

29amB-145

アリシン (allicin) の配座異性体の存在比率および安定構造の検討

○田中 薫¹, 田村 陽介²(¹杏林大保健, ²杏林大院保健)

【目的】抗酸化物質における抗酸化プロセスを解明する研究の一環として、ニンニクから多く得られるアリシン($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{S}(\text{O})-\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2$)の配座異性体 (conformer) を複数求め、各々のエネルギー差から最安定構造および配座異性体の存在比、立体構造の検討を行った。

【方法】アリシンについて配座解析を MMFF94S 力場で行い、非経験的分子軌道法 (Hartree-Fock 法) による構造最適化を行った。シングルポイントエネルギーは電子相関を考慮し、DFT 法 (B3LYP 汎関数) に diffuse 関数を加えた 6-311+G(2df,2p) 基底系および結合クラスター理論 (CC 法) で求めた。

【結果と考察】分子力学法による配座解析から得た 88 個のエネルギー極小配座について、B3LYP/6-311+G(2df,2p)//HF/6-31G(d) および CCSD(T) でエネルギーを求め、存在比率と構造を検討した。その結果、最安定構造の存在比率は約 7% であることがわかった。また、存在比の約 6 割のうちに、18 個の配座異性体があったことから、アリシンは目的の反応に寄与する構造をもつ確率が比較的少ない可能性が示唆された。さらに、最安定構造および最安定構造に近いエネルギー値の配座異性体をもつ、共通の構造を特定した。

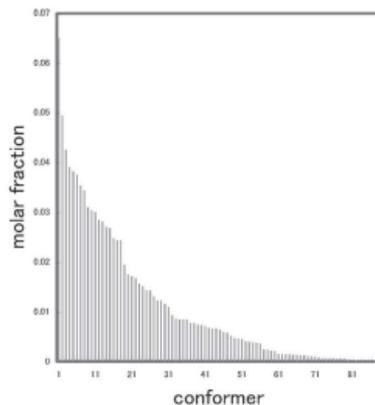


Fig. Populations for conformer