

電解質溶液中の荷電粒子間相互作用と相図の理論的研究



理工学部
特任助教
末松 安由美

研究シーズの紹介

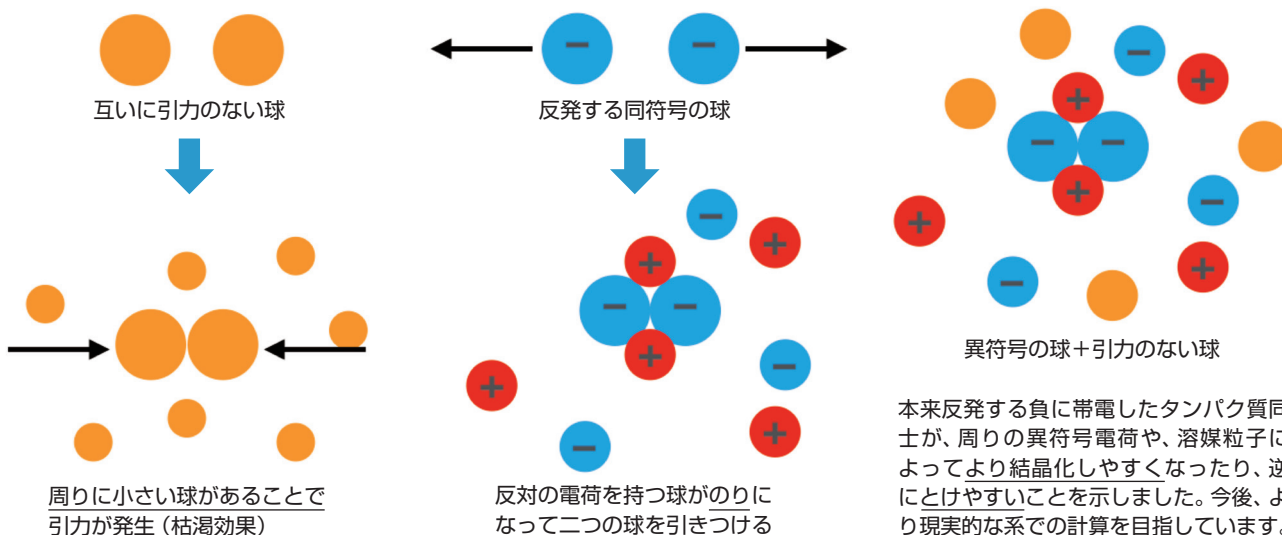
水が氷になるといった結晶化は非常に身近な現象です。しかし、この状態変化が体の中で起こると重大な病気の原因になることがあります。例えば、結石や血栓は体の組織が結晶化したものです。このような病気の予防や治療について対処法は発達していますが、そもそもどのようなメカニズムで結晶化がおこるのかは十分にわかっていません。逆に言えばメカニズム

が分かることで、よりよい予防法や治療法、薬の開発が期待できます。我々の研究は、そのような発展的な研究を見据えた基礎的な研究です。現実の系は非常に複雑なためシミュレーションや理論的な手法で扱うのはとても難しいです。そこで、タンパク質を丸い球として扱ったり、それに電荷を与えたモデル系を使って結晶化が起こるメカニズムにアプローチをしています。



粒子間相互作用の理論的研究によって

- 病気のメカニズムなどにアプローチする基盤となります。
- 工業的な利用も同時に期待できます。

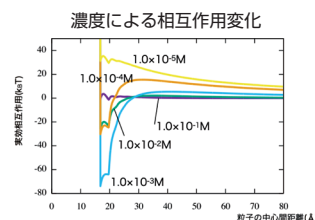


期待される活用シーン

● 病気の原因となった結石や血栓に、どのような薬を使えば良いか?



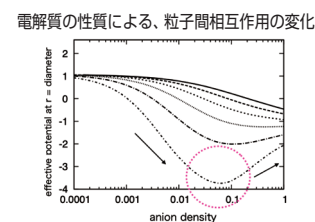
結晶化が起こりにくい溶媒濃度や粒子サイズを計算することで、薬や治療の方向性を提案する。



● タンパク質の立体構造を知るために、タンパク質を結晶化させるにはどうしたらよいか?



タンパク質の構造を壊したり、不純物をより減らした結晶を作る電解質や添加物濃度を提案する。



その他の研究テーマ

- ・粒子間相互作用から考える活量の研究
- ・モンテカルロシミュレーションを用いた荷電粒子間相互作用と結晶化の研究