

演 題	植物体内におけるエチレン生合成機構に関する理論的研究 ～ACCの水和クラスターについて～	
発 表 者 ( 所 属 )	○ 伊藤三香、原田隆範、常盤広明 ( 立教大理 )	
連 絡 先	〒171-8501 東京都豊島区西池袋 3-34-1 立教大学化学科 Tel : 03-3985-2394 Fax : 03-5992-3434 E-mail : mika@chem.rikkyo.ac.jp	
キーワード	1-アミノシクロプロパン-1-カルボン酸、ACC、溶媒効果、 水和クラスター、連続誘電体モデル、SCRF 法、平衡構造、プロトン移動機構	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	エチレンの前駆体である ACC の水溶液系における振る舞いを解析するため、 水和クラスターモデルと連続誘電体モデルを組み合わせて用いることにより、 溶媒効果を有効的に取り込んだ。	
環 境	適 応 機 種 名	
	OS 名	
	ソース言語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	・ 日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・ 独自に頒布する ・ ソフトハウス、出版社等から市販 ・ ソフトの頒布は行なわない ・ その他	具 体 的 方 法
	・ 未定	

## 1. 序論

エチレンは、我々の生活必需品となっている石油化学工業製品の原料として多量に生産される、ありふれた物質である。一方で、この極めて単純な構造であるエチレンが、植物体内ではごく微量で植物ホルモンとして働くことが知られている。植物ホルモンとしてのエチレンの *in vivo* における生合成については多くの生化学的なアプローチが行われており、Fig.1 に示すような 1-アミノシクロプロパン-1-カルボン酸(ACC)を中間体とする経路が一般的に受け入れられている[1]。しかしながら、エチレン生合成経路の反応機構は分子レベルで充分明らかにされているとは言い難い。

そこで本研究では、量子化学的手法を用いることによって、植物体内におけるエチレン生合成反応機構を分子論的に解明する第一歩として、エチレンの前駆体 ACC に注目し、このアミノ酸の一種である ACC の水和構造についてクラスターモデルを用いた理論的な解析を行った。さらに、ACC の水和構造間におけるプロトン移動機構を理論的に検討した。

## 2. 方法

波動関数には Hartree-Fock(HF)法、密度汎関数法(B3LYP 法)を用い、基底関数には Pople らの 6-31G\*を使用した。また、水の溶媒効果を考慮するため、水和クラスターモデルと連続誘電体モデル(SCRF Method, Onsager Model)を用いた。計算プログラムには GAUSSIAN98 を使用した。

## 3. 結果と考察

ACC の平衡構造に関しては、孤立系では neutral form のみが得られ、zwitterionic form としての安定構造は得られなかった。

次に、水分子の溶媒効果を取り入れるため、 $\text{ACC}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n=1\sim6$ ) についてクラスターモデルを用いた理論計算を行った結果、zwitterionic form と neutral form の両方の安定構造が得られ、zwitterionic form の安定性はクラスターサイズに依存することがわかった。

さらに、水のバルクとしての溶媒効果を取り入れるため、 $\text{ACC}\cdot(\text{H}_2\text{O})_6$  のクラスターモデル全体を連続誘電体モデルに取り込んで理論計算を行った結果、zwitterionic form の安定性がより高まることになり、中性水溶液中の ACC の zwitterionic form は neutral form よりも非常に安定で存在比が高い構造であることがわかった。

また、neutral form から zwitterionic form への相互転換には、Fig.2 に示すような水分子を介した協奏的なダブルプロトン移動が有効な機構であることが示唆された。

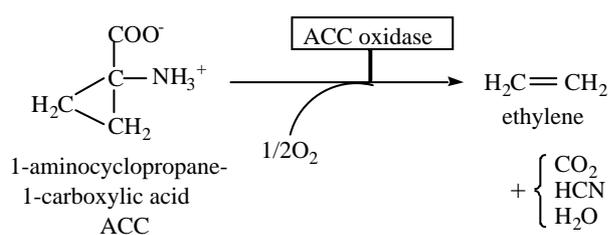


Fig.1 Ethylene biosynthesis

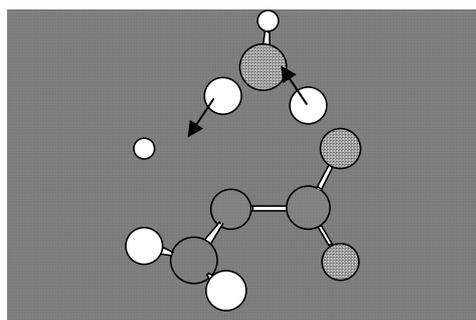


Fig.2 The mechanism of interconversion between neutral and zwitterionic forms of  $\text{ACC}\cdot(\text{H}_2\text{O})_6$  in aqueous solution

## 参考文献

- [1] T. W. Heldt, PFLANZENBIOCHEMIE (Springer-Verlag, Tokyo) (2000).