

28K-pm09

分子動力学計算を用いた架橋 β -プロリンオリゴマーの規則構造化の評価
○尾谷 優子¹, 北尾 彰朗², 大和田 智彦¹(¹東大院薬, ²東大分生研)

【目的】近年われわれが合成した二環性の β -アミノ酸のホモオリゴマー (**1**) は、単環性の β -プロリンオリゴマー (**2**) の架橋化体であるが、規則構造の存在を示唆する円二色性 (CD) スペクトルを示し、残基あたりの CD 強度は鎖長依存的に増大した。¹ **1** および **2** は三級アミド結合で連結されており、アミドのシス/トランス異性体混合物となる。本研究では、分子動力学計算による構造サンプリングを行い、規則構造発現の機構について考察することを目的とした。

【方法・結果】分子動力学計算には AMBER/GAFF 力場を用い、メタノールまたは水をあらわな溶媒として含めた。アミド結合のシス-トランス平衡を再現するため、アミド二面角 ω に対するアンブレラポテンシャルの導入により結合回転を起きやすくして構造サンプリングを行った。結果、**2** と比較して **1** では、オリゴマーが長くなるにつれて各アミド結合がトランスアミド体をとる割合が増加することが示唆された。分子動力学計算で得られた構造分布をふまえ、TDDFT 計算による CD スペクトルシミュレーションを行った結果についても報告する。

