

研究課題 (テーマ)	コンピュータ化学の利用による生物活性物質ペラトリジンの効率的 全合成		
研究者	所属学科等	職	氏名
代表者	生物工学科	助教	深谷圭介
研究結果の概要			
<p>近年の情報処理技術の急速な発展に伴い、様々な研究分野においてコンピュータ技術が盛んに取り入れられている。一方で、有機合成化学、特に複雑分子の合成に関する分野ではその利用が立ち遅れている。本研究では計算化学を合成経路の設計段階に取り入れ、複雑な分子構造を有する生物活性物質ペラトリジンの効率的な化学合成を行う。通常、化合物を化学合成する際には、合成化学者はまず過去の文献や自身の経験に基づき、最も妥当な合成経路を設計することになる。しかし、複雑な合成中間体の反応性を合成化学者の知識と経験だけで予測することはしばしば困難であり、合成計画のねり直し等が効率的な全合成を妨げている。そこで計算化学を用いて、化学実験の前に鍵となる各反応について妥当性を評価し、その結果に基づき合成経路や基質設計を行う。昨年度の研究成果としては、これまで計算化学が十分に適用されてこなかった複雑分子に対して、その反応性の評価法を確立した。また、計画したペラトリジンの合成経路を計算化学により解析し、反応が実現可能であることを示唆する結果を得た。</p>			
今後の展開			
<p>確立した反応性評価法は様々な複雑分子の反応に適用できる可能性を有しており、今後は生物活性天然物の合成研究に広く利用していく。</p>			