氏名：　鷹野　景子（TAKANO Keiko）
所属：　人間文化創成科学研究科自然・応用科学系　糖鎖科学研究教育センター
職名：　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：　http://www.sci.ocha.ac.jp/chemHP/keiko.htm
E-mail：　takano.keiko@ocha.ac.jp

## ◆研究キーワード　／　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 ／ molecular interaction ／ glycosience

## ◆主要業績

・K. Ueno-Noto, M. Hara-Yokoyama, and K. Takano
Bull. Chem. Soc. Jpn., 81, 1062-1071 (2008)
Gangliosides' Inhibitory Effects on NAD Glycohydrolase: Estimating the Solvation Effect in the Physiological Environment

## ◆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。

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、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。酵素と基質（糖鎖）との相互作用を解析するために、ドッキングシミュレーション計算およびフラグメント分子軌道法による相互作用解析も行っている。

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 intermolecular and intramolecular interactions in materials. We try to understand and clarify origin and features of the interactions.

One of the research projects 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 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. We are conducting docking simulation to analyze the interaction and recognition mechanism between enzymes and their substrates.

## ◆教育内容　／　Educational Pursuits

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 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）。
「物理化学実験」「基本化学実験 III] 物理化学の重要概念を修得させることを意図した実験。
「特別研究」卒業研究生（2008 年度は 1 名）の研究指導。
大学院前期課程理学専攻における教育活動に従事した。
「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 2 名、博士後期課程複合領域科学専攻 4 名）の研究・論文指導。修士論文審査においては、主査 1 件、副査 2 件を務めた。博士論文審査では主査 2 件、副査 1 件を務めた。

The classes I provided for undergraduate students are as follows:
"Physical Chemistry I"
"Computational Chemistry"
"Quantum Chemistry"
"Lab Course of Physical Chemistry"

For graduate students:
"Advanced Theorerical Chemistry"
"Exercise in Theoretical Chemistry"
I supervised a undergraduate student, two master's course students, and four PhD students.

## ◆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）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
（2）ホスフェニウム錯体の構造と反応機構の解明
（3）フラグメント分子軌道法による酵素と基質の相互作用の解析
（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　他

## ◆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、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。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」で量子化学の導入を行い、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、国際的視野に立って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。積極的に活用して力を伸ばしてください。