

課題名 (タイトル) :

## 計算化学手法を用いた気相有機イオン構造モデルの評価

利用者氏名 : ○中村 健道

所属 : グローバル研究クラスタ連携支援ユニット (物質構造解析)

<p>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</p> <p>有機分子由来気相イオン, 特に ESI 法で生成するプロトン付加もしくはカチオン付加分子と, MS/MS 法により生成するフラグメントイオンの構造をモデル化し, モデル構造, 推定遷移状態, フラグメンテーション反応経路・機構と実測質量スペクトルパターンの比較評価を行う. 我々が開発中の閾値エネルギー分解 IMS/MS/MS 法を用いて観測可能な気相イオンの衝突断面積見積りとイオン移動度分析データの関連付けによるモデルの検証を組み合わせ, 異性体識別を含む有機化合物の確実な同定を可能とするための方法論を確立し, メタボロミクス等, 有機化合物の微量迅速同定を必要とする生命科学分野の研究に資することを旨とする. 応用分野でしばしば興味の対象となる中程度の大きさの有機分子 (分子量数百から千程度) の大きさの有機分子を扱うため, スーパーコンピュータの利用による計算の高速化が必要である.</p> <p>2. 今後の計画・展望</p> <p>Gaussian 等の計算化学プログラムを用いて候補構造モデルの最適化を行い, 気相単分子解離反応の経路ならびに遷移状態と MS/MS スペクトルパターンの関連付けを試みる.</p> <p>3. 利用がなかった場合の理由</p> <p>本研究においては, 第 1 段階で化合物の構造ならびに MS/MS スペクトルパターンの解析に基づき候補となるイオン構造のモデルを複数生成し, それらの構造最適化と推定遷移状態の高次評価にスーパーコンピュータの利用を予定している. まず, 閾値エネルギー分解 IMS/MS/MS 法において非常に興味深い開裂挙動を示す一群の中員環化合物を対称として, 解析ワークフローの確立ならびに反応経路・機構の解析を目指したが, 系の自由度が比較的高いため, 当初想定していたより</p>	<p>かなり多くの候補構造モデルを検討する必要があることが判明した. このため, 現時点においてはまだスーパーコンピュータを利用しての高次評価に進むには至っていない. 今後, 現在実施中の中員環化合物の解析に並行して, より自由度の低いモデル系についても解析対象に加えていく予定である.</p>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------