

超球面探索法を用いた離散原子指定法によるアラニンとその二量体の立体配座探索

和歌山大学院システム工 ○向井 徳、山門 英雄

[研究背景] GRRM を用いた構造探索の手法として、PDrCA(Picking up Discrete reaction Center Atoms/離散原子指定)法が近年提案された[1]。PDrCA 法は、GRRM において登り探索対象として扱う原子を"飛び飛び"に選ぶことによって計算を軽くすることを目指す手法である。この PDrCA 法は、箕土路らによって、グリシンに適用した場合には複数の EQ 点・TS 点が見つかることが報告されている[1]。本研究では、この PDrCA 法をさらに大きい系であるアラニンやその二量体等について適用し、計算の妥当性を確認することが目的である。

[計算方法] PDrCA 法は、GRRM17 プログラム[2]内の、 μ -ADDF 法[3]を利用して行った。構造最適化の計算手法/計算レベルは B3LYP/6-31G で行い、PDrCA 法を用いた探索も同様の B3LYP/6-31G で行った。オプションはどちらも GauProc = 4 のみを付けた。

また、変数として扱う原子は分子内で隣接せず、分子全体に広く分布するように選択した。アラニンの際は原子を三個選択し、アラニンの二量体の際は四個を選択し、それぞれ 2 パターン計算し比較検討した。

[結果と考察] 立体配座異性体について、アラニンについての結果を図 1 に、アラニンジペプチドについての結果を図 2 に示す>(*印付きが登り探索対象とした原子) 図 1 では、a)の場合で EQ 点が 3 個、b)の場合で 10 個みつき、図 2 では、a)の場合で EQ 点が 2 個、b)の場合で 9 個見つかった。図 1・図 2 とともに a)のような分子の最外でない内側にある隣接しない原子選択をした計算については、解離構造も EQ 点として現れた。

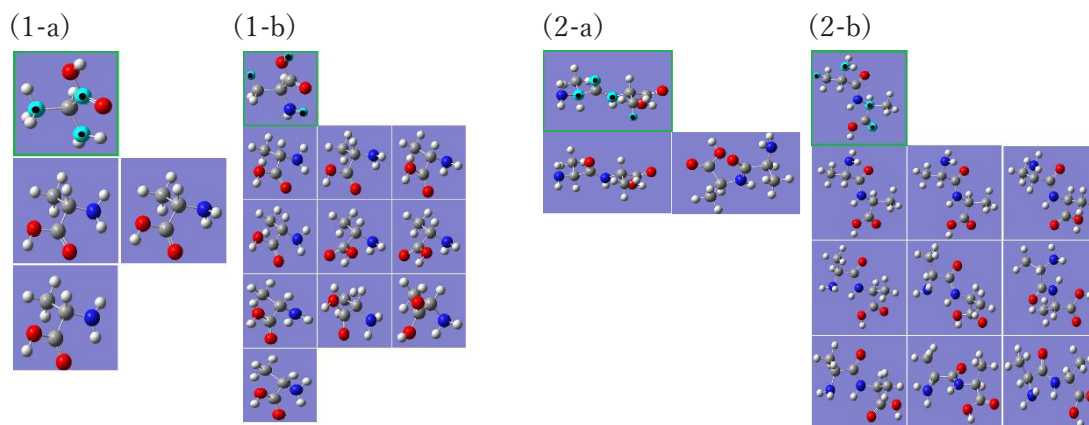


図 1 a) C,C,N 指定 b) H,H,H 指定 図 2 a) C,O,N,H 指定 b) H,N,C,O 指定

[引用文献]

[1] Y. Midoro, Y. Kodaya, T. Oki, A. Mukai, H. Yamakado, K. Ohno, *Chem. Lett.* 2020, 49, 826-827.

[2] a) S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Sumiya, M. Takagi, K. Suzuki, M. Hatanaka, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, GRRM17, see http://iqce.jp/GRRM/index_e.shtml (accessed date 3 March, 2020). b) S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2013, 15, 3683.

[3] S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, *J. Chem. Theory Comput.* 2009, 5, 2734.