

2025

6.11 (水) 12:10
12:50

12:10-12:15

◆ 演者紹介

12:15-12:40

◆ プレゼン

12:40-12:50

◆ 質疑応答

オンライン
(Zoom)

登録はこちら▶▶

https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_CR46OfdKTB6sbNVNAXgdNA

【技術支援】九州大学 Q-AOS

匂い分子の官能評価を 分子構造から予測する



Key Words

匂い

化学情報学

人工知能

原田 祐希 助教

熊本大学 半導体・デジタル研究教育機構 化血研寄附講座

1981 年福岡県生まれ。

2007 年九州大学大学院 理学府 分子科学専攻修了 (修士)、化学系企業を経て、2016 年東京工業大学 理工学研究科修了 (工学博士)。

東北大学、鳥取大学、理化学研究所 (創薬分子設計基盤ユニット、科技ハブ産連本部) を経て現職。

化学や情報工学の手法、調香トレーニングの経験を活用して研究を進める。本研究は博士課程の頃からの研究トピックス。

匂いの分子構造と官能評価との関係は未だ明らかではない。最近、筆者らは 700 種類の単品ケミカルについて 196 の評価用語による匂い記述が収録されている公開データをもとに、分子構造をもとにした匂い記述の予測について検証した。匂い記述子の予測について、そのグループ内分子の構造多様性をもとに検証したところ、構造多様性と匂い記述子の予測可能性の間には強い相関がみられた。4 種類の分子フィンガープリントを用いて同解析を行ったところ、この傾向は保持されていた。本研究では、匂い記述子のもつ複雑さ・曖昧さの課題が浮き彫りにされた。本研究は匂いの予測を大きく前進させ、匂いのデジタル化に貢献する。