

計算化学による相互作用の“見える化”を介した分子デザイン

研究キーワード：計算化学、分子内相互作用、分子間相互作用、量子化学、分子設計、薬剤設計

情報科学研究科 医用情報科学専攻

教授 鷹野 優 TAKANO, Yu

研究シーズの概要

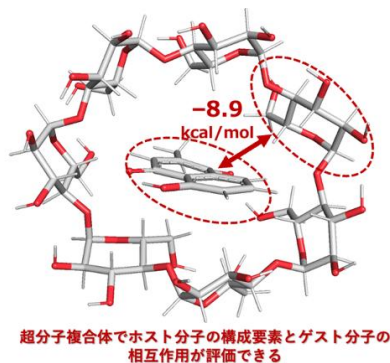
水素結合などの分子内・分子間相互作用は、多くの化学現象および生命現象において重要です。そのような相互作用を定量化可能にする、新しい量子化学的計算手法を開発しています。この独自技術により、分子設計や薬剤開発への応用が可能となります。

研究シーズの詳細

◆研究例◆

超分子のホスト分子の構成要素とゲスト分子の相互作用評価

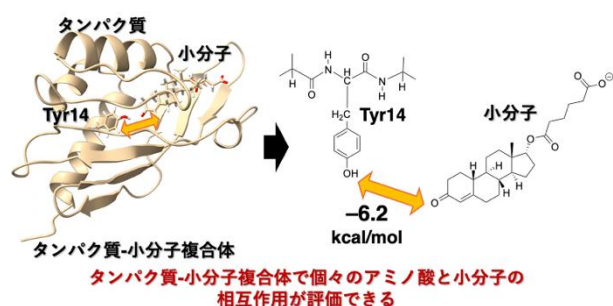
バイオ医薬品は特定の標的に作用し、副作用が少ないなどの利点がありますが、保存の問題があります。その解決策として超分子複合体形成を利用した薬剤分子の安定化が期待されています。安定化を高めるには、特にホスト分子のどの部分がゲスト分子との相互作用に寄与しているかを明確にすることで、ホスト分子やゲスト分子の改良ができます。



◆研究例◆

タンパク質-小分子(薬剤分子)複合体の相互作用評価

タンパク質において、水素結合、CH/π 相互作用、π-π 相互作用などの非共有結合相互作用は、その立体構造の安定化や特異的な分子認識に深く関わっています。とくにタンパク質を構成するアミノ酸が強く小分子と相互作用するかを理解できると、小分子の再設計やアミノ酸の変異により、薬剤としての効果やタンパク質の機能強化につなげることができます。



想定される用途・応用例

- ◆食品保存のための包接材設計（シクロデキストリンなどの相互作用解析）。
- ◆医薬品の設計・最適化（ターゲット部位との相互作用評価）
- ◆標的酵素や受容体に対する農薬候補分子との相互作用評価

セールスポイント

分子内/分子間相互作用をアミノ酸や構成要素レベルで定量評価可能

複雑な分子系（例：タンパク質、超分子）にも実用的に適用可能

製薬、化粧品、機能性材料、食品、農薬など、複数の産業分野での分子設計・材料設計・薬剤設計への応用が可能

問い合わせ先：広島市立大学 地域共創センター

TEL:082-830-1764 FAX:082-830-1555

E-mail:ken-san@m.hiroshima-cu.ac.jp

〒731-3194

広島市安佐南区大塚東三丁目4番1号

(情報科学部棟別館1F)