

27L-pm01S

特異な分子構造特性を基盤とした創薬のための量子化学計算：カルコゲン相互作用の場合

○黒木 菜保子¹, 谷中 あゆみ¹, 森 寛敏² (¹お茶大院人間文化創成科学, ²お茶大基幹研究 研究院自然科学系)

【目的】 カルコゲン相互作用は、リガンドの立体構造制御に適用可能な非結合性相互作用である。だが、その物理的起源は不明であり、カルコゲン相互作用を利用した創薬の例は限られている。本研究の目的は、量子化学計算を用いて、カルコゲン相互作用の物理的起源を解明することにより、カルコゲン相互作用を利用した新規ドラッグデザインを理論的に支援することである。

【方法】 図 1 に示す四～六員環型分子内カルコゲン相互作用モデル化合物について、矢印で示す単結合周りの回転ポテンシャルを計算し(図 2) カルコゲン相互作用の強度を評価した。自然結合軌道解析および Atoms in Molecules 解析を行い、カルコゲン相互作用の物理的起源を解析した。

【結果と考察】 五員環型構造においてアクセプター(A)が硫黄原子となるときに、分子平面性を保つのに十分な強度のカルコゲン相互作用が生じることが分かった。カルコゲン相互作用の主な起源は静電相互作用であり、加えて電荷移動相互作用の寄与も大きいことが分かった。

【参考文献】 Nagao *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 3104.

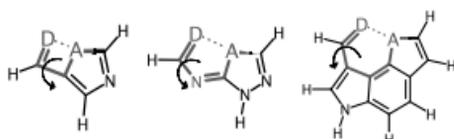


図 1 分子内カルコゲン相互作用のモデル化合物 (D, A = O or S)

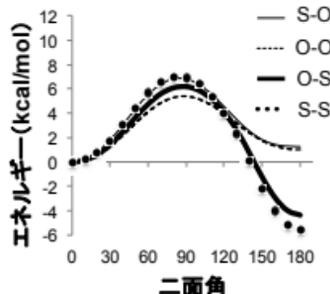


図 2 五員環型モデル化合物の回転ポテンシャル