

양자계산을 이용한 Phenyl Alanine Layase (PAL)의 메커니즘 연구

김성한

서울특별시 노원구 광운로 20, 광운대학교 화학과, 139-701.

전화: (010) 6880-6500, 이메일: iajdcjda@gmail.com

Chemworks (or Chemworks2) ID: ecc13_kwu_shkim

초록

Phenylalanine Ammonia Lyase (PAL)는 phenylalanine 의 산성도가 더 큰 ammonium hydrogen 과는 반응하지 않고 그것의 nonacidic β proton 을 제거하는 역할을 한다. Phenylalanine 은 electrophilic 그룹을 갖고 있으며 지난 30 여년 동안 phenylalanine 의 electrophilic 그룹이 PAL 의 반응 기작에 중요한 역할을 한다고 믿어왔다. 그러나 최근 X-ray 와 UV spectroscopy 를 통하여 상당히 electrophilic 한 5-methylene-3,5-dihydroimidazol-4-one (MIO) 그룹이 발견되었다. 이전의 연구들은 실험을 통하여 MIO 와 관련된 electrophile 에 의한 Friedel-Crafts Attack 메커니즘과 electrophile 에 대한 nucleophilic addition 메커니즘을 제시하였으며, 본 연구진은 양자계산을 통하여 두 가지 메커니즘의 에너지 차이를 살펴봄으로써 더욱 합리적인 메커니즘을 제시, 규명하고자 한다. 본 연구에서는 특히 electrophile 에 대한 nucleophilic addition 메커니즘에 대하여 양자계산을 이용하여 반응물, 생성물, 전이상태의 분자 구조를 제시하고 반응이 일어나는데 필요한 에너지를 계산하고자 한다.

핵심어 : PAL, DFT, 반응메커니즘