

ラボ便り

宮崎大学工学部湯井研究室の紹介

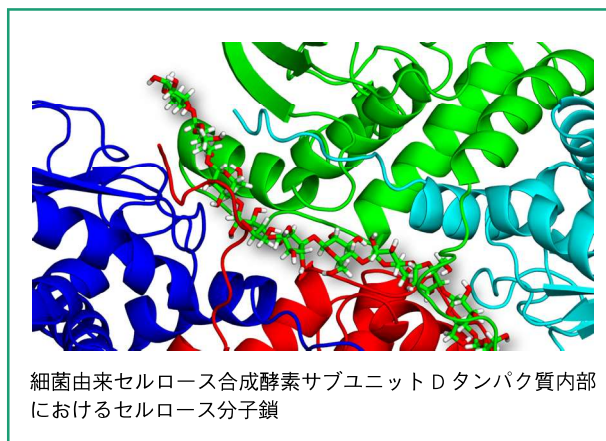
宮崎大学工学部は宮崎市南部に位置する木花地区のキャンパスにある。近隣には、鬼の洗濯岩に囲まれた青島、照葉樹林が残る加江田溪谷や双石山などがあり、豊かな自然に恵まれる。湯井研究室は、物質環境化学科に所属し、教員（教授・湯井敏文 / 助教・宇都卓也）および学部・大学院学生によって構成される。大学院修士課程学生は工学研究科修士課程環境系コースに、博士課程学生は農学工学総合研究科生物機能応用科学専攻にそれぞれ所属する。令和3年度から、工学部は1学科6プログラムに改組され、本研究室の所属は応用物質化学プログラムに変更される。

本研究室では、結晶性多糖類（セルロース・キチン、アミロースなど）や糖質関連タンパク質を対象とする分子シミュレーション研究に継続的に取り組んでいる。湯井は、分子モデリング手段を併用したX線繊維回折法による多糖類の結晶構造解析研究を経て、平成5年に計算化学を研究手段とする研究室を立ち上げた。これまで、結晶性多糖類の材料特性解析や分子設計、タンパク質-糖鎖間の分子認識に関する研究を推進してきた。

平成22～26年に、宇都は修士・博士課程学生として本研究室で指導を受け、セルロース多形の結晶構造を構成する分子鎖シートの立体構造安定性に着目した材料解析の研究で学位を取得した。その後、日本学術振興会特別研究員（PD）として、鹿児島大学大学院理学研究科・門川淳一研究室で、イミダゾリウム型イオン液体中でのセルロース・キチン結晶材料の溶解シミュレーション研究に2年半従事し、平成30年11月にテニュアトラック教員として現職に着任した。

現在の研究テーマとして、湯井は、宇都とともに様々な拡張アンサンブル法を適用した、セルロース結晶変形・破壊挙動や結晶内部におけるゲスト分子の拡散挙動等、セルロース結晶材料のマイクロ特性解析に取り組んでいる。さらに、同様な手段を、糖質関連タンパク質における糖鎖認識機構や反応機構の体系的理解を目指し、これまで、セルロース繊維形成に關与する細菌由来セルロース合成酵素サブユニットDにおける糖鎖認識（上図）や種々の糖結合性タンパク質と糖鎖間の複合体形成に関する研究成果を報告した。

宇都自身のテーマとして、難溶性バイオマスに対する良溶媒探索を目的として、産業で利用される溶媒や



細菌由来セルロース合成酵素サブユニットDタンパク質内部におけるセルロース分子鎖

イオン液体によるセルロース・キチン溶解機構の解析に取り組んでいる。そこから派生して、機能性溶媒であるイオン液体などの構造-物性相関の解析や、これらの微生物に対する毒性として、溶媒の脂質二重膜に対する親和性を評価している。博士研究員時に、既存の分子力場パラメータの欠陥に気づき、パラメータ開発のノウハウを蓄積してきたことが対象系の拡張に大いに役立った。こうした研究は、大規模系のために計算資源の確保が必要不可欠であり、独自に構築した計算機クラスターおよび共同利用計算機（分子科学研究所計算科学研究センター / 九州大学情報基盤研究開発センター）によって実施されている。共同利用施設の関係者に深く感謝申し上げる。

応用研究に重きを置く工学部において、今日でも計算化学を唯一の研究手段とする研究室は極めて珍しい。今後、得られた分子レベルの知見からバイオマテリアルに関する基礎的なコンセプトを提案することで貢献する次世代型モノづくりを目指していきたい。

宇都卓也（宮崎大学キャリアマネジメント推進機構）

湯井敏文（宮崎大学工学部）