

# 29amB-144

分子軌道法によるカプサイシン (capsaicin) の最安定構造と配座異性体の検討

○田村 陽介<sup>1</sup>, 田中 薫<sup>2</sup>(<sup>1</sup>杏林大院保健, <sup>2</sup>杏林大保健)

【目的】トウガラシなどに含まれるカプサイシン(capsaicin : CAP)の抗酸化機構を解明する研究の一環として、計算化学を用いて気相中における CAP の最安定構造と配座異性体の存在比率の検討を行った。

【方法】分子動力学法の MMFF94S 力場で探索した配座異性体約 1 万個からエネルギーの低い構造を 100 個選び出し、ab initio 法の HF レベル、6-31G(d)基底系で構造最適化を行った。さらに、構造最適化により求めたエネルギー極小構造に対して密度汎関数法(DFT)のB3LYP汎関数および6-31+G(2d,p)基底系を用いてシングルポイントエネルギーを求め、最安定構造と配座異性体の存在比率の検討を行った。

【結果、考察】DFT の計算結果から、CAP の最安定構造の存在比率は 14.5%であることがわかった。また、配座異性体は存在比率の高い 5 つの構造で、全体の 66.8%を占めていることが明らかになった。また、最安定構造から 5 番目の構造と 6 番目の構造の間に 0.9kcal/mol のエネルギー差があることから、CAP は存在比率の高い 5 つの構造が反応に関与する可能性が高い。また、これらの構造は、アミド基部分の回転角がそれぞれ異なっているが、炭化水素部の直線構造やベンゼン部分では構造に大きな違いは見られなかった。



CAP の最安定構造