

課題名 (タイトル) : 生物活性分子のコンホメーション解析

利用者氏名 : ○平井 剛

理研での所属研究室名 : 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、天然有機化合物を基にして、新しい生物活性分子を創製することに取り組んでいる。本課題では、柔軟な構造を持つ有機化合物の構造 (コンホメーション) と、そのエネルギー状態を計算化学的手法によって見積もることを目的としている。本年度は、昨年度に天然物の軸不斉の有無に関するエネルギー計算を検討した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を利用し、各化合物の構造最適化を実行した。計算法は密度汎関数法を用い、基底関数は 6-31+G(d) もしくは 6-311+G(d,p) を用いた。

3. 結果

天然物スペクトマイシン A1、A2 の合成の際に開発した環化反応の遷移状態計算では、目的物を与える遷移状態のみ、最適化に成功した。

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

他の生成物を与える遷移状態の最適化を継続し、そのエネルギー差を比較したい。