



重田 育照 Shigeta Yasuteru

計算科学研究センター

E-mail : shigeta@ccs.tsukuba.ac.jp

Lab web page : https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/people/shigeta/shigeta_personal/Message.html

学者の杜 : <https://ura.sec.tsukuba.ac.jp/unit-members?kid=80376483>

Kakenhi : 80376483

Orcid : <https://orcid.org/0000-0002-3219-6007>

Affiliation : Center for Computational Sciences

Collaborators : 庄司 光男(助教)、原田 隆平(准教授)、西澤 宏晃(助教)、堀優太(助教)、原嶋庸介(助教)

研究テーマ

- タンパク質の構造変化と生命機能の関心の解明
- 生体内でのエネルギー・物質生産機構
- 中分子医薬品の膜透過と作用機序解明

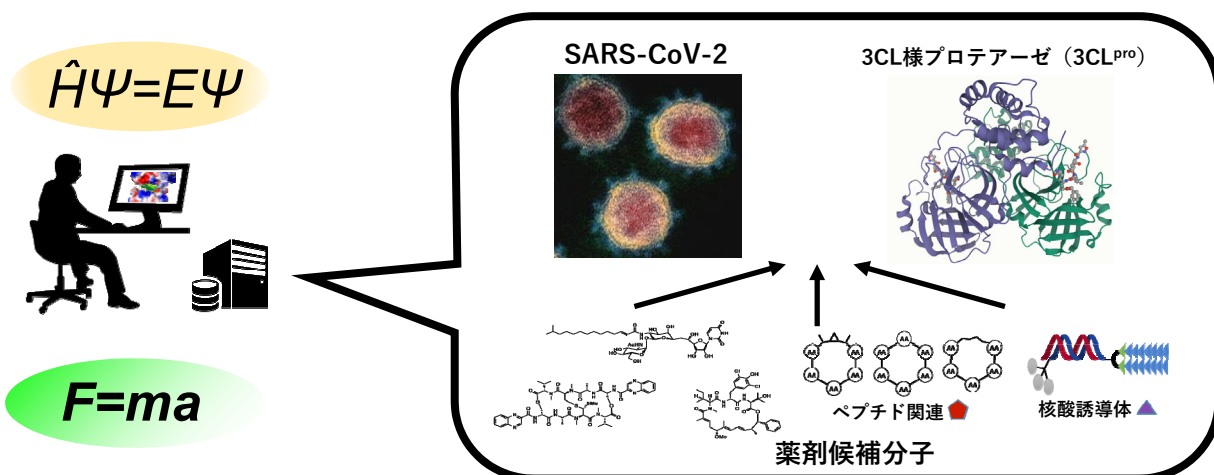
Keyword 生体エネルギー論、第一原理計算、分子動力学計算、インフォマティクス、中分子創薬

研究ハイライト

Highlight

生体内分子の機能は大変複雑で、理論解析する前は全く意味が分からないけれど、多視点的、かつ丁寧に解析することで、構造と機能の間に驚くほど精緻な相関関係があることが判ります。理論構築もぼんやりした所からスタート

して、時間をかけて一つ山を越して見通しが立つと、全く違った数理構造との関連が導かれたりもします。こうやって得られた理論的知見・方法を生体エネルギー変換や創薬へ応用することで、社会に還元することを目指しています。



研究の応用・展望

Applications and Prospects

- タンパク質を基盤とした化学反応設計を目指しています
- 中分子医薬品開発に資する計算手法の開発を行っています
- 超並列計算機を用いた研究を展開させています

文献・知財・作品

Literature, intellectual property, work

- B. Nutho, P. Mahalapbutr, K. Hengphasatporn, N.C. Pattarangoon, N. Simanon, Y. Shigeta, S. Hannongbua, T. Rungrotmongkol, *Biochemistry*, 59(18), 1769-1779 (2020).
- T. Murakawa, K. Kurihara, M. Shoji, C. Shibasaki, T. Sunami, T. Tamada, N. Yano, T. Yamada, K. Kusaka, M. Suzuki, Y. Shigeta, R. Kuroki, H. Hayashi, T. Yano, K. Tanizawa, M. Adachi, and T. Okajima, *Proceedings of National Academy of Science U.S.A.* 117, 10818-10824 (2020).
- H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta, S. Ito, A. Kimura, *J. Physical Chemistry B*, 124, 389-403 (2020).
- R. Harada, R. Yoshino, H. Nishizawa, Y. Shigeta, *Journal of Molecular Graph and Modeling* 92, 94-99 (2019).
- M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, *Journal of Physical Chemistry A*, 123(13), 2497-2502 (2019).