

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

理研における所属研究室名: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、天然物の絶対配置決定に関する予備検討を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 16 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

初期構造が妥当ではなく、思うような結果を得ることはできなかった。

4. まとめ

今年度は、しっかりした成果はないが、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は、我々の研究活動に大いに役立っている。

5. 今後の計画・展望

ガングリオンド系分子のコンホメーション解析を再検討する。