

29-0061

パーコレーションクラスターを応用した環構造化合物の動的構造の解析

○後藤 了¹, 小松 和志², 永澤 秀子³, 藤田 智也³, 中山 真一³, 堀 均³, 寺田 弘⁴
(¹徳島大薬,²高知大理,³徳島大工,⁴東京理大薬)

【目的】コンフォメーションのクラスター分析を行うとき、相違性の指標として直交座標の rmsd 値や内部座標の二面角 τ_i を用いると、サンプリングに対して得られるクラスターが不安定である。これは、コンフォメーション探索空間としての直交座標や二面角が互いに独立なパラメータではないにも関わらず、より高い次元での相違性指標を用いていることに起因する。そこで、コンフォメーションの網羅的探索の配置空間について解析する。

【方法】AMBER 力場を用い網羅的コンフォメーション探索計算した。それぞれの重原子の二面角 τ_i につき分散・共分散行列を求め、固有値計算から分散が最大になる主成分パラメータを算出（主成分分析）した。得られた独立な主成分につき 3 次元プロット 3 面図を利用して高次元空間の解析を行った。

【結果および考察】脂環式アルカン類の、5~14 員環について解析を行った。得られたコンフォメーションの τ_i は隣接ボンド間において相関係数 r が-1 に近く、他は 0 に近い傾向が見られた。隣接ボンド間の相関係数 r は環のメンバー数が大きくなるに従い小さくなり、12 ないし 13 員環において 0 に近づいた。これらの τ_i に付き主成分分析を行ったところ、それぞれ特徴ある図形に沿ってコンフォメーションが分布した。環に二重結合や縮合環がある場合を解析すると二重結合や縮合環によって自由度が失われるため、シクロヘキセンはシクロペンタン、シクロヘプテンはシクロヘキサンと同様の分布となることが確認された。脂環式アルカン類の炭素鎖を結合長、一定、結合角一定の 3 次元多角形と捉えると、その配置空間の多様体のトポロジーとして、5, 6, 7 員環それぞれ S^1 , S^2 , T^2 のモデルが得られ、構造解析に対して汎用性の高い配置空間を構成することができた。