

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		理論化学と化学情報学の連携による化学反応の予測と設計			
研究テーマ (欧文) AZ		Theoretical and Chemoinformatics Approach to Chemical Reaction Prediction			
研究氏 代表名 者	カタカナ CC	姓) サトウ	名) ヒロコ	研究期間 B	2011 ~ 2013 年
	漢字 CB	佐藤	寛子	報告年度 YR	2013 年
	ローマ字 CZ	Satoh	Hiroko	研究機関名	国立情報学研究所
研究代表者 CD 所属機関・職名		佐藤寛子 国立情報学研究所・准教授			
概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)					
<p>化学反応予測と設計のための方法論の開発と応用を目的として研究を行った。具体的には、理論化学と化学情報学の連携により、現実的な時間と精度で予測・設計を行うことを可能とする方法論の開発と、糖鎖合成の最も重要な鍵反応であるグリコシル化反応についての種々の未解決問題への応用を目的とした。理論化学計算から得られる高精度な化学情報を利用することで、従来の文献ベースの化学情報論の限界を超えて、新規反応を含む予測と設計を高精度に行うことを目指す点に特色がある。</p> <p>応用対象として、グリコシル化反応の溶媒効果の発現要因と、グリコシド結合の異性化反応の反応機構の解明を設定し、理論化学計算としては、量子化学計算と古典的/第一原理分子動力学計算を用いた。溶媒効果については、本助成前に研究代表者らが提唱した新仮説の理論的裏付けを行うために、複数の系についての量子化学計算データを蓄積し、これらを化学情報学的に解析し、溶媒効果が発現する要因の詳細に踏み込むことができた。助成期間終了後も継続して研究を行い、投稿論文へとまとめている段階である。グリコシド結合の異性化反応については、第一原理分子動力学計算により、動的な反応機構を明らかとしつつある。また、本助成前に、研究代表者らは理論化学計算と化学情報学の連携により異性化反応の反応性(遷移状態エネルギー)を予測するモデルの構築に成功しているが、これを発展させ、グリコシド結合の異性化反応の置換基効果についても理論的な解釈を与えることに成功した(論文投稿中)。</p> <p>一方、理論化学計算結果を分子設計や反応予測に有効に活用するための方法論として、量子化学計算結果のリポジトリ化と蓄積された大量データを化学情報学的に活用するためのシステムの開発を行った。量子化学計算結果をデータベース化し、表示するシステムのプロトタイプを開発した。</p>					
キーワード FA	理論化学計算	化学情報学	化学反応予測	データベース	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Significant Substituent Effect on Anomerization of Pyranosides: Mechanism of Anomerization and Synthesis of 1,2- <i>cis</i> Glucosamine Oligomer from 1,2- <i>trans</i>							
	著者名 ^{GA}	S. Manabe, H. Satoh, J. Hutter, H.P. Luethi, T. Laino, Y. Ito	雑誌名 ^{GC}	Chemistry - A European Journal (accepted)					
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

The goal of this project is to develop methodologies for molecular design and chemical reaction prediction by using a large number of data of chemical theoretical computations combining with chemoinformatics analytical approaches. Applications of this scheme to organic chemical reactions are also our targets. We attempt to solve several open questions about glycosylation reactions, which are the most important reactions to produce oligosaccharides. A combination of high-precision computations with statistical analyses of chemoinformatics approaches is expected to help chemists predict and design molecules and chemical reactions more efficiently.

We performed quantum mechanical (QM) calculations and classical/ab initio molecular dynamics (MD) simulations to solve open questions about a solvent effect in glycosylation reactions and anomerization reactions for glycosidic bonds. Chemoinformatics approaches are used to analyze the computational results as well as experimental data. Further investigations with multiple QM calculations and MD simulations on the mechanistic details for a solvent effect in glycosylation reactions makes strengthen the alternative hypothesis that we proposed before based on the results from classical MD simulations. We are preparing a manuscript to submit the results to a major journal of chemistry. By using advanced ab initio MD technologies, we obtained new findings about a dynamical reaction mechanism of the anomerization reactions for glycosidic bonds. We also extended a prediction model for the reactivity (transition state energy) for the series of anomerization reactions and led to a theoretical interpretation on substituent effects to the reactivity for the anomerization reactions and the results were just submitted to a chemical journal).

Furthermore, we developed a computer system for accumulating the results of theoretical calculations and using the large number of computational data for molecular design and chemical reaction prediction by combining with chemoinformatics analytical approaches. We developed a prototype system, which includes a database of QM data and functions to visualize the database contents.