する微視的な領域に踏み込むことで、研究者らは現実そのものの基本的な性質に関する新たなレベルの理解への扉を切り開こうとしている。重力によって時間の流れが歪められる極微なスケールから、ダークマターとダークエネルギーが支配する広大な宇宙のフロンティアまで、新しい原子時計の優れた精度は宇宙の最も深遠な謎に光明を投じることだろう。

「私たちは計測科学の最前線を探究しています」と Ye 氏は言う。「このようなレベルの精度で物事を測定できるようになると、これまでは理論化にとどまっていた多くの現象が目に見えてくるのです」。

本研究の論文: Alexander Aepli, Kyungtae Kim, William Warfield, Marianna S. Safronova and Jun Ye.
A clock with 8×10^{19} systematic uncertainty. Physical Review Letters. Published online July 10, 2024. DOI: [10.1103/PhysRevLett.133.023401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.133.023401)

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、米国立標準技術研究所(NIST)の記事“World’s Most Accurate and Precise Atomic Clock Pushes New Frontiers in Physics”
(<https://www.nist.gov/news-events/news/2024/07/worlds-most-accurate-and-precise-atomic-clock-pushes-new-frontiers-physics>) を翻訳したものである。

【環境・省資源分野】

仮訳

炭素回収の「死の谷」に橋を掛けるプラットフォーム（スイス）

2024 年 7 月 18 日

著者： [Nik Papageorgiou](#)

EPFL、スコットランド・ヘリオット・ワット大学、チューリッヒ工科大学(ETH)が開発した PrISMa は、高度なシミュレーションと機械学習を使用し、研究プロセスの初期段階で多様な利害関係者の視点を考慮することにより、炭素回収技術を合理化する新しいプラットフォームである

気候変動の影響の緩和は世界の焦点となっており、各国や国際機関はこの課題に対処するための様々な戦略を展開している。最優先事項である CO2 排出量の削減において、炭素回収技術は有望な方法である。

しかし、炭素回収技術の研究開発とその実用化の間のギャップである、「死の谷」を埋めることは極めて困難である。炭素回収プロセスと共に多様な利害関係者の視点と最優先事項を考慮する必要性が、この課題をさらに複雑化させる。

現行の炭素回収技術の研究開発では、化学者が材料を設計してエンジニアがプロセスを開発することから始まり、その後に経済と環境的な影響が評価されている。その結果は最適ではないことが多く、実際の課題の解決を遅らせている。

このような状況に対応するため、EPFL の Berend Smit 教授とヘリオット・ワット大学の Susana Garcia 教授の率いる科学者らが、PrISMa (Process-Informed design of tailor-made Sorbent Materials) プラットフォームを開発した。これは、最初から複数の利害関係者の視点を考慮に入れることで、材料科学、プロセス設計、テクノ経済学、およびライフサイクル評価をシームレスにつなげる革新的なツールである。

PrISMa では、高度なシミュレーションと機械学習を使用し、最も効果的で持続可能な課題解決方法を特定して新しい材料の性能を予測することができる。これは、気候変動への対処における強力なツールである。

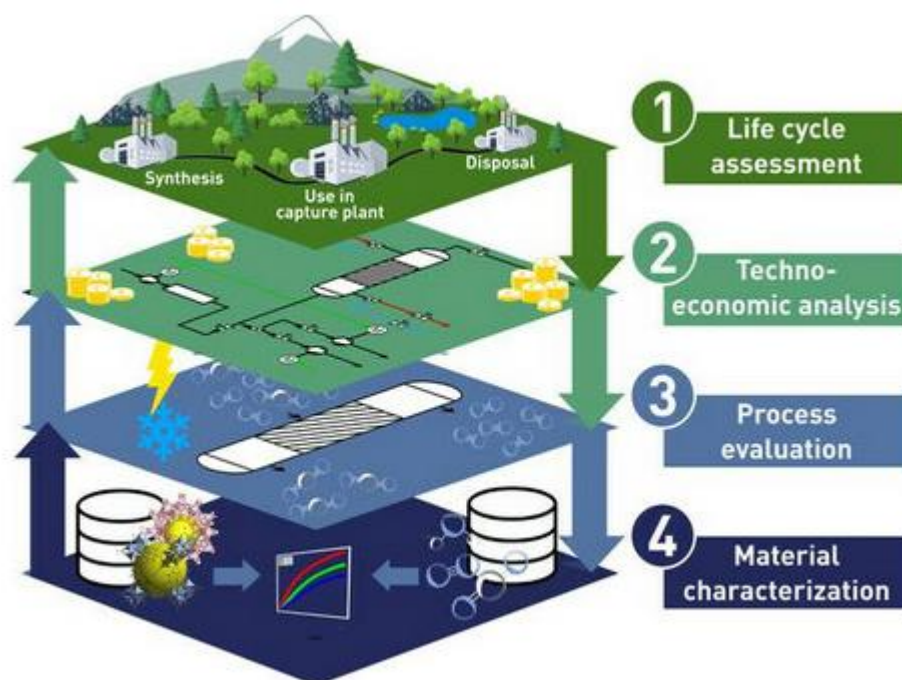
「この革新的なアプローチは、従来の試行錯誤の方法に勝るもので、炭素回収に向けた最高性能の材料の発見を加速させるものです」

— EPFL Berend Smit 教授

主要業績評価指標 (KPI) の評価

PrISMa では、4 つの KPIs の「レイヤー」を評価して、炭素回収材料の初期開発から炭素回収プラントへの完全実装までの実行可能性を査定する。

1. **材料レイヤー**：実験データと分子シミュレーションを通じ、吸着材の吸着特性を予測する。
2. **プロセスレイヤー**：純度、回収率、エネルギー要件などのプロセスパフォーマンスパラメータを計算する。
3. **技術経済分析レイヤー**：炭素回収プラントの経済的および技術的実行可能性を評価する。
4. **ライフサイクル評価レイヤー**：プラントのライフサイクル全体にわたる環境への影響を評価し、包括的な持続可能性を保証する。



PrISMa プラットフォームの 4 つのレイヤー:

イラスト出典 Charalambous et al. 2024. DOI: 10.1038/s41586-024-07683-8

ケーススタディーで PrISMa を試験

科学者らは PrISMa を使用して 60 以上の現実世界のケーススタディーを比較した。これらのケーススタディーでは、世界の 5 地域の異なる発生源から異なる技術を使用して CO₂ を回収する。複数の利害関係者の視点を考慮に入れることで、PrISMa は最も効果的で持続可能な解決方法の特定を支援した。

「PrISMa プラットフォームのユニークな特徴の 1 つは、高度なシミュレーションと機械学習の使用を通じて新しい材料の性能を予測する能力です」と Berend Smit 教授は言う。「この革新的なアプローチは、従来の試行錯誤の方法に勝るもので、炭素回収に向けた最高性能の材料の発見を加速させるものです」。

分子シミュレーション

このプラットフォームには、プロセス設計に必要な材料特性を予測するために密度汎関数理論(DFT) と分子シミュレーションが統合されている。科学者らはこのアプローチを CO₂ 回収プラントで試験し、30 年間のプラントの稼働における間接排出量を調べ、これを技術経済評価と組み合わせてプロセスのコストを評価した。

「DFT レベルで電子の挙動を関連付け、30 年間のプラント寿命で回収される CO₂ の総量とそのコストを計算することができました」と Berend Smit 氏は説明する。

ステークホルダーの視点

PrISMa は、多様なステークホルダーには貴重な知見を、エンジニアには最も効率的で費用対効果の高い炭素回収プロセスを設計するためのツールを、そして化学者には材料の性能を高める分子特性の手がかりをそれぞれ提供する。

環境管理者は環境影響の包括的な評価を容易に入手し、より多くの情報に基づいた意思決定ができるようになり、投資家は詳細な経済分析によって新技術への投資に伴うリスクと不確実性を軽減することができるようになる。

新しい材料の発見

PrISMa は従来の試行錯誤の方法に勝り、炭素回収に向けた最高性能の材料の発見を加速する。ユーザーは PrISMa のインタラクティブなツールを使って 1,200 以上の材

料を探索し、コスト、環境への影響、技術的性能のトレードオフを調べることができるようになる。

この包括的なアプローチは、選択した解決方法が全体的な環境への影響を最小限に抑えながら、CO₂ を効率的に回収できるようにする。

PrISMa の利用方法の 1 つとして、炭素回収を含む幅広い用途を持つ多孔質材料である金属有機構造体 (MOF) の発見を Smit 教授は想定している。「化学者が各々の MOF の結晶構造をアップロードすると、PrISMa があらゆる種類の回収プロセスでこれらの材料をランク付けします」と Smit 教授は言う。「そのため、炭素回収技術の専門的な知識を持たない化学者でも、最も優れた MOF とその根拠に関するフィードバックを得ることができるようになります」。

PrISMa は炭素回収技術の研究開発を加速し、研究プロセスの初期段階ですべての利害関係者を関与させて排出量実質ゼロの達成を支援する。材料とプロセスの包括的な評価を提供することで、PrISMa はより多くの情報に基づいた意思決定を可能にし、より効果的で持続可能な炭素回収プロセスの開発を促進する。

本研究の協力組織：

- ETH Zurich
- Solverlo Ltd.
- Institut des Matériaux Poreux de Paris, ENS-Paris
- Lawrence Berkeley National Laboratory

研究資金提供元：

ACT Programme (Accelerating CCS Technologies, Horizon 2020)

The UK Department for Business, Energy & Industrial Strategy (BEIS)

UK Research Councils (NERC and EPSRC)

The Research Council of Norway (RCN)

Swiss Federal Office of Energy (SFOE)

U.S. Department of Energy

TOTAL

Equinor

The Grantham Foundation for the Protection of the Environment (USorb-DAC Project)

UKRI ISCF Industrial Challenge (UK Industrial Decarbonisation Research and Innovation Centre)

US National Science Foundation

Nature 掲載研究論文

Charithea Charalambous, Elias Moubarak, Johannes Schilling, Eva Sanchez Fernandez, Jin-Yu Wang, Laura Herraiz, Fergus McIlwaine, Shing Bo Peh, Matthew Garvin, Kevin Maik Jablonka, Seyed Mohamad Moosavi, Joren Van Herck, Aysu Yurdusen Ozturk, Alireza Pourghaderi, Ah-Young Song, Georges Mouchaham, Christian Serre, Jeffrey A. Reimer, Andre Bardow, Berend Smit, & Susana Garcia. Shedding Light on Stakeholders' Perspectives for Sorbent-Based Carbon Capture. *Nature* 17 July 2024. DOI: [10.1038/s41586-024-07683-8](https://doi.org/10.1038/s41586-024-07683-8)

著者 : [Nik Papageorgiou](#)

出典 : [EPFL](#)

訳 : NEDO (担当 イノベーション戦略センター)

出典 : 本資料は、スイス連邦工科大学ローザンヌ校(EPFL) (ローザンヌ工科大学)の記事“Bridging the “Valley of Death” in carbon capture”

(<https://actu.epfl.ch/news/bridging-the-valley-of-death-in-carbon-capture/>) を翻訳したものである。

【環境・省資源分野】

仮訳

化学の言葉を学習する新しいコンピューティングツール（米国） ChemReasoner が大規模言語モデルと深遠な構造的知見を組み合わせ 新たな触媒設計を提案

2024 年 8 月 22 日

著者： [Sarah Wong, PNNL](#)



ChemReasoner は、生成 AI の能力とコンピューターケミストリー（計算機化学）を組み合わせることで新しい触媒設計を支援する。
（イラスト：Cortland Johnson | Pacific Northwest National Laboratory）

化学反応を起こすための、より新しくより優れた触媒開発が試行錯誤的なプロセスを通じて実施される中、[パシフィックノースウエスト国立研究所 \(PNNL\)](#)、イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校およびマイクロソフトの科学者らが、このようなプロセスを容易にする [ChemReasoner](#) を開発した。これは、生成人工知能(AI)の力と[計算機化学](#) を組み合わせることで、大規模言語モデル(LLM)に化学の「言葉」を教え、数十年分の化学的知識を迅速に統合し、触媒開発の有望な戦略の特定を支援するものである。筆頭著者で PNNL のデータサイエンティストの Henry Sprueill 氏は、[7 月 25 日にオーストリアのウィーンで開催された国際機械学習会議](#)と、8 月 8 日にカナダのバンクーバーで開催された 2024 Accelerate Conference でこの研究成果を発表している。

[触媒](#)は、[プラスチックのアップサイクル](#)から[持続可能な航空燃料\(SAF\)](#)の生産まで、多くの産業に変革をもたらしてきた。ChemReasoner の最も重要な目標は、新しい触媒材料とエネルギー効率の高い化学反応プロセスの発見を可能にすることである。

「この目標を達成するには、特定の化学反応を選択的に実行できる材料を設計する必要があります」と Sprueill 氏は言う。「つまり、そのような材料の構造に取り込む要素について詳細な判断を下す必要があるということです、これは非常に難しい問題です」。

化学の言葉を学ぶ

1 年半前にこの開発プロジェクトが始まった当時、研究チームは科学者らが日常的に使用している実験プロセスの再現を試みていた。

「実験を設計する際の課題を理解するために、まず触媒研究者らと話しをすることから始めました」と、[ChemReasoner の主任設計者である Sutanay Choudhury 氏](#)は言う。

Choudhury 氏はこうした対話を通じ、PNNL の触媒専門家である Mariefel Olarte 氏と Udishnu Sanyal 氏が科学文献を徹底的に調べて新しい触媒に関する情報を特定し、それらの新しい触媒が目的の化学反応を起こせるかどうかを調査する実験を行っていることを知った。

その後、Choudhury 氏は[コンピューターサイエンティストの Khushbu Agarwal 氏](#)と Sprueill 氏を採用して科学文献検索プロセスを自動化し、それを大規模言語モデル (LLM) の形で実験知識に組み合わせた。ただし、課題は生成 LLM が触媒研究者らと同じ「言葉」を話さないことであった。

「商用 LLM は、新しい触媒構造を提案したり、好ましい経路に反応を誘導したりできるほど化学を理解していません」と Choudhury 氏は言う。「このプロジェクトを開始した当時、ChatGPT 等の LLM のアウトプットは科学百科事典の内容に似ていて、その論理的判断は次世代触媒の発見に必要な深みに欠けているという科学者からの反発が数多くありました」。

触媒、LLM、グラフニューラルネットワーク、計算機化学の専門家を含む ChemReasoner チームは、ここで諦めず、この課題をチャンスと捉えた。

シミュレーションによる出力の強化

LLM は、出版された文献から追加的な補助なく情報を引き出すことができるが、そのアウトプットの精度は大きく変わる可能性があり、完全に創造することさえもある。

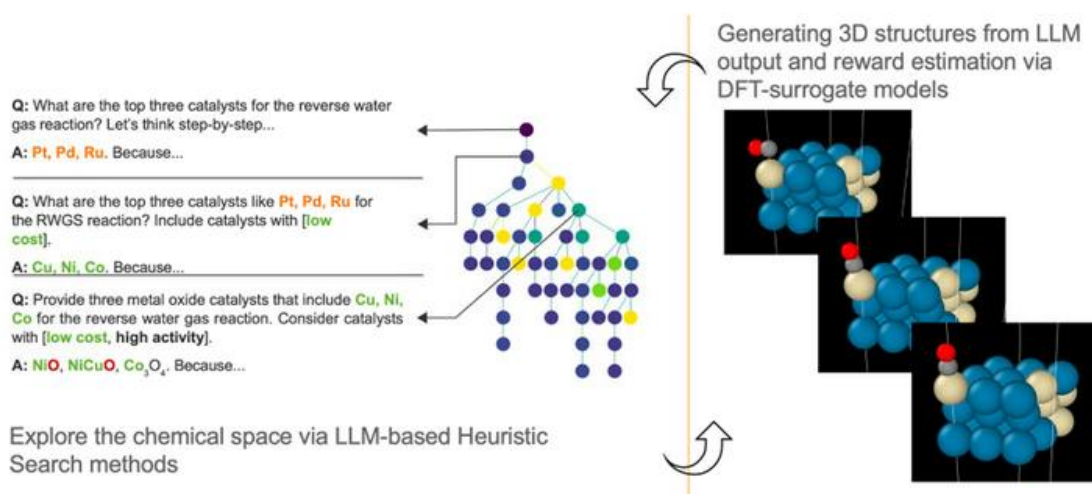
「化学における AI の真の課題は、科学的データによるこれらのモデルの訓練が非常に制限されていることです」と、[PNNL Battelle Fellow](#) で化学者の [Johannes Lerche 氏](#) は言う。「触媒ではこのことがさらに大きな課題となります。最も高収率な方法を用いたとしても、他の科学分野に比べて生成されるデータが少ないのです」。

ChemReasoner 開発チームは、LLM の化学的な論証能力の不足を補う必要があった。ChatGPT 等の一般的な LLM は、人間によるインプットに基づいてアウトプットを変えるように設計されている。これは、「人間のフィードバックによる強化学習(RLHF)」と呼ばれる原理である。

「そこで、『シミュレーションフィードバックによる学習』システムを発明したらどうか、というアイデアが生まれました」と Choudhury 氏は説明する。

ChemReasoner 開発チームは、言語モデルが新しい設計を提案した後、その精度をチェックする手段として量子化学シミュレーションからフィードバックを取得できるよう ChemReasoner を設計した。LLM を[化学シミュレーションデータで訓練されたグラフニューラルネットワーク](#)と組み合わせ、機械学習フィードバックループを作成した。このツールは、ユーザーの定義するパラメータに適合する様々な触媒を評価する手段として、シミュレーションで計算された吸着エネルギーを利用する。ChemReasoner 開発チームは、触媒クエリにおいて、現在利用可能な最先端の LLM である GTP-4 よりも ChemReasoner が優れていることを確認している。

この結果は、吸着エネルギーや反応エネルギー障壁などの触媒固有の概念を取り入れることで、AI システムをエネルギー的に有利な高効率の触媒に導くことを示している。



ChemReasoner は特異性、コストや活性等、ユーザーのニーズに合わせた多種の触媒の調査を可能にする。

(画像提供: Sutanay Choudhury | Pacific Northwest National Laboratory)

自律的な科学に向けて

ChemReasoner はすでに有望な成果を上げているが、開発チームはその能力を拡張する計画を立てている。現在は、CO₂ のメタノールへの変換において、ChemReasoner が選んだ触媒の効率性を実験的に検証する作業に取り組んでいる。

ChemReasoner は、PNNL Laboratory Directed Research and Development program の Generative AI initiative とマイクロソフトの Accelerate Foundation Models Research initiative、そして Azure Quantum Elements とのパートナーシップにより支援された。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、パシフィックノースウェスト国立研究所(PNNL)の記事“Novel Computing Tool Learns the Language of Chemistry”

(<https://www.pnnl.gov/publications/novel-computing-tool-learns-language-chemistry>) を翻訳したものである。

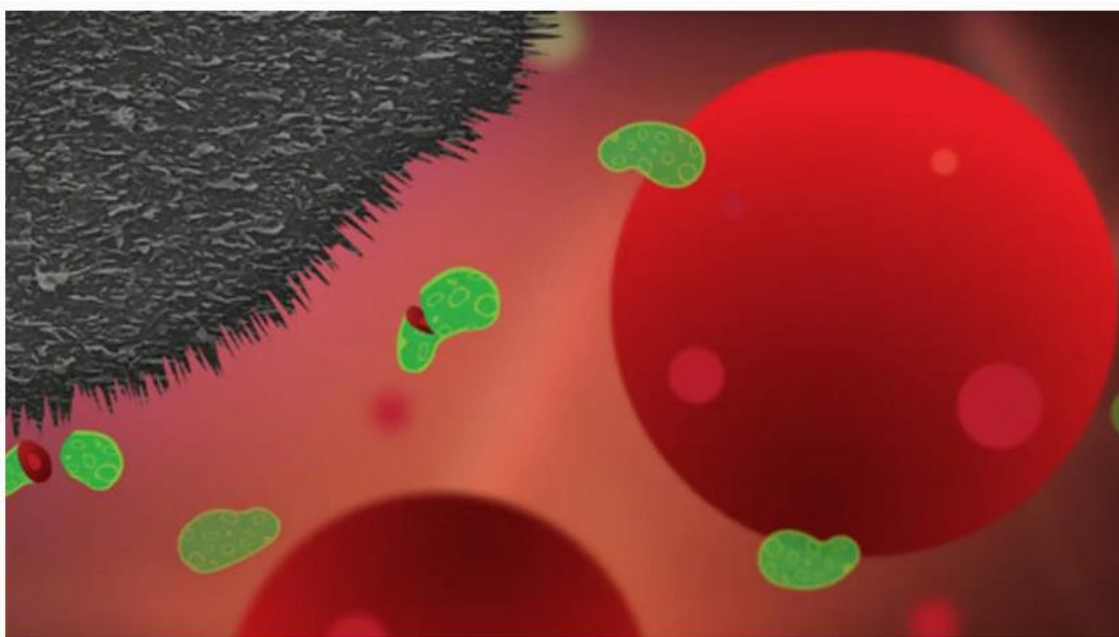
【ナノテクノロジー・材料分野】

仮訳

抗生物質耐性に対処するグラフェンスパイクマットと冷蔵庫の磁石技術 (スウェーデン)

2024 年 9 月 24 日

著者： Lovisa Håkansson



極めて鋭いグラフェン薄片が表面に一系列に並び、健康な細胞を傷つけずに殺菌する様子を示したイラスト。冷蔵庫に貼りつける磁石の技術を使用してグラフェンの殺菌効果を制御する、チャルマース工科大学が開発したまったく新しい方法による殺菌性グラフェン表面は、近い将来に医療機器に利用できる可能性がある。

イラスト提供：Yen Sandqvist

強力な殺菌性を有するグラフェンは、抗生物質耐性菌への対処におけるゲームチェンジャーとなる可能性がある。これまではこの殺菌性を効率的に制御する方法が存在せず、医療分野でグラフェンのこのようなポテンシャルを活用する方法も存在していなかった。今回、スウェーデンのチャルマース工科大学の研究者らは、冷蔵庫のドアに貼れる一般的な磁石に使用されているのと同様の技術を使用してこの問題を解決。カテーテルやインプラントのコーティングとして機能し、表面上に存在する細菌の 99.99% を殺菌できる、鍼治療のような超薄膜材料を開発した。



YouTube 動画:「グラフェンスパイクの殺菌作用」

イラスト提供:Yen Sandqvist

医療関連の感染症は世界的な問題となっており、多大な苦痛、医療費の高騰、抗生物質耐性の増大リスクの高まりを引き起こしている。感染症の多くは、異種表面から体内へ細菌を侵入させる可能性のある、カテーテル、人工股関節、人工膝関節、デンタルインプラント等の様々な医療機器の使用に関連して発生している。チャルマース工科大学では、原子レベルの薄さの二次元グラファイト材料であるグラフェンが、医療機器での抗生物質耐性や感染症への対処においてどのように貢献できるかについて調査している。過去には、基板に対し垂直に配向したグラフェン片で、表面への細菌の付着を防ぐ仕組みを実証している。鋭利なグラフェン片上で細菌が細かく切断され、死滅する。

「私たちは、バイオ医療デバイス、外科用器具やインプラント等のあらゆる表面に塗布して細菌を排除できる、グラフェンベースの超薄型抗菌材料を開発しています。グラフェンは、細菌が物体の表面に物理的に付着するのを防ぐため、抗生物質等の化学的な代替品とは異なり、抗生物質耐性の増加のリスクがないという利点もあります」と、チャルマース工科大学のシステム生物学教授であり、先般発表された研究の著者の一人である Ivan Mijakovic 氏は説明する。

表面の細菌を 99.99%殺菌

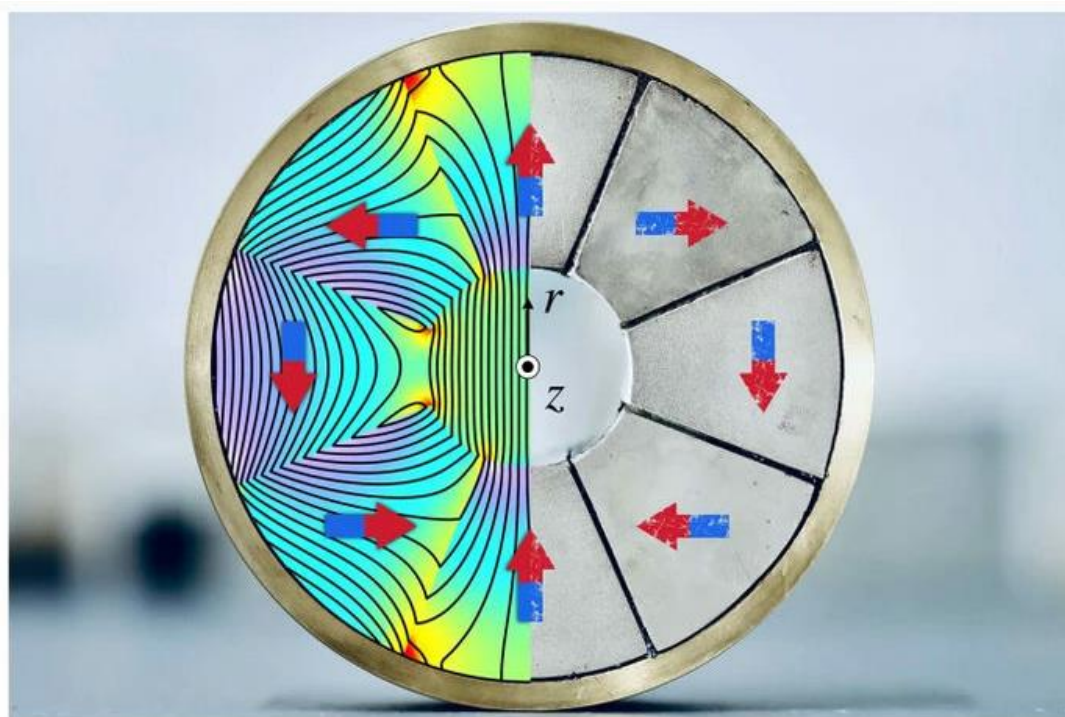
しかしながら、研究者らは困難に直面していた。グラフェンの殺菌性は実験室で実証できるが、グラフェン片の配向方向が制御できないため、この材料を医療機器の表面に使用することができていなかった。グラフェンの殺菌特性は、これまではその製造プロセスによる特定の方向でしか制御ができなかったが、今回、チャルマース大学の研究者らは、医療やそれ以外の分野でのグラフェン殺菌特性の実用化に向けた有望なブレイクスルーを達成した。

「私たちは、非常に高レベルの均一性で、複数の異なる方向でグラフェンの効果を制御する方法を見つけることができました。この新しい配向方法でグラフェンナノプレートを用いた医療用プラスチック材料の表面に統合し、表面に付着しようとする細菌の 99.99%を殺菌する表面を実現できるようになります。このことは、グラフェンを使用した殺菌性医療機器を製造する際の極めて高い柔軟性につながります」と、チャルマース工科大学 流動学教授の Roland Kádár 氏は言う。

磁場を制御することでこれまでにない効率を実現

研究者らは、希土類磁石を円形に配置し、磁石アレイ内の磁場を直線方向に整えることでグラフェンの均一な配向を誘導し、あらゆる形状の表面で非常に高い殺菌効果を得ることに成功した。

[Advanced Functional Materials 誌に発表されたこの方法](#)は「ハルバッハ配列」と呼ばれ、磁石アレイ内の磁場が強化・均一化される一方で、その外側の磁場が弱められることで、グラフェンの強い一方向配向を可能にするものである。この技術は、冷蔵庫に貼り付けられる磁石で見られるものに類似している。



ハルバツハ配列による新しい磁場配向設定の合成イラスト。赤/青の矢印は個々の磁石の磁化方向を、また数値シミュレーションでは、磁場強度が1テスラに達する磁石配列内の磁力線をそれぞれ示す。

イラスト提供: Roland Kádár, Comsol Multiphysics ソフトウェアを使用した数値シミュレーション

「ポリマーナノ複合材料でのグラフェンの配向にハルバツハ配列法を利用したのは今回が初めてです。この結果を踏まえ、グラフェンプレートを医療分野に導入し、医療関連の感染症の件数を減らし、患者の苦しみを軽減し、抗生物質耐性に対処したいと考えています」と、チャルマース工科大学の流動学・ソフトマタープロセッシングの研究者である Viney Ghai 氏は言う。

この新しい配向技術は、例えばバッテリー、スーパーキャパシタ、センサーや耐久性のある耐水性包装材料等の他の分野においても大きな可能性を示している。

「これらの分野に及ぶ幅広い影響を考慮すると、この新方法は材料配置にまったく新しい展望を開き、自然系に見られる複雑な構造を生物模倣したナノ構造の設計とカスタマイズを成功させるための強力なツールを提供します」と Kádár 氏は説明する。

研究の詳細:

[Achieving Long-Range Arbitrary Uniform Alignment of Nanostructures in Magnetic Fields](#)

本研究は、チャルマース工科大学の管理するコンピテンスセンター[2D-Tech](#)の枠組み内で実施された。同センターは、スウェーデン・イノベーションシステム庁 (Vinnova)、チャルマース工科大学および 19 の産業パートナーが資金を提供する、産業用途の 2D 材料ベース技術の研究とイノベーションのための国内拠点である。

新技術の詳細:

新技術で磁場を操作したグラフェン表面にさまざまな細菌培養物を晒す実験を研究室で実施した。細菌コロニー内の微生物数測定ツール CFU (コロニー形成単位) を使用して細菌の生存数を測定し、その有効性を評価した。また、走査型電子顕微鏡 (SEM) で細菌コロニーを走査し、グラフェンによる細菌細胞への破壊効果を画像で視覚化し、確認することができた。

訳: NEDO (担当 イノベーション戦略センター)

出典: 本資料は、スウェーデン王国・チャルマース工科大学の記事“Graphene spike mat and fridge magnet technology to fight against antibiotic resistance”

(<https://www.chalmers.se/en/current/news/mc2-graphene-spike-mat-and-fridge-magnet-technology-to-fight-against-antibiotic-resistance/>) を翻訳したものである。

(Reprinted with permission of Chalmers University of Technology)

【バイオテクノロジー分野】

仮訳

樹木からの安価でよりグリーンな工業用化学物質への転換を促進 (米国)

2024 年 10 月 18 日

著者 : Dee Shore



センテニアル・キャンパスの温室で樹木を観察する Bob Kelly(左)教授と Jack Wang 准教授。
写真提供: Dee Shore, NC State University

樹木は地球の大陸に最も豊富に存在する天然資源である。石油から工業用化学物質を生産する代わりに、ノースカロライナ州立大学(NC State)の科学者らとエンジニアらは、持続可能で環境に優しいその代替手段として樹木を利用する方法の研究を進めている。

リグニンは樹木を堅牢にして劣化しにくくしているポリマーであるが、問題があることがわかっている。今回、NC State の研究者らは、微生物発酵を通じて樹木等の植物を工業用化学物質に変えることの難しさや容易さが、リグニンの特定の分子特性であるメトキシ含有量によって決定されることを特定した。

今回の発見は、化石燃料由来の化学物質に代わる経済的かつ環境的に持続可能な代替手段としての、樹木からの工業用化学物質の製造の実現に一步近づくものであると、[Science Advances 誌に掲載された論文](#)の責任著者である Robert Kelly 教授は言う。

Kelly 教授の研究グループでは、これまでに、イエローストーン国立公園の温泉地等に生息する特定の超好熱菌が樹木のセルロースを分解できることを証明しているが、「その規模は小さい」と同教授は話す。「つまり、工業用化学物質の生産に適う経済的かつ環境的に合理的なレベルにはないということです」。

「その原因が、リグニンの低含有量だけではないことがわかりました」。と Kelly 教授は言う。

樹木に含まれる多量なリグニンの問題の解決に向けて、NC State のバイオテクノロジー・プログラムのディレクターで化学・生体分子工学部の Alcoa 教授でもある Kelly 教授は、同大学自然資源学部の森林バイオテクノロジー・プログラム長である Jack Wang 准教授とともに 10 年以上にわたって研究を続けてきた。Wang 准教授は、ノースカロライナ州の Plant Science Initiative の教授でもある。

[2023 年に Science 誌で報告されているように](#)、Wang 教授とその同僚らは CRISPR ゲノム編集技術を用いて、リグニンの含有量と組成を改変したポプラの木を開発している。ポプラの木に注目した理由は、その成長が早いこと、農薬使用量が最低限であることと、食用作物の栽培の困難な限界地での育成が可能なことである。

Kelly 教授の研究グループは、CRISPR で編集された全てのポプラの木の一部のみが、微生物による分解と発酵に適していることを発見した。同教授の下でかつて博士課程の学生だった Ryan Bing 氏は、これらの微生物の好物が植物の種類で異なることがわかったと説明する。

「イエローストーン国立公園のような場所の温泉にある特定の好熱菌にそのような植物を与え、それを目的の製品に変換させることができます。しかし、これらの細菌の好むものが植物の種類によって違うのです」と、現在バージニア州スターリングの Capra Biosciences で Senior metabolic engineer として働く Bing 氏は説明する。

「その理由が何なのか、ある植物が他の植物よりも好ましいのはなぜなのかが問題です」と同氏は説明する。「私たちは、様々な組成をもつ植物をこれらの細菌がどのように食べているのかを観察することで、その答えを見つけました」。

Kelly 教授と Bing 氏は、その後の研究において、もともとはロシアのカムチャツカ半島の温泉から分離され、遺伝子組み換えされた細菌の *Anaerocellum bescii* が、リグニンの含有量と組成が著しく異なる Wang 准教授の作製した人工ポプラの木をどれだけ分解できるかを調べた。

その結果、リグニンのメトキシ含有量が低いほど分解のし易いことを特定した。

「これによって、リグニンの低含有量のみが重要ではない理由が解明できました。答えは細部にあったのです」と Kelly 教授は言う。「メトキシ含有量が低いと、セルロースが細菌に利用されやすくなるようなのです」。

Wang 准教授は、製紙等の繊維製品に適したリグニン含有量の低い人工ポプラの木を作ったが、本研究結果は、リグニンだけでなくメトキシの含有量も低い人工ポプラが、微生物発酵を通じた化学物質の製造に最適であることを示唆している。

Wang 准教授の人工ポプラは温室での生育は良好だが、実地試験の結果はまだ得られていない。Kelly 教授の研究グループは以前、低リグニンのポプラの木のアセトンや水素ガス等の工業用化学物質への変換において、環境への影響が少なく、経済的にも好ましい結果が得られることを実証している。

このようなポプラの木が実地で持ちこたえ、「目指すべき指標がメトキシ含有量であることがわかったので、今後も目標に向かって研究を続ければ、ポプラの木から大量の化学物質を生産する微生物が得られるでしょう」と Kelly 教授は言う。

こうして、Wang 准教授のような研究者らには、化学物質の生産に最適なポプラの系統の生産のための具体的な目標が与えられた。Wang 准教授らは、この問題に取り組むべく、リグニンを改良したポプラの木の实地試験を開始している。

現時点では、木材を細かく刻んでから、化学物質と酵素を使ってさらに加工するための前処理を行う、従来の方法による樹木からの化学物質の生産は可能である。

遺伝子組み換え微生物を使ったリグニンの分解には、低エネルギーや低環境負荷等の利点があると Kelly 教授は説明する。

酵素はセルロースを単純な糖類に分解するのに利用できるが、その分解プロセスでは継続して酵素を加える必要がある。一方、特定の微生物は、そのようなプロセスをよ

り経済的にする鍵となる酵素を絶えず生成すると Kelly 教授は言う。

「これらの微生物はまた、酵素や化学物質よりもはるかに優れた働きをします」と Kelly 教授は付け加える。「これらはセルロースを分解するだけでなく、エタノールなどの製品に発酵させますが、これらをすべてワンステップで行います」。

「これらの細菌は高温で増殖するため、低好熱性の微生物を扱う際に雑菌の混入を回避するために必要となるような、無菌状態も不要です」と Kelly 教授は補足する。「これはつまり、樹木を化学物質に変換するプロセスを従来の産業プロセスと同じように実施できるようになり、導入の可能性が高くなるということを意味しています」。

Science Advances の論文のもう 1 人の著者であり、Wang 准教授の研究室の博士研究員である Daniel Sulis 氏は、気候変動によって悪化する環境災害は、化石燃料への依存を低減する方法を見つけるための研究を実施する緊急の必要性を浮き彫りにしていると語る。

「有望な解決策の 1 つは、地球と人間の健康で幸福な生活状態の両方を確保しながら、化学物質、燃料、その他のバイオベースの製品への社会のニーズを満たすために樹木を利用することにあります」と Sulis 氏は補足する。

「今回の発見は、この分野の進展だけでなく、持続可能なバイオベースのアプリケーションに樹木を利用するための、さらなるイノベーションの基礎を築くものです」。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、米ノースカロライナ州立大学(NC State)の記事“Finding Could Help Turn Trees Into Affordable, Greener Industrial Chemicals” (<https://news.ncsu.edu/2024/10/trees-into-cheaper-greener-industrial-chemicals/>) を翻訳したものである。

(Reprinted with permission of North Carolina State University (NC State))