

氏名	鷹野 景子 TAKANO Keiko
所属 職名	人間文化創成科学研究科自然・応用科学系 教授
学位	理学博士（1988 大阪市立大学） / PhD in Science
専門分野	理論化学、量子化学、計算化学
URL	<a href="http://www.sci.ocha.ac.jp/chemHP/keiko.htm">http://www.sci.ocha.ac.jp/chemHP/keiko.htm</a>
E-mail	<a href="mailto:takano.keiko@ocha.ac.jp">takano.keiko@ocha.ac.jp</a>

### 研究者キーワード / Keywords

量子化学  
コンピュータシミュレーション  
反応機構  
分子間相互作用  
糖鎖科学

quantum chemistry  
computer simulation  
reaction mechanism  
intermolecular interaction  
glycoscience

### 主要業績

K. Takano, N. Koga, T. Matsushita, K. Hashimoto, H. Hosoya, H. Matsuzawa, U. Nagashima, T. Nishikawa, H. Wasada, S. Yamabe, M. Tachikawa, M. Hada, Bull. Chem. Soc. Jpn., 83, 660-666 (2010) A Hybrid Data Base: Quantum Chemistry Literature Data Base II - New Concept and New Methodology -

M. Kayanuma, H. Hosoi, A. Furuya, Y. Masuda, and K. Takano, Chem. Phys. Lett., 494, 139-143 (2010) Ab Initio Molecular Orbital Study of Dinitrobenzene Radical Anions

Y. Mori, K. Takano, J. Photochem. Photobiol. A, Chemistry, 219, 278-284 (2011) Reaction mechanism of di-pi-methane rearrangement of 4-phenyl-4H-pyran: A CASSCF/MRMP2 study

### 研究内容 / Research Pursuits

量子化学的手法をベースに、分子や化学反応のシミュレーション計算を行っている。実験科学に対する相補的情報の提供と実験結果の理解や解釈に加えて、新しい分子の設計や現象の予測を目指している。対象とする分子のサイズは大小様々で、無機分子・有機分子・生体系の認識部位など多岐に渡る。ここでは、糖鎖科学分野における研究について述べる。生体内におけるタンパク質（アミノ酸）と基質（糖鎖）との相互作用を解析するために、ドッキングモデルの構築と、分子動力学シミュレーションおよびフラグメント分子軌道法による相互作用解析を行った。ウイルスの糖鎖と抗体におけるアミノ酸残基との間の相互作用の大きさや相互作用の性質を解析した。

Our ultimate goal is to understand and predict properties of molecules, characteristics of chemical bonding, mechanisms of chemical reactions, and molecular interactions from the viewpoint of quantum chemistry. There are many kinds of complicated intermo

## 教育内容 / Educational Pursuits

理学部全体と化学科、および大学院理学専攻における教育活動に従事した。全学共通科目の「基礎化学B」のほかに、化学科の専門科目を複数担当した。「化学特別ゼミI」コンピュータケミストリの入門として、水分子やアンモニア分子の量子化学計算の実習。「物理化学I」量子化学の基礎的内容。「計算化学」「量子化学」量子化学計算の実践的講義（計算機実習を含む）。「専門化学実験I」および「基本化学実験III」における物理化学分野の実験を担当し、物理化学の重要概念を修得させることを意図した実験に従事した。「特別研究」卒業研究生（2010年度は2名）の研究指導。大学院前期課程理学専攻の科目としては、「理論化学特論」分子軌道計算の実習と学術論文を読むための専門用語の解説。「理論化学特論演習」量子化学の専門書の輪読と問題演習により、理論的基礎を養う。大学院生（博士前期課程理学専攻4名、博士後期課程複合領域科学専攻1名）の研究・論文指導。修士論文審査においては、副査2件を務めた。

The classes I provided for undergraduate students are as follows: "Basic Chemistry B," "Physical Chemistry I" "Computational Chemistry" "Quantum Chemistry" "Lab Course of Physical Chemistry." Those for graduate students are as follows: "Advanced Theoreri

## 研究計画

量子化学的手法を用いて、分子およびその集合体を対象とするコンピュータシミュレーションを行う。実験科学に対する相補的な情報の提供、化学現象の先見的な理解および予測を目指す。生命科学に重要な役割をもつ糖鎖科学への計算化学からのアプローチは先導的な研究と位置づけられ、重要テーマの一つとして推進していく。金属錯体の構造と反応、分子の励起状態と分光学など実験精度に匹敵する計算研究を推進する。現在実施している共同研究テーマとして下記のものがある。（1）フラグメント分子軌道法による酵素と基質、ウイルス表面糖鎖と抗体との相互作用の解析（2）マイクロドメイン糖脂質糖鎖の立体構造と分子間相互作用の解析（3）金属錯体の構造と反応機構の解明（4）モデルコアポテンシャルを用いたポリハロゲンの構造と結合特性に関する研究（5）量子化学文献データベースの開発 今後の共同研究の可能性としては、以下のものがある。（1）気相分子の分光学定数の高精度予測（2）原子クラスターの幾何学構造と結合性の系統的解析

## メッセージ

計算化学は、化学の長い歴史とは対照的に、20世紀になってからスタートした若い学問・研究分野ですが、現在では、化学のあらゆる分野の研究に必須の役割を果たしています。結合の性質や化学反応の過程や機構をコンピュータシミュレーションによって精度よく調べることができます。現象を説明するだけでなく、予測も夢ではありません。化学科では、1年次の「基礎化学B」の前半で、原子・分子に関する概念の導入を行い、2年次の「物理化学I（講義）」と「計算化学（実習）」で量子化学の基礎と実際を学びます。さらに4年次の計算化学および大学の計算化学特論において、化学分野の研究に活用できるレベルの計算化学の知識と技術を修得できます。計算化学を学び、化学の新しい領域を共に開拓していきましょう。また私たちは、国際的視野で活躍できる理系の女性人材育成をめざし、理系英語の教育や留学支援にも力を入れています。本学の支援をおおいに活用して、力を伸ばしてほしいと願っています。