

超強力接着性ハイドロゲルのデノボ設計に成功！

～データ駆動型アプローチで材料開発の新境地を開拓～

ポイント

- ・データ駆動型アプローチで、超強力な接着性ハイドロゲルのデノボ設計に成功。
- ・タンパク質データベースと機械学習を活用し、高分子鎖の配列パターンを設計と最適化。
- ・長期的な水中・海水接着性、生体適合性を実証、多様な実用応用が可能。

概要

北海道大学総合イノベーション創発機構化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）の范 海竜（ファン・ハイロン）特任准教授（現・深圳大学 准教授）、龔 劍萍（グン・チェンピン）教授、及び瀧川一学特任教授らの研究グループは、タンパク質のデータマイニング、実験、機械学習を統合した画期的なデータ駆動型アプローチを提案しました。これにより、超接着性ハイドロゲルのデノボ設計^{*1}に成功しました。

この新しいアプローチにより、約2万5千種類のタンパク質データベースから得た知見を基に高分子鎖の配列パターンを設計し、機械学習を活用してハイドロゲルの最適な組成を導き出すことに成功。これにより、従来のハイドロゲルを大幅に上回る最大1 MPaを超える接着強度を海水環境で達成し、強力な接着力を初めて実現しました。

開発された超接着性ハイドロゲルは、長期的な水中接着性、高い耐久性、そして生体適合性を示すことが実証され、多様な実用応用例での大きな可能性を秘めています。これは、これまで困難とされてきたソフトマテリアルのデータ駆動型開発^{*2}における極めて大きな一歩であり、生体材料、医療、ロボティクス、深海探査といった過酷な水中環境技術など、多岐にわたる分野での応用が期待されます。

本研究成果は、日本時間2025年8月7日（木）公開のNature誌に掲載されました。



タンパク質模倣高分子設計による超接着性ハイドロゲルの実用例。開発されたハイドロゲルのうちの一つを用いて、ゴム製アヒルを海岸の岩に接着させた実演の様子。このゲルは海の潮の満ち引きや波の衝撃にも耐え、過酷な海洋環境下での強力な接着性能を実証。

【背景】

データ駆動型手法は、金属やセラミックスなどのハードマテリアル分野において、物性予測や材料探索を加速する重要なアプローチとして発展してきました。しかし、ハイドロゲルのような複雑な構造を持つソフトマテリアルでは、その特性予測や効率的な設計が極めて難しいという課題が残されていました。これは、ソフトマテリアルが持つ複雑で多層的な構造と特性の関係性に起因します。

特に、生体組織や海水環境下での接着性は、医療デバイスや深海ロボットの開発において不可欠であるものの、従来の接着性ハイドロゲルの性能には限界がありました。このため、厳しい環境下でも機能する高性能な接着性ハイドロゲルの開発が強く望まれていました。

【研究手法】

本研究では、この長年の課題を克服するため、データマイニング、実験、機械学習を統合した独自のデータ駆動型アプローチを提案しました(図1(A))。具体的には、以下の三つのステップを踏みました。

1. タンパク質データベースからの情報抽出と記述子開発：自然界で強力な接着性を示す約2万5千種類のタンパク質の配列パターンを詳細に解析しました。その結果、高分子鎖のランダム共重合によってそのパターンを再現できる独自の記述子戦略を開発。これにより、ターゲットとする高機能接着性ハイドロゲルの設計とデータセット構築が可能となりました。
2. バイオインスパイアードハイドロゲルの合成とデータセット構築：上記の戦略に基づき、多様な組み合わせを持つ180種類の生体模倣ハイドロゲルを実際に合成し、その接着強度データを収集することで初期データセットを構築しました。これらのハイドロゲルの中には、先行研究で報告されたものを上回る接着強度を示すものが約半数も確認され、優れたデータセットを獲得しました。
3. 機械学習による組成最適化：構築したデータセットを基に機械学習モデル(特にガウス過程とランダムフォレスト回帰)を訓練し、膨大な候補の中から最適なハイドロゲルの組成を効率的に探索しました。実験回数を減らすため、バッチ型逐次モデルベース最適化(SMBO)^{*3}の手法も導入し、効率的な探索を実現しました。

【研究成果】

この新しいアプローチの結果、従来のハイドロゲルをはるかに凌駕する最大1MPaを超える接着強度を持つハイドロゲルの開発に成功しました(図1(B))。これは、既存の水中接着ハイドロゲルやエラストマーと比較して、一桁の性能向上に相当します。この驚異的な接着力は、通常の水環境はもちろん、塩分濃度が高い海水環境においても非常に強力な接着性能を発揮します。

本成果は、タンパク質が持つ精緻な情報と、機械学習の高度な最適化能力を融合することで、これまで勘と経験に頼りがちだった複雑なソフトマテリアルの設計空間を、データに基づいて効率的に探索できることを実証したものです。特に、特定の疎水性モノマー、芳香族モノマー及び帯電性モノマーの最適な組み合わせが、水中接着性を飛躍的に高めることを明らかにしました。

開発された超接着性ハイドロゲルは、多様な素材(無機材料、プラスチック、金属)に対して高い接着力を示し、1kgのせん断荷重下で1年以上も接合を維持できるなど、その並外れた耐久性を実証しました。また、200回以上の着脱サイクル後も強力な接着性を維持し、その優れた繰り返し接着性能も確認されました。

今回開発された複数の超接着性ハイドロゲルは、その優れた性能を様々な実用応用例で示しました。具体的には、あるハイドロゲルは海岸の岩にゴム製のアヒルを固定し、激しい波や潮にも耐えるなど、

過酷な海洋環境での実用性を実証しました。また、別のハイドロゲルは、水圧のかかるパイプの穴を瞬時に塞ぎ、高い水密性を発揮するなど、一般的な接着剤では不可能な性能を示しました。さらに、マウスへの皮下埋め込み試験では、これら複数のハイドロゲルが良好な生体適合性を示すことも確認され、医療分野への応用における大きな可能性を示唆しています。

【今後への期待】

今回開発された超接着性ハイドロゲルは、その比類ない接着特性から、再生医療における組織接着剤、水中での精密手術用接着剤、深海探査ロボットの緊急補修材、さらには生体模倣ロボットの柔軟な皮膚など、多岐にわたる革新的な応用が期待されます。

一方で、本研究で確立したデータ駆動型設計アプローチは、接着性ハイドロゲルに留まらず、広範な機能性ソフトマテリアルの迅速な開発にも適用可能な、極めて系統的なアプローチを提供します。これにより、ソフトマテリアルのデノボ設計と開発における長年の課題解決に貢献できます。

今後は、高分子を構成するモノマーの多様性拡大、モノマー配列をより精密に制御できる重合技術の進展、そして、物理学の知見を取り入れた機械学習モデルの開発を通じて、さらなる多機能化・高性能化を追求し、材料科学の新たな地平を切り拓いていきます。これにより、社会の様々な課題解決に貢献できると期待されます。

【謝辞】

本研究は JSPS 科研費 (JP21K17745、JP21K14676、JP22K21342、JP22H04968、JP24K17728) の助成を受けたものです。

論文情報

論文名 Data-Driven De Novo Design of Super-Adhesive Hydrogels (データ駆動型デノボ設計による超接着性ハイドロゲル)

著者名 Hongguang Liao¹、Sheng Hu^{2,3}、Hu Yang⁴、Lei Wang^{2,5}、Shinya Tanaka^{2,5}、Ichigaku Takigawa^{2,6*}、Wei Li^{2,7*}、Hailong Fan^{2,8*}、Jian Ping Gong^{2,9*}

(¹ 北海道大学大学院生命科学院、² 北海道大学総合イノベーション創発機構化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)、³ 大阪大学人工知能研究センター (AIRC-ISIR)、⁴ 中央財経大学情報学院、⁵ 北海道大学大学院医学研究院、⁶ 京都大学、⁷ 蘇州研究院、⁸ 深圳大学、⁹ 北海道大学大学院先端生命科学研究院、*責任著者)

雑誌名 Nature

DOI 10.1038/s41586-025-09269-4

公表日 2025年8月7日(木)(オンライン公開)

お問い合わせ先

北海道大学総合イノベーション創発機構化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)

教授 龔 劍萍 (グン チェンピン)

TEL 011-706-9011 メール gong@sci.hokudai.ac.jp

URL <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/gong-jian-ping>

特任教授 瀧川一学 (たきがわ いちがく)

TEL 04-7136-3987 メール takigawa@icredd.hokudai.ac.jp

URL <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/takigawa-ichigaku>

配信元

北海道大学社会共創部広報課 (〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

TEL 011-706-2610 FAX 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

【参考図】

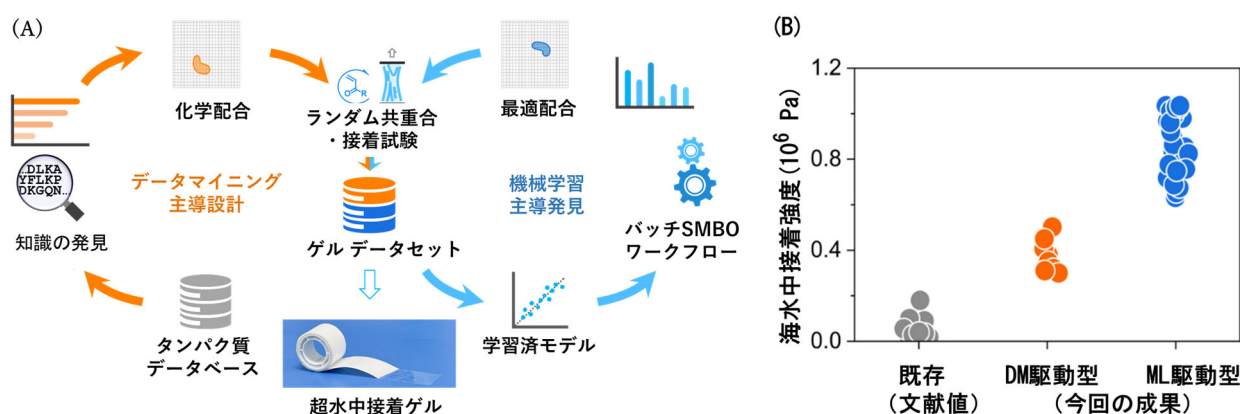


図 1. データ駆動型デノボ設計による水中接着性ハイドロゲルの開発。(A) 高性能な接着性ハイドロゲルの設計を実現するため、本研究が提案するデータマイニング (DM)、実験、そして機械学習 (ML) を統合したアプローチの概念図。(B) 既存のハイドロゲルと、本研究で開発されたデータマイニング (DM) 駆動及び機械学習 (ML) 駆動のハイドロゲルにおける、海水中での接着強度の比較。

【用語解説】

- *1 デノボ設計 (De Novo Design) … ラテン語で「ゼロから」「新たに」という意味。既存のものを改良するのではなく、全く新しいアイデアや原理に基づいて、目的とする機能や特性を持つものを設計・構築する手法。
- *2 データ駆動型手法 (Data-Driven Approach) … 経験や勘ではなく、収集された大量のデータに基づき、客観的な分析や統計的手法を用いて意思決定や問題解決を行うアプローチ。
- *3 バッチ型逐次モデルベース最適化 (SMBO) … 実験やシミュレーションにかかるコストを最小限に抑えつつ、ある目的を達成するための最適な条件 (最適な材料の組成、最適なプロセスの設定など) を効率的に見つけ出すための最適化手法。「バッチ型」とは、一度に複数の候補 (実験点) をまとめて提案する効率の高い方式。

【WPI-ICReDD について】

ICReDD (Institute for Chemical Reaction Design and Discovery、アイクレッド) は、文部科学省国際研究拠点形成促進事業費補助金「世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)」に採択され、2018年10月に本学に設置されました。WPIの目的は、高度に国際化された研究環境と世界トップレベルの研究水準の研究を行う「目に見える研究拠点」の形成であり、ICReDDは国内にある18の研究拠点の一つです。

ICReDDでは、拠点長の下、計算科学、情報科学、実験科学の三つの学問分野を融合させることにより、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な「化学反応」を合理的に設計し制御を行います。さらに化学反応の合理的かつ効率的な開発を可能とする学問、「化学反応創成学」という新たな学問分野を確立し、新しい化学反応や材料の創出を目指しています。

