

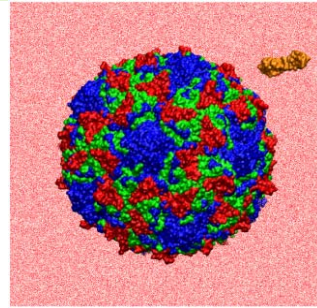


## 計算分子科学研究拠点(TCCI)研究成果事例

### 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

(研究代表者：岡崎 進 名古屋大学、関連課題番号：hp120292, hp120293, hp130011, hp140217)

- ・1000万原子からなる全原子モデルによる水溶液中のウイルスカプシド丸ごと1個のシミュレーションを実現し、**カプシドのミクロな振る舞いを解明**。
- ・感染へとつながるレセプターとの引力相互作用を再現し、**抗ウイルス剤の開発に必要な基礎的知見を得ることに成功**。

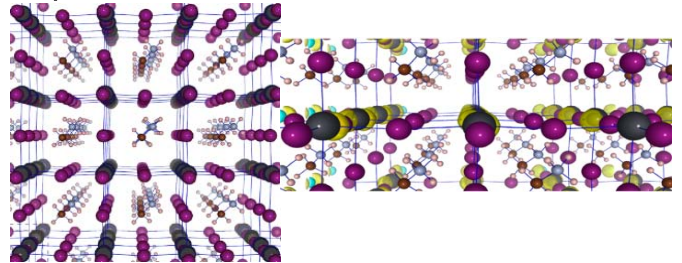


(左)水溶液中のウイルスおよびウイルスレセプター  
(右)カプシドを横切る水分子のストロボショット

### 有機系太陽電池の材料設計シミュレーション

(研究代表者：山下 晃一 東京大学、関連課題番号：hp120078)

- ・太陽光により誘起される電子・正孔伝導経路を予測し、エネルギー変換効率向上に向けた**有機無機ハイブリッド材料を設計**。
- ・従来のトライ・アンド・エラー実験では既に限界。**分子レベル・シミュレーションによるブレークスルーが不可欠**。

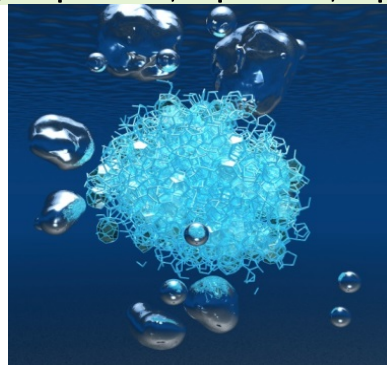


太陽電池ハイブリッド材料として有望なメチルアンモニウム鉛ペロブスカイトの計算モデル。長距離電荷輸送に有効な電子と正孔の伝導経路を確認。

### 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

(研究代表者：田中 秀樹 岡山大学、関連課題番号：hp120277, hp130020, hp140216)

- ・メタンハイドレートの分解速度について**新たなメカニズムを見出すことに成功**。
- ・分解初期における気泡生成の抑制・促進によるメタンハイドレートの**分解速度の制御**の可能性を示唆。
- ・生産技術の開発のための**非常に有用な情報**を提供。(成田英夫 産総研メタンハイドレート研究センター長)

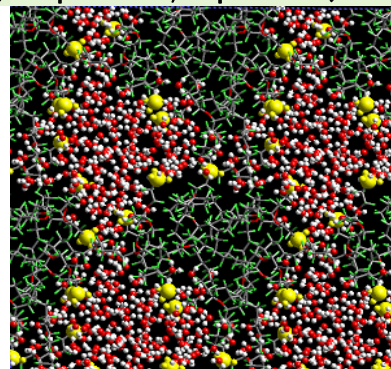


「京」を用いたシミュレーションで得られた、分解途中のメタンハイドレートの様子。中央の水色のかたまりが、分解しつつあるメタンハイドレートの骨格。分解がある程度進むと、図のようにメタンの気泡が生じる。この気泡生成が分解を加速する。

### 高分子膜のデザインに向けた分子シミュレーション

(研究代表者：松林 伸幸 大阪大学、関連課題番号：hp120093, hp140156)

- ・海水淡水化や蒸溜代替を可能とする高分子分離膜や燃料電池の主要要素である電解質膜を、**計算機シミュレーションでデザイン**。
- ・機能発現機構の本質を解明することで、**高分子設計を合理化**でき、これまでtry-and-errorだった研究開発を効率化する手法として有効活用しています。(東レ、茂本勇)



高分子電解質膜の分子シミュレーションの様子。全原子モデルに基づいて、物性計算、特に、自由エネルギー計算を行うことで、分子レベルの相互作用の知見に基づく高分子膜の設計に資する。

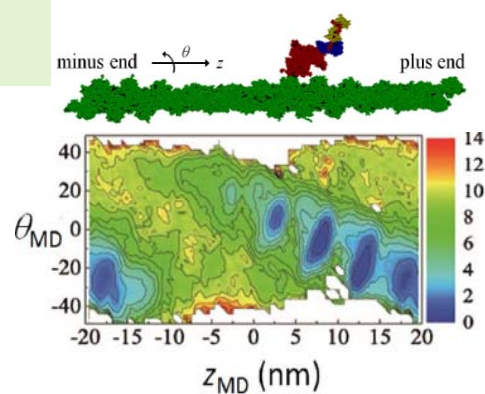


## 計算分子科学研究拠点(TCCI)研究成果事例

### 筋肉モーター駆動の分子メカニズム

(研究代表者：笹井 理生 名古屋大学)

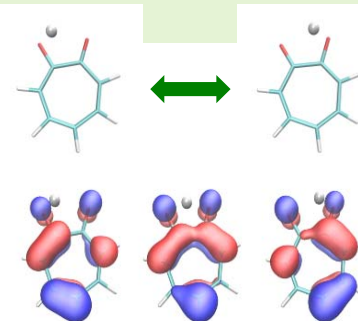
- ・内燃機関より遙かに高効率に、37°Cのままで動くスーパーエンジンである筋肉モーターの運動を分析し、**蛋白質の滑り運動と構造変形が協調してモーターが駆動される機構を初めて明らかにした。**



アクチン-ミオシン複合体の自由エネルギー面構造がモーターの動作を決める。

### 第一原理経路積分インスタントン法の開発とプロトン移動過程への応用 (研究代表者：三浦 伸一 金沢大学)

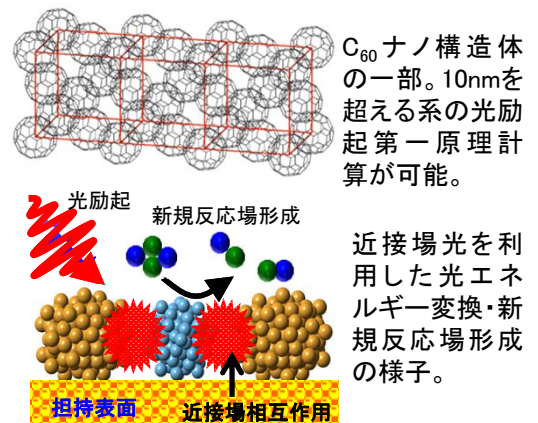
- ・**プロトンのトンネル移動過程**の高精度シミュレーションを経路積分法と電子状態計算を結合することにより実現。**光エネルギー変換の定量的な取扱いの端緒を開く。**



分子内プロトン移動反応  
下図はプロトン移動に伴う電子状態の変化を示す。

### ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの理論設計 (研究代表者：信定 克幸 分子研) 関連課題番号：hp120035, hp140054

- ・近接場光励起により誘起される光・電子機能デバイス設計のための**計算手法(GCEED)の開発。**
- ・光励起第一原理計算としては、**世界最大サイズ規模(10nm以上)のナノ構造体の計算が可能。**
- ・物質系の性質に依存しない**デバイス開発が可能。**
- ・産業界・社会が望むナノ寸法の光論理ゲートや高効率光/電気エネルギー変換デバイス等の開発に**極めて有効な理論的ツール**となる。(大津元一 東京大学教授)



C<sub>60</sub> ナノ構造体の一部。10nmを超える系の光励起第一原理計算が可能。

近接場光を利用した光エネルギー変換・新規反応場形成の様子。

#### 【お問合せ先】

自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点 TCCI (実験棟515号室)

e-mail: [tcci-office@yfp2.ims.ac.jp](mailto:tcci-office@yfp2.ims.ac.jp)

Phone: 0564-55-7074 Fax: 0564-54-2254(代表)

URL: <http://tcci.ims.ac.jp/tcci/>

〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地