

コンピュータを用いた機能性材料設計

研究キーワード：量子化学計算、ケモインフォマティクス、分子シミュレーション、酸化反応

情報科学研究科・医用情報科学専攻

准教授 齋藤徹 Toru Saito

研究シーズの概要

医薬品をはじめとする機能性材料設計の分野において、情報機器を活用した研究は実験的手法の相補的な方法論として期待されています。コンピュータ上での化学実験である分子シミュレーション基盤技術の開発、物性や反応性を即座に予測できる AI モデルの構築に取り組んでいます。

研究シーズの詳細

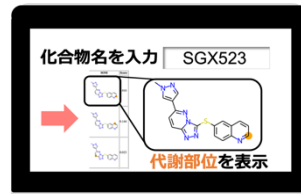
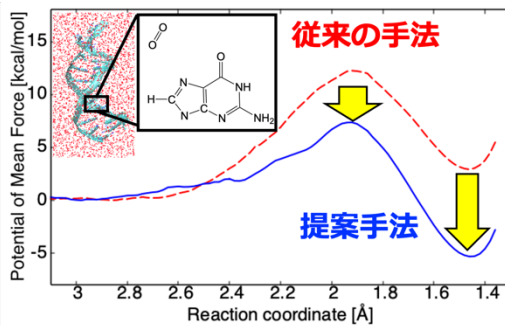
◆研究例◆

タンパク質などの巨大分子のシミュレーションやハイスループットスクリーニングでは量子化学計算を数万回から数十万回繰り返して行います。現実的な時間で実施するために、高精度かつ高速計算手法を独自開発し、計算コストと計算精度の両面の是正に努めてきました。提案手法を反応経路探索や反応ダイナミクス計算に展開しています。

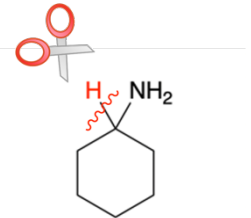
◆研究例◆

描画ソフトで設計した分子の反応性や物性をその場で予測するために、高速な半経験的量子化学計算 (SQM) と機械学習 (ML) を併用した SQM/ML モデルの開発にも取り組んでいます。これらの予測 AI モデルを用いると、既存の量子化学計算に基づく予測よりも十数万倍高速に薬物代謝部位や反応速度定数を予測可能です。

DNAによる酸化損傷のシミュレーション



代謝部位を即座に予測



反応性の高精度予測
 数日 → 数秒 に短縮

想定される用途・応用例

- ◆ 複雑な化学反応の視覚的理解と反応設計
- ◆ 金属酵素、特に酸化還元酵素の阻害機序の視覚的理解
- ◆ インシリコ創薬

セールスポイント

私の研究では、金属酵素による複雑な酵素反応をコンピュータ上で観測することを通じて、反応を阻害する医薬品や、人体や環境に低負荷な新物質・新素材の設計・開発に貢献することを目指しています。

問い合わせ先：広島市立大学 地域共創センター

TEL:082-830-1764 FAX:082-830-1555

E-mail:ken-san@m.hiroshima-cu.ac.jp

〒731-3194

広島市安佐南区大塚東三丁目4番1号

(情報科学部棟別館1F)