



University of Miyazaki
Faculty of Engineering

分子シミュレーションが開拓する次世代型モノづくり



化学生命プログラム 准教授 宇都 卓也

出身:宮崎県小林市(小林高等学校卒業)
趣味:コンピュータグラフィックス、サーバー構築
講義:生命化学、高分子化学、生体超分子化学など
専門:理論・計算化学

ひとこと

近年さらなる進歩を遂げた情報技術の活用で、次世代型モノづくりを実現し、新たな価値を創造していきます。最先端の分子シミュレーションにより、モノづくりのデジタル変革(DX)技術を開拓することに挑戦してみませんか?

研究内容

生体高分子や電解質などを対象とした理論・計算化学研究

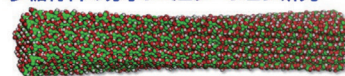
- ▶ バイオマス資源である多糖材料や関連タンパク質の分子論的振舞いを調べることでバイオマテリアル創製やバイオ燃料変換などの研究開発
- ▶ 常温で液体として存在する熔融塩のイオン液体を用いた二次電池用電解質の設計や、こうした電解質が示す細胞毒性の発現予測など
- ▶ 「やわらかい材料」を解析するために分子シミュレーションの理論構築

例えば、分子シミュレーションの計算精度を決定づける分子力場の開発や性能評価、時空間スケールの拡張が可能となるシミュレーション法の開拓

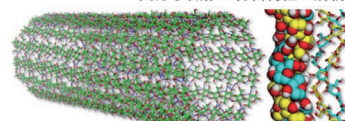
この研究はどう役立つ? 研究から学べることは?

- ▶ コンピュータシミュレーションによって物質・材料を探索することは当たり前の時代となり、創薬やナノテクノロジー、環境・エネルギー領域などでの適用が急激に広がっています。
- ▶ このような学問分野を『理論・計算化学』といい、化学実験と並ぶ新たな研究アプローチとして発展し続けています。理論・計算化学の研究を通して、物質・材料における未知のメカニズムを解明することで、独自視点でモノづくりに貢献することを目指しています。
- ▶ バイオマス利活用・エネルギー貯蔵・ライフサイエンスに関する基礎を学ぶことができ、化学と情報学のアプローチによる問題解決や実用化を目指す研究姿勢が身につきます。
- ▶ 理論・計算化学は未開拓領域が多いことから、波及性の高い研究成果に巡り合う可能性に満ちており、国内外の学術研究機関や企業との共同研究を進めています。未知の分野に飛び込む経験を提供し、第一線で活躍する理工系人材を育成します。

多糖材料の分子シミュレーション研究



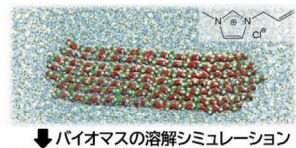
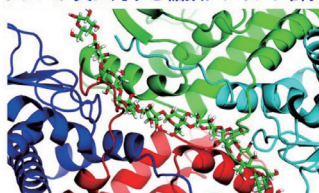
高分子繊維の材料特性を解析



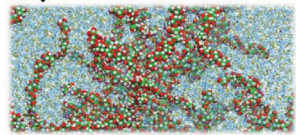
ナノ構造体の設計
(セルロースナノチューブ)

分子構造予測

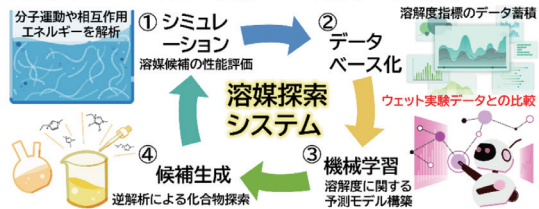
タンパク質に対する糖鎖ドッキング計算 細胞膜の構造安定性に基づく毒性評価



↓ バイオマスの溶解シミュレーション



計算化学×データ科学を連携させた高分子の溶媒探索システム



最近、スーパーコンピュータを活用した分子シミュレーションで得られたビッグデータを機械学習により解析し、難溶性バイオマスを高効率で溶解するプロセス開発に成功!! (特許出願中)