

課題名 (タイトル) :

Gaussian09 による植物代謝産物群の UV 吸収スペクトルおよび双極子モーメントの計算

利用者氏名 : ○草野 都*, 福島 敦史**

理研での所属研究室名 :

* 横浜研究所 植物科学研究センター メタボローム研究推進部門 メタボローム機能研究グループ

**横浜研究所 植物科学研究センター メタボローム研究推進部門 メタボローム情報ユニット

報告内容

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々は植物が生産する代謝物群について、それぞれの代謝物が有する物理化学的性質を元にその多様性を調査している。現在入手可能な物理化学的性質は、分子量や溶解度といったものが中心であり、分子内に極性を持つタイプの化合物の評価には使用できるが、中性物質には不向きである。また、植物は生体防御を行う際に芳香環を持つ代謝物を生産する。これらの物質を表す指標として、UV 吸収スペクトルは最適である。また、双極子モーメントは各化合物の溶解度の情報に加え、さらに詳細な極性情報を与える。以上のことから、Gaussian09 を用い、植物に含まれる代謝物群の UV 吸収スペクトルおよび双極子モーメントの計算を実行することを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

我々が標的としている二次代謝物群 (フラボノイド類) の IR、ラマンスペクトル、NMR 化学シフト、UV・可視スペクトル等の分子プロパティ予測を行った。

3. 結果

数個のフラボノイドを例にとり、HF/6-31G(d) 構造最適化計算の後、GCISD/6-31G(d) モデルを用いた一点計算を実行した。

4. まとめ

今回の結果から、これまで我々が収集・利用可能な化合物の構造情報から実際に Gaussian09 を用いて UV 吸収スペクトルを計算可能であることが分かった。

5. 今後の計画・展望

Gaussian09 を用いた計算は今回が初の試みであり、まだ手探りで使用しているのが現状である。

また、文献等で調査した構造情報および UV 吸収スペクトルの実測値との比較により、Gaussian 09 を用いて計算した結果を評価する予定である。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

「今後の計画・展望」項目でも触れたが、Gaussian09 を利用した量子化学計算に関する知識が不足しているため、Gaussian09 を十分に使いこなせていないと感じている。この部分を補うため、数例でもかまわないので、和光でデモを行ってもらい、それを通じて理解を深めたい。