

分子の“効く場所”を見える化する

食品・医薬品開発支援

情報科学部
医用情報科学科

教授 鷹野 優 TAKANO, Yu

教員情報



キーワード

分子設計、相互作用の見える化、計算化学、食品保存、香気保持、医薬品開発

研究シーズの概要

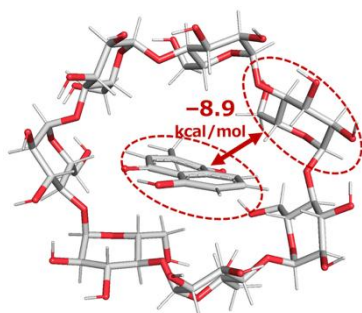
食品、香料、医薬品などでは、「なぜ安定するのか」「どこを変えれば性能が上がるのか」が分からないことがあります。本研究では、分子同士の結びつきやすさを計算化学により解析し、相互作用している部位を見える化します。全体の安定性だけでなく、分子のどの部分が効いているかを部位ごとに評価できる点が特徴です。試作前の候補絞り込み、実験結果の解釈、製品改良の仮説づくりに向けた技術相談・共同研究が可能です。

研究シーズの詳細

◆研究例◆

包接材(ホスト分子)の構成要素と食品・香料などの機能性成分との相互作用の見える化

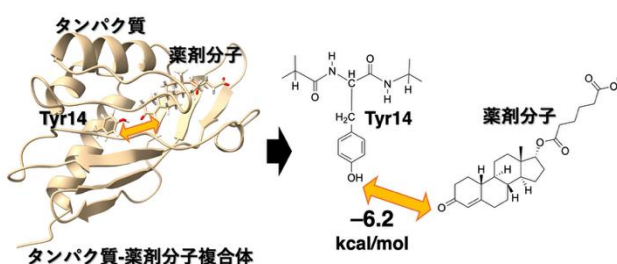
食品や香料では、香りが失われやすい、機能性成分を安定に保ちたい、といった課題があります。本研究では、シクロデキストリンなどの包接材と香気成分・機能性成分との相互作用を解析し、どの部分が安定化に寄与しているかを調べます。たとえば、香りの保持、保存性向上、包接材や添加剤の候補選定などに向けて、分子レベルの改良仮説を提示できます。



◆研究例◆

タンパク質-小分子(薬剤分子)複合体の相互作用の見える化

医薬品分野では、候補分子が標的タンパク質のどこに、どのように結合しているかを理解することが重要です。本研究では、タンパク質と小分子の相互作用を解析し、どのアミノ酸や官能基が結合に寄与しているかを評価します。薬効を直接断定するものではありませんが、候補分子の比較、結合部位の理解、構造改変の方向性、バイオ分子の安定化に向けた仮説づくりを支援できます。



応用例・セールスポイント

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

- ◆実験の前段階で、候補分子や添加剤を絞り込む手がかりを得られます
- ◆全体の安定性だけでなく、どの部位が効いているかを見える化できます
- ◆候補分子 3～5 個の比較など、小規模な予備解析から相談可能です

【問い合わせ先】 広島市立大学 地域共創センター 〒731-3194 広島市安佐南区大塚東 3-4-1 (情報科学部棟別館 1F)

TEL:082-830-1764 / FAX:082-830-1555 / E-mail:ken-san@m.hiroshima-cu.ac.jp