

課題名 (タイトル) :

## Anthocyanidin の生合成経路の探索

利用者氏名 : ○佐藤 玄

所属 : 先進機能元素化学研究チーム

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

Anthocyanidin は、Dihydroflavonol より酵素による酸化、還元反応を経て生合成されることが知られている。しかし、酸化・還元過程を経ない分子内異性化反応のみでの Anthocyanidin 生合成経路も以前より提唱されている。本研究では、計算化学により、これら二つの生合成経路のどちらがエネルギー的に有利かについて計算を行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian09 を利用し、各生合成経路の生合成中間体に対して、構造最適化及び軌道関数の計算を行った。計算法は主に密度汎関数法を用い、基底関数は 6-31G(d)を用いた。

3. 結果

DFT 計算により、各生合成経路の生合成中間体である Dihydroflavonol、3-Flaven-3,4-diol、3-Oxo-flavan-4-ol、Leucoanthocyanidin、2-Flaven-3,4-diol、3-Flaven-2,3-diol、Anthocyanidin など、単離報告例のない反応中間体も含め、各反応中間体の詳細な情報を得ることができた。しかし、各反応における遷移状態については、まだ計算を行っている段階である。

4. まとめ

本研究の分子内異性化反応において計算化学を利用することにより、単離されていない生合成中間体について詳細な情報を得ることが出来た。

5. 今後の計画・展望

2つの生合成経路の各反応における遷移状態の計算に取り組みたいと考えている。