

データ駆動型ケミストリ

佐藤 寛子

<https://researchmap.jp/hirokosatoh>



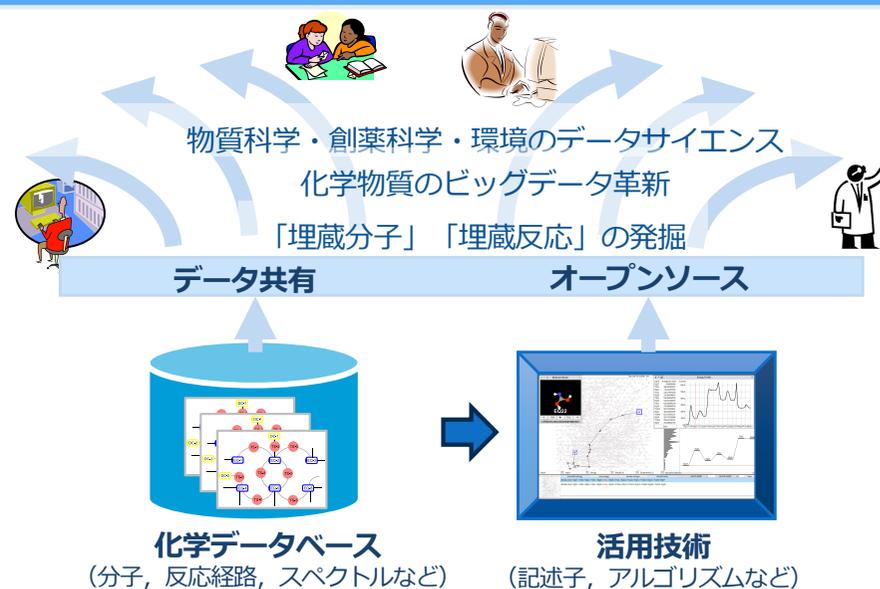
ROIS所属：2015.7～2025.6（2023.4にDS配属）

- 2012-2015 データ中心科学リサーチcommons「[データ中心ケミストリ](#)プロジェクト
- 2016-2018 未来投資型プロジェクト「[データ駆動型新規物質・知識創成に向けたケミカルデータ共有支援](#)」
- 2019-2025 データ駆動型ケミストリのインキュベーター

ROISでの役割

化学データ

創成
活用技術の開発
知識・新物質の発見



データベース

RMapDB 化学反応経路データベース

<https://archive.materialscloud.org/record/2020.138>

公開ソフトウェア・アルゴリズム

RMapView 化学反応経路マップ解析ソフトウェア

<https://github.com/ReactionMap>

RMapServer 化学反応経路マップデータベースサーバー

<https://github.com/ReactionMap>

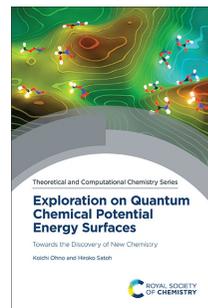
GRMSD 汎用的RMSD (平均二乗偏差) 計算アルゴリズム

<https://github.com/striwata/GRMSD>

X-GRMSD 汎用的RMSD厳密解計算アルゴリズム

<https://github.com/striwata/X-GRMSD>

書籍



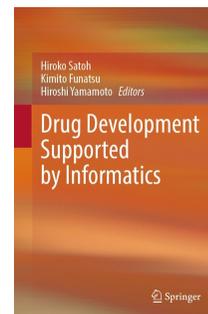
Exploration on Quantum Chemical Potential Energy Surfaces: Towards the Discovery of New Chemistry

Koichi Ohno, Hiroko Satoh

Royal Chemical Society

2022

DOI: <https://doi.org/10.1039/9781839167744>



Drug Development Supported by Informatics

Hiroko Satoh, Kimito Funatsu, Hiroshi Yamamoto Eds.

Springer

2024

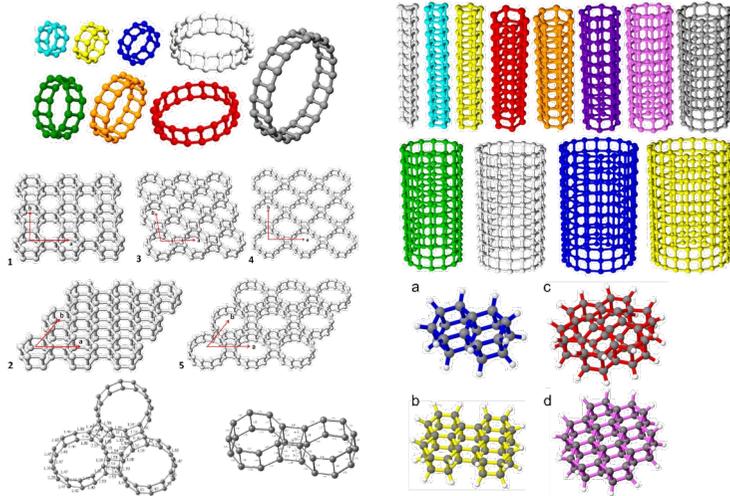
DOI: <https://doi.org/10.1007/978-981-97-4828-0>



データ駆動型ケミストリ

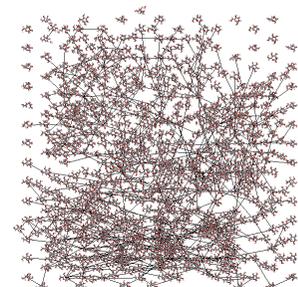
応用研究① 理論的に存在可能な新物質「埋蔵分子」の発見

- 新規骨格を持つ炭素同素体, 多環芳香族炭化水素

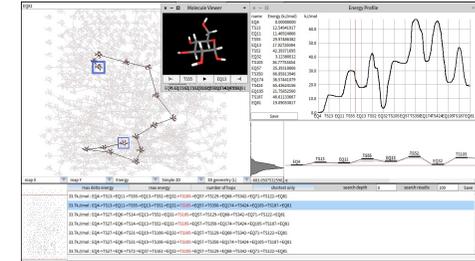


応用研究② 反応経路の自動探索と反応経路解析

- 量子化学に基づく立体配座 (コンフォメーション) 自動探索
- グルコースの2種の代表的な立体配座間の最安定反応経路の同定



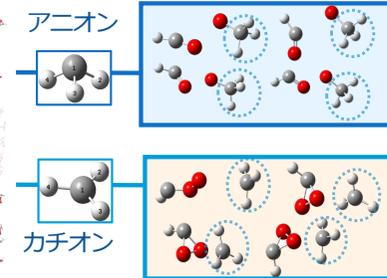
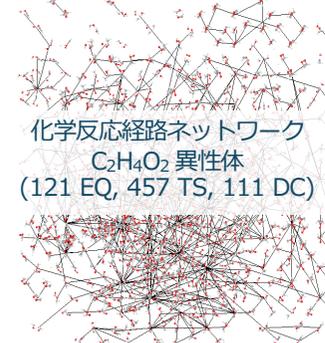
グルコース立体配座の反応経路



最安定反応経路の解析 (RMapViewer)

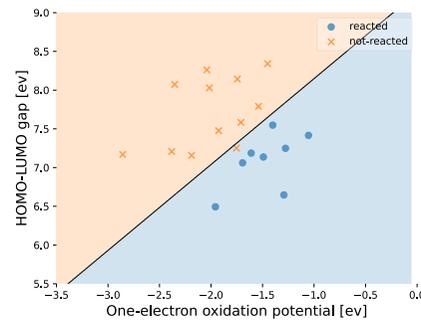
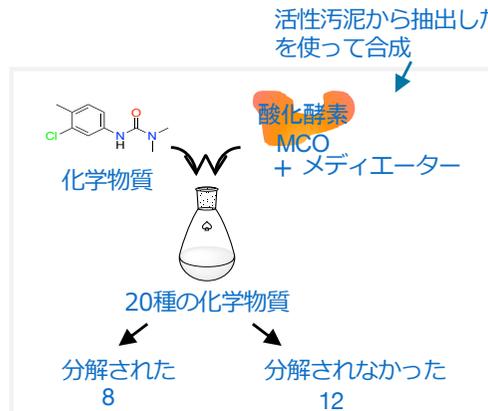
応用研究③ 分子の立体構造検索

- xyz座標情報のみで3D構造検索 (GRMSD) 3D-クエリ



応用研究⑤ 微量汚染物質の環境分解性の予測

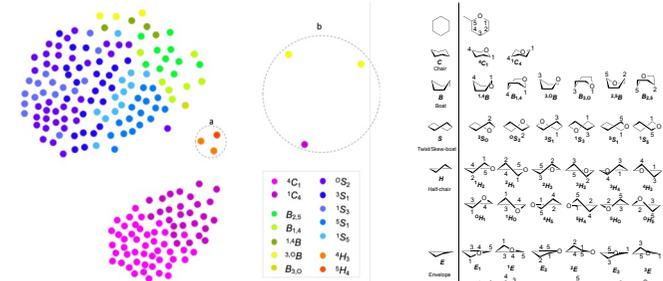
- 量子化学計算による記述子 (QC記述子) の探索と高速化
- 化学物質の環境分解性の予測



QC記述子を用いた生分解性予測 (線形サポートベクターマシン)

応用研究④ 分子の立体構造の自動分類

- xyz座標情報のみで3D構造の類似性判定・分類 (GRMSD)



グルコース立体配座の自動分類