

教員名	鷹野 景子 (TAKANO Keiko)
所 属	人間文化研究科複合領域科学専攻
学 位	理学博士 (1988 大阪市立大学)
職 名	助教授
URL/E-mail	<a href="http://www.dc.ocha.ac.jp/fukugo/takano.html">http://www.dc.ocha.ac.jp/fukugo/takano.html</a> / <a href="mailto:keiko@cc.ocha.ac.jp">keiko@cc.ocha.ac.jp</a>

## ◆研究キーワード

計算化学 / 量子化学 / 理論化学 / 化学反応 / 分子認識機構

## ◆主要業績

総数 (4) 件

- ・ K. Ueno-Noto, M. Hara-Yokoyama, and K. Takano J. Comput. Chem., 27, 53-60 (2006) Recognition of Tandem Sialic Acid Residues by CD38: A Theoretical Study
- ・ K. Miyamoto, K. Takano, and Y. Fukuda Bull. Chem. Soc. Jpn., 78, 2124-2129 (2005) Theoretical Study on the Disproportionation Reaction of Nickel(II) Mixed-Ligand Complexes Containing N,N,N',N'-Tetramethylethylenediamine, Benzoylacetate, and a Halide Anion
- ・ N. Koga, T. Matsushita, K. Takano, K. Hashimoto, M. Hada, H. Hosoya, H. Matsuzawa, K. Mogi, U. Nagashima, H. Wasada, S. Yamabe (Eds.) J. Comput. Chem. Japan, 4(5) (Special Issue), Society of Computer Chemistry, Japan, pp.1-367 (complete in one issue) (2005) Quantum Chemistry Literature Data Base II. Supplement 24. Bibliography of ab initio Calculations for 2004

## ◆研究内容

量子化学的手法を主な研究手段として、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ってきた。実験に対する相補的な情報の提供および、化学現象の先見的な理解および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。本稿では、糖鎖科学への適用例について述べる。

<糖鎖科学への計算化学からのアプローチ> 細胞の分化シグナルの発生と制御に関与する新しいタイプのマイクロドメイン糖脂質の立体配座解析を行い、糖のある特定の水酸基の配向が糖脂質糖鎖全体の向きを決めるのに重要な因子であることを明らかにした。また、糖脂質による酵素阻害に対して、フロンティア分子軌道と阻害効果の大きさとの相関を見出し、マンノース結合タンパク質の糖結合性に関して、受容体と基質における静電ポテンシャルの相補性と糖結合性との相関を明らかにした。

## ◆教育内容

理学部化学科における教育活動に従事した。  
「化学特別ゼミ」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。  
「構造物理化学」量子化学の基礎的内容。  
「量子化学」量子化学計算の実践的講義 (計算機実習)。  
「物理化学実験」物理化学の重要概念を修得させることを意図した実験。  
「化学演習 I・II」化学の幅広い分野の論文の輪読および文献紹介の指導。  
「特別研究」卒業研究生 (2005 年は 3 名) の研究指導。大学院前期課程物質科学専攻における教育活動に従事した。  
「量子化学特論」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 (博士前期課程物質科学専攻 3 名、博士後期課程複合領域科学専攻 3 名) の研究・論文指導。学位審査の主査 2 件、副査 1 件を務めた。主査の内 1 件は、ルイ・パルツール大学 (仏) との共同博士指導に基づく。

## ◆Research Pursuits

---

Our ultimate goal is to understand and predict properties of molecules, characteristics of chemical bonding, and mechanisms of chemical reactions. From the viewpoint of quantum chemistry, we are studying properties of chemical bonds in molecules and reaction mechanisms. There are many complicated intermolecular and intramolecular interactions in materials. We hope to understand and clarify origin and/or features of the interactions.

One of the research projects done in 2005 is related to glycoscience. Systematic conformational analysis of the sugar-part in phosphatidylmonosacchride was carried out to examine the preferable conformation of sugars. Preliminary calculations suggested that hydrogen bonds and gauche conformation contributed to the stability of the conformers. Starting from the initial geometries having gauche conformations and/or hydrogen bonds, geometries of the sugar-part were optimized. Finally, conformers were grouped into three types. It was found that ratios of the types depended on the orientation of the OH group. We also found a relationship between the frontier molecular orbitals and the inhibitory effect for the inhibition of the glycolipids in the enzyme reaction. In addition, we found the correspondence between electrostatic potentials and binding property of the enzyme to the substrate.

## ◆将来の研究計画・研究の展望

---

量子化学的手法を主な研究手段として、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。実験に対する相補的な情報の提供および、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。

## ◆共同研究可能テーマ・今後実用化したいテーマ

---

- ・糖鎖の立体構造解析
- ・酵素と基質の相互作用の解析
- ・金属錯体の幾何学構造と反応機構の解明

## ◆受験生等へのメッセージ

---

「コンピュータケミストリ（計算化学）」をご存知ですか？

高校の化学には登場しない、みなさんにとって新しい分野です。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。計算化学は、化学のあらゆる分野の研究に、現在では必須の役割を果たしています。化学は実験の学問として長い歴史を持ちますが、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調べることができるようになりました。しかも、現象を説明するだけでなく、予測も夢ではありません。

お茶の水女子大学理学部化学科では、1年次の基礎化学の一部で量子化学の導入を行い、2年次の構造物理化学(必修)で量子化学の基礎をみっちり学びます。4年次の計算化学および大学院(博士前期課程)の量子化学特論において、コンピュータケミストリの講義実習を受講できます。

コンピュータケミストリを学び、化学の新しい領域を共に開拓していきましょう。

## ◆Educational Pursuits

---

Educational Activity

I hold the chair of the subjects described below at the Department of Chemistry of the Faculty of Science.

"Special Seminar of Chemistry," "Structural Physical Chemistry," "Quantum Chemistry," "Experimental Exercise of Physical Chemistry," "Exercise in Chemistry I & II," and "Research Activities."

I occupied the chair of the subjects described below at the Division of the Physical and Chemical Sciences of Graduate School of Humanities and Sciences (Master's Program).

"Advanced Quantum Chemistry" and "Exercise in Theoretical Chemistry."

I supervised three undergraduate students, three master's course students, and three PhD students. One of the PhD students was jointly supervised and examined by University of Louis Pasteur and our university. Another student was a Japanese-government-financed foreign student.