

ペプトイド類のフラグメント分子軌道計算-その 2

Fragment molecular orbital (FMO) calculations of peptoids ver.2

立教大理¹, 東大生研², 京大³, 鳥取大⁴ ○川田修太郎¹, 望月祐志^{1,2}

袴田真由¹, 藤田貴敏³, 星健夫⁴

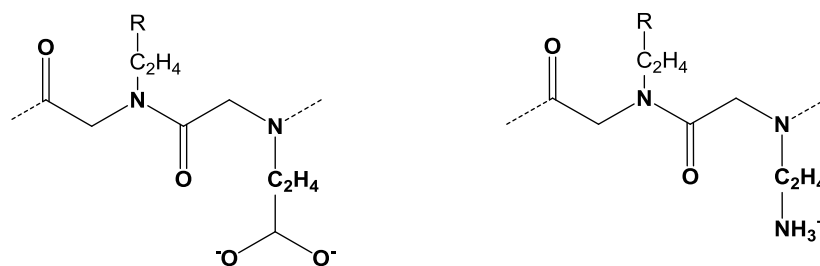
Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², Kyoto Univ.³, Tottori Univ.⁴ °Shutaro Kawada¹, Yuji Mochizuki^{1,2}

Mayu Hakamada¹, Takatoshi Fujita³, Takeo Hoshi⁴

E-mail: kawada@rikkyo.ac.jp

【序】ペプトイドとは、ペプチドで C α 炭素上にある側鎖が N 上にある骨格を持つ人造分子群である[1]。N-H 部分に由来する鎖間や鎖内の水素結合が形成しないことにより、側鎖の選択やモノマー構造の性質が集合体となった際の化学的性質に直截に影響することから、新たな機能性ポリマーを形成する分子素材として注目されている。前回(2016 春季本学会)我々はフラグメント分子軌道(FMO)計算[2]に基づき、水分子を内包する環状オクタペプトイド[3]における相互作用計算結果を報告した。今回は、ペプトイド類の FMO 法による研究の進展を紹介させていただく。

【ペプトイドシートにおける励起子カップリング計算】ペプトイドの機能性の一つとして、一定以上の分子鎖からなるポリマーが自己集合してシート状の構造をとることが知られている[4]。この性質を活かせば、 π π 相互作用を持つ Ph 環部分を「回廊」的に配向させ、Ph 間の励起子カップリングを考えることも可能であろう。励起子カップリングは、固体中で励起状態が非局在化する効果として知られており、計算手法としては電子・正孔が各フラグメントに局在化した状態を基底として、状態間の相互作用を記述する TDFI 法[5]がある。本研究では、この手法を基に藤田が実装した機能を持つローカル版の ABINIT-MP を用いて、CIS レベルで相互作用を評価した。モデル系としては、以下のペプトイド骨格を持つとした(R が Ph ないしパラ位が置換された Ph)。



ポスター発表の当日は、FMO 計算による相互作用解析 IFIE、より詳細な成分解析機能 PIEDA[6]の結果も併せ、カップリング計算と集団励起の状態について報告する予定である。

【2 価イオンを内包するペプトイドの相互作用解析】ペプトイドの機能性の一つとして、金属イオンを内包する系への期待がある。今回は前回報告した水分子を内包する環状オクタペプトイドの構造[3]に対して、水分子を 2 価の金属イオン(Mg²⁺, Ca²⁺など)に置き換えて比較している。また、ウランとの組み合わせ[7]についても検討を進めている。これらの詳細は当日報告したい。

【参考文献】

- [1] J. Sun et al., ACS Nano **7** (2013) 4715. [2] S. Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **16** (2014) 10310. [3] S. B. L. Vollrath, et al., Chem. Comm. **49** (2013) 2317. [4] R. V. Mannige et al., Nature **526** (2015) 415. [5] K.J. Fujimoto, J. Chem. Phys. **137** (2012) 034101, [6] 塚本ら, J. Comp. Chem. Jpn. **14** (2015) 1. [7] B. F. Parker et al., Ind. Eng. Chem. **55** (2016) 4187.