

課題名 (タイトル) :

有機化合物のコンホメーション、エネルギー解析

利用者氏名 : ○平井 剛

所属 : 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

我々は、天然有機化合物を元に新たな分子を設計・合成し、その生物活性を調べることを研究している。有機化合物は、しばしば柔軟な構造を持つため、どの形の構造 (コンホメーション) がどのようなエネルギー状態にあるのかを知るには、計算化学的手法が必要となる。本年度は、フッ素原子を含む糖鎖アナログ (分子量 500 程度) のコンホメーション解析と予想される NMR 結合定数の算出、さらに新規天然有機化合物 (分子量 500 程度) のコンホメーション解析と予想される NMR 結合定数の算出と CD スペクトルの予測を検討した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を利用し、各種有機化合物の構造最適化計算を実行した。計算法は主に HF 法、もしくは密度汎関数法を用い、基底関数は主に 6-31+G(d)もしくは 6-311+G(d,p)を用いた。また、NMR 結合定数の算出は、MPW1PW91 を汎関数に用いた。CD スペクトルの予測は、TDDFT 法を用いた。

3. 結果

糖鎖アナログに関しては、複数の初期構造を当研究室で保有している Spartan'10 で構築して、種々検討したが、1つの立体異性体の最適構造から算出される NMR 結合定数と実測値に良い一致が見られなかった。構造最適化プロトコルを見直す必要がある。

新規天然有機化合物に関しては、NOE 情報をもとに Spartan'10 で構築した初期構造から最適化したコンホメーションにおいて、NMR 結合定数、CD スペクトルともに実験値と良い一致が見られた。

4. まとめ

計算化学的に有機化合物のコンホメーションを

見積もることが、当研究室の研究活動に大いに役立っている。

5. 今後の計画・展望

今後は、糖鎖アナログの構造最適化プロトコルを見なおし、より広範な化合物の計算に適用したいと考えている。