

(19) 光学活性アミノ酸錯体の分子軌道計算

研究代表者 工学部 長岡 勉

研究目的

アミノ酸には立体化学の異なる2つの光学異性体(D体およびL体：鏡像体)が存在する。この光学異性体において分子を構成する元素の種類や数は同じであるが、その立体配置が異なる。したがって、光学異性体は物理的性質(溶解度など)においては同じであるが、化学的には異なる働きをすることがある。最も顕著な例はアミノ酸の生体内での働きである。ほとんどの生物体内においてはL体のみが有用であり、たとえば、私たちの舌はL-グルタミン酸をうまみ成分として感じるが、D-体には苦味しか感じない。したがって食品や医薬品など、生体関連物質としてアミノ酸を用いる場合、L体だけが必要となる。また、L体のアミノ酸であっても、発酵などの生物活動によりD体が生成してくる場合もある。このため、効率のよい分離法、そしてその分析法が必要となるが、連続的で効率のよい方法はないのが現状である。我々は、これらの問題を解決するために、立体選択制を持つアミノ酸を電導性ポリマー内に組み込み、センサーや分離剤としての応用を考えてきた。

したがって、ここで利用するアミノ酸-銅錯体の立体化学を分子論的にモデル化できれば、さらに高効率な分離分析法の開発が可能になるとと思われる。

研究成果

アミノ酸は重金属(たとえば銅)と錯化合物を形成するので、これをアミノ酸の立体化学認識およびその分離に利用することができる。光学異性体の選択的分離・分析を行う上で、この錯体の構造を知る

ことは非常に重要である。Fig. 1に用いたキラル(光学活性)選択因子と銅イオンおよび目的アミノ酸からなる3元錯体のモデルを示す。キラル選択因子の構造はPM3法で決定した。この結果よりこの錯体はL-体のアミノ酸で生成しやすく、D-体では立体障害のため生成しにくいことが分かった。

これらの結果に基づき、アミノ酸の光学異性体の分離を実際に行った。各種キラル選択因子を電導性ポリマーの中に組み込みこのポリマーを分離カラムやコロイドとして用いた。また、このような原理に基づくアミノ酸の認識は分離法として利用できるだけでなく、センサーとして応用可能であるので、その点に関しても検討を行った。いずれの場合においても、この3元錯体はアミノ酸の光学異性の認識および分離に効率よく利用できることが分かった。

産業技術への貢献

目的で述べたようにアミノ酸の立体認識は生物化学、食品工業において重要である。また、さらに複雑な化合物の認識に対して、分子軌道法などの量子化学的手法はシステムの最適化を最小限の実験コストで達成するために、今後ますます重要になってくるものと思われる。

研究発表

口頭発表

- 1) 長岡 勉：「電導性ポリマー薄膜への分子認識機能の組み込み」；日本分析化学会第58回討論会、2G09, p.84, 1997.5
- 2) 陳 智棟、長岡 勉：「キラル選択因子を用いる

電気化学的なアミノ酸の光学異性体の分離」；日本分析化学会第46年回、3A06、P. 17、1997.10
他4件

論文誌

- 1) T. Nagaoka, H. Nakao, T. Suyama, K. Ogura, M. Oyama, S. Okazaki: 「Electrochemical Characterization of Soluble Conducting Polymers as Ion Exchangers」；Anal. Chem., 69, 1030(1997)
- 2) H. Nakao, T. Nagaoka, K. Ogura: 「Ion Exchange Ability of Polyaniline-Polyvinyl Alcohol Colloids with Various Anions」；Anal. Sci., 13, 327 (1997)
- 3) T. Nagaoka, H. Nakao, T. Suyama, K. Ogura: 「Polyaniline-Poly(vinyl alcohol) Dispersions for Controlled Ion Exchange of Organic Sulfonates」；Analyst, 122, 1399 (1997)
- 4) S. M. Ahmed, T. Nagaoka, K. Ogura : 「Electrochemical and Spectroelectrochemical Characterization of Some Polypyrrole/Anthraquinone Sulfonate Films」；Anal. Sci., in press.

グループメンバー

氏名	所属	職(学年)
長岡 勉	工・応用化学	助教授
陳 智棟	工・応用化学	D I
周 延秀	工・応用化学	JSPS Post Doctoral Fellow

連絡先(代表者)

TEL : 0836-35-9928 FAX : 0836-35-9933
E-mail : tnagaoka@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp

Chiral Selector: NS-Phe
N-(2-naphthalenesulphonyl)-phenylalanine
synthesized from L-phenylalanine

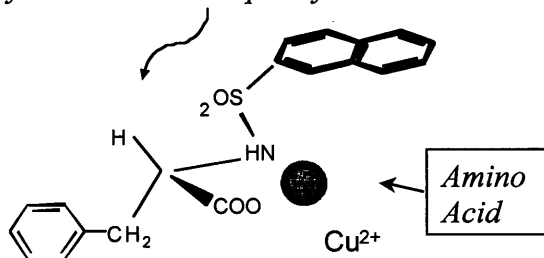


Fig. 1 A model for the interaction