

課題名 (タイトル) :

Gaussian09 による植物代謝産物群の UV 吸収スペクトルおよび双極子モーメントの計算

利用者氏名 : ○草野 都, 福島 敦史*

所属 : 横浜研究所 植物科学研究センター メタボローム研究推進部門 メタボローム機能研究グループ

*横浜研究所 植物科学研究センター メタボローム研究推進部門 メタボローム情報チーム

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

申請者らは植物が生産する代謝物群について、それぞれの代謝物が有する物理化学的性質を元にその多様性を調査している。現在入手可能な物理化学的性質は、分子量や溶解度といったものが中心であり、分子内に極性を持つタイプの化合物の評価には使用できるが、中性物質には不向きである。また、植物は生体防御を行う際に芳香環を持つ代謝物を生産する。これらの物質を表す指標として、UV 吸収スペクトルや IR スペクトルの利用価値は高い。また、双極子モーメントは各化合物の溶解度の情報に加え、さらに詳細な極性情報を与える。以上のことから、Gaussian09 を用い、植物に含まれる代謝物群の UV・IR 吸収スペクトルおよび双極子モーメントの計算を実行することを目的として本研究を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

我々が標的としている二次代謝物群 (フラボノイド類) の IR、ラマンスペクトル、NMR 化学シフト、UV・可視スペクトル等の分子プロパティ予測を行った。

3. 結果

数個のフラボノイドを例にとり、HF/6-31G(d)構造最適化計算の後、GCISD/6-31G(d)モデルを用いた一点計算を実行した。しかしながら、専門的知識の不足のため、最適化構造が正しく最適化されているかどうかを評価する術がないことが分かった。さらに現在 mol ファイルで保存している構造情報が、結合長などが考慮されておらず、詳細な構造情報を全て ChemDraw などの化学構造描画プログラムで全て書きなおす必要があることが判明した。

4. まとめ

3 にあげた理由から、Gaussian09 による最適化計算を一旦中断し、文献データの収集および MOPAC 等の簡易プログラムの利用による結果の評価を行うことにした。

5. 今後の計画・展望

分子軌道計算法については、分子軌道のエネルギー遷移を完全に理解するだけでなく、分子軌道計算プログラムを実際に使用し、多くの経験を積んだ後で、Gaussian09 を使用すべきと痛感した。今後は、分子軌道計算法を専門に研究を進めている研究者と共同研究を行うことにより、我々が得た結果がどの程度実測値と整合性があるのかを評価したいと考えている。