

課題名 (タイトル) :

糖鎖コンホメーションと NMR 結合定数の計算

利用者氏名 : 加藤 麻理依

所属 : 和光研究所 基幹研究所 袖岡有機合成化学研究室

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  
当研究室では、代謝安定型糖鎖の開発を検討してきた。現在、NMR によるコンホメーション解析に取り組んでいるが、コンホメーション分布の決定に必要な NMR 結合定数の基準値が、存在しない状態である。そこで、Gaussian での計算によって、基準値を見積もることを目的とする。
2. 具体的な利用内容、計算方法  
Gaussian 09 を利用し、構造最適化した各種糖鎖アナログの NMR 計算を実行した。密度汎関数法を (DFT、MPW1PW91) 用い、基底関数は 6-311+G(d,p) に統一した。
3. 結果  
当初は基底関数依存性や、構造の単純化などへの影響を調べた。また計算時間の制限の問題があったが、原子指定をして 6-311+G(d,p) 系、8 スレッド使用すれば、複雑な糖鎖構造の NMR の計算も 1 日で終了できることがわかった。本手法で S-CHF 体の 9 種のコンホメーションに対する NMR 計算を実行し、概ねリーズナブルな結果を得ることが出来た。現在、R-CHF 体の NMR 計算に取り組んでいる最中である。
4. まとめ  
DFT 計算による NMR 結合定数の算出が、非常に効果的であることがわかった。現在、本データの解釈と利用法について、考察中である。
5. 今後の計画・展望  
この研究は、研究室同僚に引き継がれる予定である。