



研究テーマ

1 ヒトiPS細胞、幹細胞のエピジェネティクス

2 獣医療に応用可能な動物iPS細胞作成法の開発



湯井 敏文

ゆい としふみ
工学教育研究部
工学科応用物質化学プロ
グラム担当

教授

キーワード

セルロース、キチン、キトサン、セルラーゼ、セルロース合成酵素、分子モデリング、分子シミュレーション、計算化学、分子・材料設計、タンパク質モデリング、ドッキング解析

特許情報・
共同研究・
応用分野など

国内大学のCNFやセルロース合成・分解酵素研究に関わる研究グループとの共同研究。さらにキチン・キトサン材料と関連酵素に関する共同研究。
平成25年度セルロース学会林治助賞「有限結晶モデル法によるセルロースI型およびIIII型結晶構造の計算化学研究」

研究概要

計算機シミュレーション技術を手段として、生命現象を分子レベルで明らかにします。具体的な研究対象は、セルロースに代表される生体材料の構成要素である結晶性構造多糖類と、それらの合成や分解に関わるタンパク質です。人類は古くから木綿、紙、木材としてセルロース繊維を利用してきましたが、セルロース繊維のマイクロ構造については不明な点も多く、さらに天然で合成され、そして分解される仕組みも明らかになっていません。本研究は、実験研究者と共同でシミュレーションを研究手段として、それら問題の解決にとりこんでいます。

1 ヒトiPS細胞、幹細胞のエピジェネティクス

近年、結晶性セルロース繊維をナノスケール(10-9m)の繊維幅まで解繊したセルロースナノファイバー(CNF)が環境にやさしい高機能性素材として注目され、特に、樹脂を強化するフィラーとしての応用が期待されている。一方、解繊のしくみや樹脂とCNF界面との相互作用等、基礎的な知見が明らかにされておらず、また、CNF表面を改変し、樹脂界面との相溶性の向上や機能性付与などのCNFの改良も試みられている。

本研究テーマは、CNF開発研究で得られた理解を、シミュレーション計算手段によってマイクロレベルの理解まで深めることを目

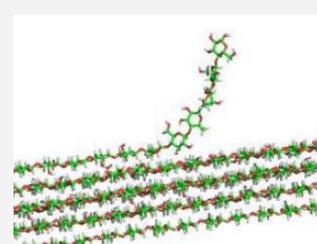


図1 シミュレーション計算で再現したセルロース繊維からのセルロー

2 獣医療に応用可能な動物iPS細胞作成法の開発

セルロース繊維は、合成繊維の紡糸プロセスとは全く異なる極めて精密なしくみによって生体内で形成される。一方、化学的に難分解性のセルロース繊維は分解酵素によって効率よく分解される。本研究は、シミュレーション計算によって合成・分解に関わるタンパク質(酵素)が、セルロース基質をどのようにして認識し、結合するのかについて解明することを目的とします。それをもとに、セルロース繊維形成や分解機構解明に貢献することを目指しています。

ホームページ

湯井研究室

<http://www.chem.miyazaki-u.ac.jp/~webms/index.htm>

技術相談に応じられる関連分野

- ・分子や材料の構造や特性を予測する計算化学(分子力学法、分子動力学法、分子軌道法)プログラムの基本的な使用法や計算結果の解釈の仕方、またはそれらを用いた依頼計算
- ・タンパク質モデリング手段による遺伝情報からタンパク質立体構造モデルの予測と立体メッセージ

研究の性格上、共同研究先は、主に、他大学の実験研究グループですが、県内企業からは、材料研究にける設計や広報用シミュレーションムービー作成の依頼に対応したことはあります。