

医薬品候補化合物の副作用発症確率を予測する数理モデルの創成と理論化学計算

¹大阪大学薬学部 ²大阪大学大学院薬学研究科

³大阪大学微生物病研究所附属遺伝情報実験センター ⁴大阪大学大学院情報科学研究科

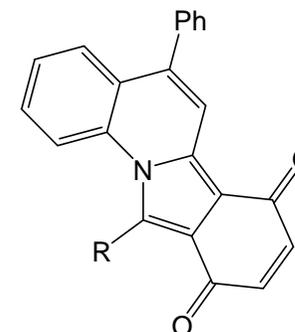
諏訪 志典¹, 川嶋 裕介², 川下 理日人^{2,3}, 田 雨時⁴, 高木 達也^{2,3}

目的

分子軌道計算により電子遷移に伴う光スペクトルの波長予測にあたり対象とする系により適切な計算レベルは異なる。このための右のような骨格を持つヘテロ環化合物について最も再現性の良い計算レベルについて検討を行う。

内容

右の構造式を持つ化合物のうちRが水素、エチルエステルなどの二つの化合物に対し、複数の基底関数を用いたDFT及びTDDFT計算による振動解析的な電子スペクトルシミュレーションを行い、基底関数の予測結果への影響を調査した。

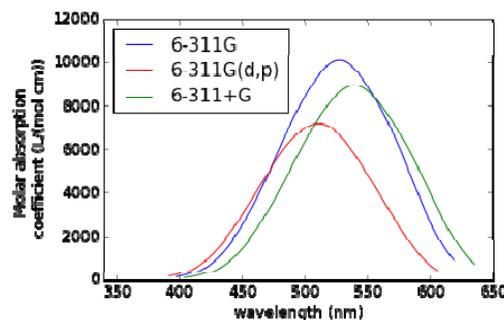


結果

前半の内容については、ローカルのマシンにより研究を進めることとなり、本計算機を利用しなかった。

後半の内容について、二つの化合物に共通した結果に基底関数に分散関数を用いることで状態間のエネルギー差を小さく評価し、吸光極大波長及び蛍光波長ともに過大評価することが判明した。また分散関数を導入することで蛍光極大波長の予測に大きな影響は見られなかったが、吸光極大波長の実験値との差が小さくすることが可能であったことから、電子分布の広がりより電荷の偏りを詳細に記述したほうが良いことが確認された。

利用した計算機	VCC
ノード時間	3500時間
使用メモリ	12GB
並列化	16並列



異なる基底関数により予測された吸収波長

Basis Sets	$\lambda_{\text{abs}}(\text{R}=\text{H})$	$\lambda_{\text{abs}}(\text{R}=\text{CO}_2\text{Et})$
6-31G	528.2	542.8
6-31G(d)	515.2	524.9
6-31G(2d)	512.5	523.2
6-31G(d,p)	514.3	525.4
6-31+G	545.0	556.4
6-31+G(d)	534.3	546.4
6-311G	527.8	545.2
6-311G(d)	510.6	527.4
6-311G(d,p)	511.5	526.5
6-311+G	539.8	554.5
Exp.	466	463