

計算科学 (重田 育照)

Computational Sciences (YASUTERU Shigeta)



Shigeta Yasuteru, Ph.D.
 Professor
 Center for Computational Sciences,
 University of Tsukuba



E-mail address: shigeta@ccs.tsukuba.ac.jp
 URL: <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/eng/research-divisions/division-of-life-sciences/biological-function-and-information-group/>

原子・分子レベルのシミュレーションによる機能性材料・生命現象の解析

スーパーコンピュータを用いた分子シミュレーションにより、原子・分子レベルで生命現象や材料機能を解明する研究を行っています。特に、薬とタンパク質の相互作用、光や電気に応答する材料、触媒反応などを対象として、分子が時間とともにどのように変化するかを解析しています。さらに、AI やデータ科学を活用して、大規模シミュレーションデータの解析や、新しい分子・材料の探索にも取り組んでいます。実験だけでは観測が難しい現象を理論・計算の立場から理解し、創薬やエネルギー・環境材料の開発につなげることを目指しています。

Atomistic Simulations for Functional Materials and Biological Systems

We conduct research to elucidate biological phenomena and material properties at the atomic and molecular levels through molecular simulations on supercomputers. In particular, our work focuses on analyzing how molecules change over time in systems such as drug-protein interactions, photo- and electro-responsive materials, and catalytic reactions. In addition, we utilize AI and data science to analyze large-scale simulation data and explore new molecules and materials. His research seeks to understand phenomena that are difficult to observe experimentally and to examine them from theoretical and computational perspectives, ultimately contributing to drug discovery and the development of energy and environmental materials.

Research Topics in My Group

<p>Biophysics of Enzymatic Reaction Mechanisms</p> <p>OEC in Photosystem II</p>	<p>Photochemistry of TTA Upconversion Process</p> <p>QM and MD calc. + Marcus theory → TTA kinetic constants</p>
<p>Computational Biomedical Science</p> <p>Cell Fission Protein Drug Discovery</p> <p>Data-driven MD Simulations</p>	<p>New Theories and Methods</p> <p>Influenza HA3 Battery Solvent</p> <p>Large-scale Fragment MO Large-scale FPMD Simulations</p>