

分子計算によるアズレン化合物の分子設計と機能探索

直島好伸¹、 沖本史也²、 居原田重樹¹、 亀沢 誠²、 橘 芳純²、
大谷武彦²、 松本正和³

¹岡山理科大学総合情報学部 (〒700-0005 岡山市理大町 1 - 1)

²甲南化工(株) (〒569-0066 大阪府高槻市中川町 5 - 2 1)

³キャノン(株)材料技術研究所 (〒146-8501 東京都大田区下丸子 3 - 3 0 - 2)

【緒言】

最近、我々は、従来から行っている生体触媒を用いた機能性物質の合成研究に、分子モデリングの手法を組み入れている。今回、その分子モデリング研究の一環として、うがい薬アズノールなどの原料に使用されている天然有機化合物アズレンから、機能性に優れた誘導体を分子設計し、合成することを計画、検討した。

【方法と結果】

アントシアニン系化合物は、アントシアニジンの配糖体を主成分とする、熱、光に対して安定な分子である。アントシアニン分子を分子力学、モンテカルロ、および密度汎関数計算で分子モデリングすると、その糖残基がアントシアニン骨格に被さっているような構造が得られた。このことより、アントシアニン分子は、分子中のアントシアニジン環と糖残基とが相互に作用し合い、エネルギー的に安定化しているのではないかと考えた。そこでアズレンの分子設計に際し、先ず、アズレン環の反応部位に糖部分とのスペーサーとしてトリフルオロエタノール基を導入したキラルアズレンアルコールを構築し、また、生体触媒法で実際に合成した。ついで、そのアルコールにアズレン環と相互作用すると思われる糖残基、グルコースとキシロースの二糖類、を結合させた配糖体分子を設計した。引き続いて、その分子に対し、MacroModel による分子力学計算とモンテカルロ計算を行い、さらに、算出されたエネルギー最小構造について量子化学計算を実施した。その結果 (Fig. 1)、アズレン配糖体は、アズレン環に基づく青色の色調はそのままに、糖残基の作用によって水溶性などの機能が向上している可能性が認められた。

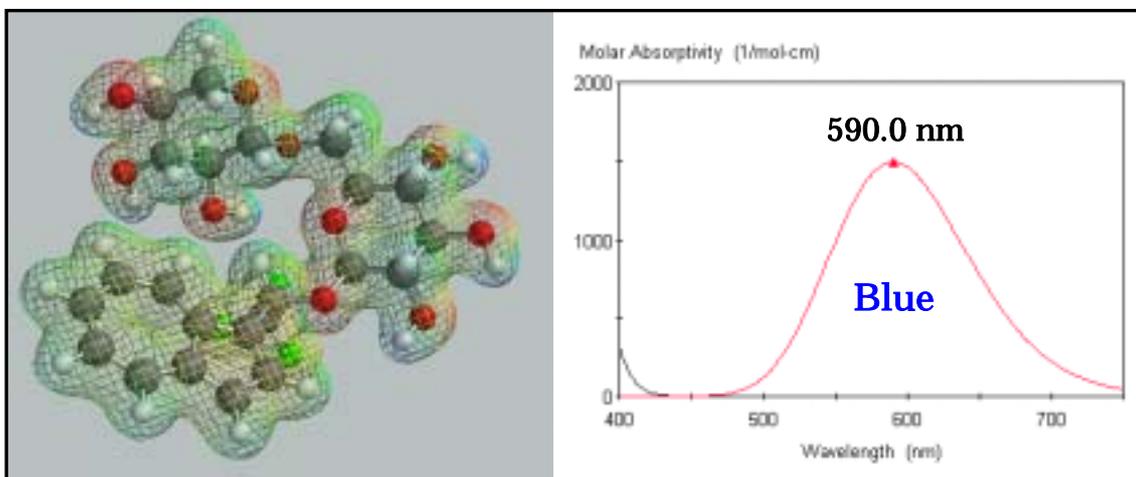


Fig.1 Electrostatic Potential Map and Visible Spectrum of an Azulene Glycoside