

超球面探索法を用いたポリフェノールアニオンの 解離反応経路の自動探索

(¹東北大院理, ²東北大理) ○岸本直樹¹, 和泉廣樹²

【序】フレンチパラドックスとして知られているように、赤ワイン中のポリフェノールを摂取することで体内の抗酸化作用を高めることが出来る。最近、解離性電子付着質量分析実験によって、ポリフェノールの一種である3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンの陰イオン（アニオン）から水素原子2個を解離させるのに要する入射電子エネルギーが決定され、非常に低いことが分かった[1]。我々は、これまでに反応経路自動探索法を用いてジクロロエチレン分子のカチオンならびにアニオンの解離過程を計算し、解離に繋がる遷移状態を超えるのに必要なエネルギーを実験と比較した[2]。本研究では、同様の方法を用いて3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンアニオンの解離反応経路を探索したので、その結果について発表する。

【計算方法】中性の3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンのエネルギーを基準として、B3LYP/6-311G(2d,d,p)法でGRRMプログラム[3]を用いて3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンアニオンの解離反応経路を探索した。

【結果・考察】3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンアニオンから水素原子2個が解離して水素分子を生成するケースについて調べた。最もエネルギー的に安定と考えられるキノン型アニオンと水素分子を生成すると仮定して解離経路を計算したところ

(図1)、中性から1.5 eV以上高い遷移状態を超える必要があることが分かった。これは、水酸基から水素原子を解離するのに要するエネルギーが大きいため、実験[1]で観測された入射電子エネルギーの値(0-0.6 eV)よりも1 eV近く大きな値になってしまった。次に、分子の中心にあるエチレン基のねじれに着目したところ、

中性よりも安定なシス体のアニオンの平衡構造を見つけることが出来た。現在、この平衡構造の異性化から水素の解離経路を得ようと自動探索を続けている。

【参考文献】

- [1] S.A. Pshenichnyuk and A.S. Komolov, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 1104 (2015).
 [2] N. Kishimoto and Y. Nishi, *Chem. Phys. Lett.* **674**, 77 (2017).
 [3] S. Maeda, Y. Osada, K. Morokuma, and K. Ohno, *GRRM ver. 11*, 2011.

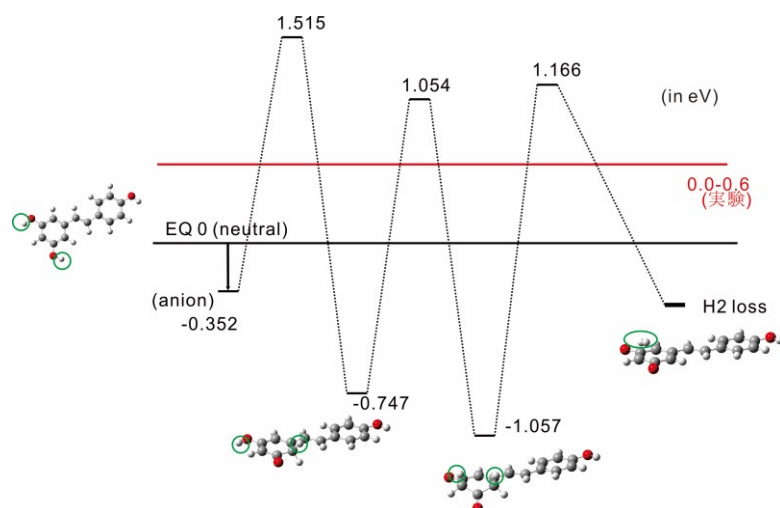


図1. 3,5,4'-トリヒドロキシ-trans-スチルベンアニオンから水素分子が解離する反応経路