

鷹野 景子 / TAKANO, Keiko

化学

糖鎖科学

自然・応用科学系 / 理学部化学科/糖鎖科学教育研究センター/シミュレーション科学教育研究センター

http://www.sci.ocha.ac.jp/chemHP/,  
http://jglobal.jst.go.jp/public/20090422/200901030856290730

## ■研究者情報

連絡先

Email: takano.keiko@ocha.ac.jp / TEL: 03-5978-5338 / FAX: 03-5978-5335

専門分野

量子化学、計算化学、コンピュータシミュレーション

## ■研究成果情報

## 計算化学による糖鎖認識機構の解明

## キーワード

糖鎖、立体構造、分子間相互作用、糖結合特異性、フラグメント分子軌道法

## 研究内容

## ■概要（背景・目的・内容）

第3の生命鎖である糖鎖の構造と機能の解明に注目が集まっています。本研究では、計算化学の手法を駆使して、タンパク質-糖鎖間の認識機構や、糖結合特異性などを理論的に解明することを目的とします。電子の振る舞いを考慮した量子化学的手法、特に認識部位を詳細に解析可能なフラグメント分子軌道法を活用して、糖鎖の認識部位の特定や相互作用の本質を解明します。

## ■プロセス・研究事例

- 1) 糖脂質による酵素機能阻害に関する糖鎖-タンパク質相互作用の解析
- 2) マイクロドメインを形成する糖脂質分子の立体構造と分子間相互作用
- 3) シグレック7のリガンド特性に関する理論的研究(Figs.1&2)

## ■潜在可能性（応用・将来展望）

酵素阻害剤の開発、新規薬物の開発、新規機能性分子の開発等の発展性がある。

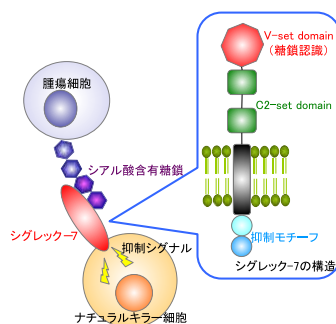


Fig. 1 生体内でのシグレック-7の機能

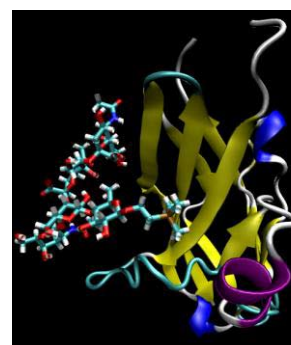


Fig.2 シグレック-7(V-set domain)と糖鎖リガンド複合体のX線結晶構造 (PDB ID:2HRL)

## 特許・著作物等の知財情報、製品化情報、あるいは社会貢献実績

- 1) 日本化学会第2回関東支部大会、2008年8月、桐生（招待講演）
- 2) The 71st Okazaki Conference, "New perspectives on molecular science of glycoconjugates" Nov. 2011, Okazaki, Japan (Invited talk)

## 産学官・社会連携の可能性

## ■共同研究／技術提供

生化学分野の研究機関や企業の実験系研究者との共同研究あるいは、技術提供が可能です。

## ■知見の教授・共有

計算化学の入門講座(実習を含む)の開講が可能です。