

キラル分子のパリティ非保存相互作用エネルギーに関する理論的研究 (Theoretical Study of Parity-violating Energy of Chiral Molecules)

北山 健、清永 公、菊池 修 (筑波大化)

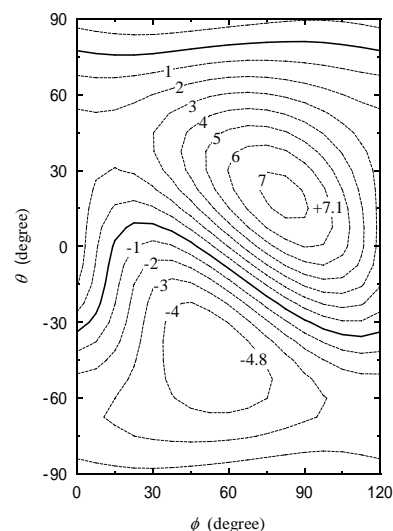
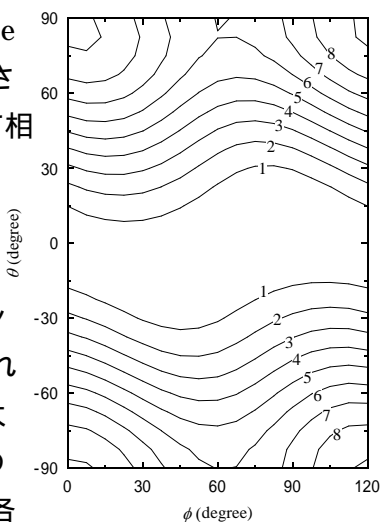
Takeshi Kitayama, Hiroshi Kiyonaga, Osamu Kikuchi

(Department of Chemistry, University of Tsukuba)

1. **序論** 中性カレントによって電子と原子核の間に働くパリティ非保存の弱い相互作用 H_{pv} は、鏡像関係にある分子(Ψ_o^L, Ψ_o^R)間にエネルギー分裂を引き起こす事が知られている。この分裂幅 E_{pv} は極めて小さい($\sim 10^{-19}$ Hartree)が、生体中のアミノ酸の L-選択性と糖の D-選択性の問題を解く鍵として注目されている。 E_{pv} の絶対値は極端に小さな値であるにもかかわらず、近年の測定方法の進歩に伴って実験的な検証が行われ始めており、理論計算による E_{pv} の予測は近年ますますその意義を増してきている。本研究では、変分法に基づく Spin-Orbit-Coupling SCF (SOC-SCF)法により波動関数を決定し、それを用いて E_{pv} を計算する方法を新たに開発した。また、SOC-SCF 法によって alanine, glyceraldehyde の E_{pv} を計算し、Tranter らによる結果との比較検討を行なった。

2. 水溶液中での L-alanine の E_{pv} による安定化

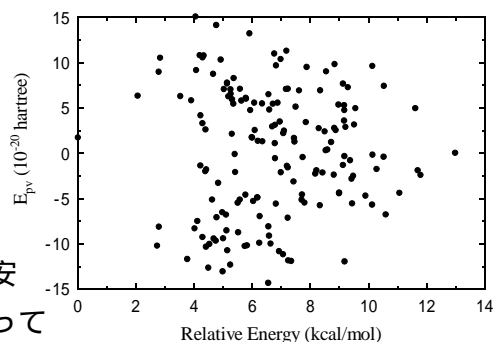
水溶液中での平均構造の下で L-alanine zwitterion の $NH_3(\phi)$, $CO_2(\theta)$ 基を回転させ、HFGB-SOC-SCF/[5s2p/3s]を用いて相対エネルギーと E_{pv} の 2 次元マップを描いた。相対エネルギーは NH_3 の回転に対してはあまり変化せず、水溶液中では alanine は CO_2 が 0° 前後のコンフォメーションを取っていると考えられる。一方 E_{pv} は CO_2 基の回転に対して大きく変化してその符号を変え、正負の E_{pv} の領域はほぼ同じ大きさとなった。各



構造でのポピュレーションをボルツマン分布を仮定して求め、水溶液中 300K の平衡状態での平均的な E_{pv} による安定化を計算すると $+2.1 \times 10^{-20}$ hartree という値が得られた。最安定のコンフォメーションで E_{pv} 値が正である事も考えると、L-alanine が D-alanine よりも安定であると言う Mason らによる結論は否定された。

3. 水溶液中での D-glyceraldehyde hydrate の E_{pv} による安定化

D-glyceraldehyde hydrate について、HFGB/STO-3G で配座空間約 18 万点を探索し 164 個の局所安定構造を得た。右図に、各構造の相対エネルギーと HFGB-SOC-SCF/[5s2p/3s]による E_{pv} を示す。全エネルギーと E_{pv} の間には相関が無いために E_{pv} による安定化は全体としては打ち消し合い、平均的な安定化は最安定な構造での E_{pv} の値に大きく依存する事がわかった。最安定構造での E_{pv} は -1.63×10^{-20} hartree となり、D 体が E_{pv} によって安定化されている事がわかった。



D-glyceraldehyde hydrate 安定配座の相対エネルギーと E_{pv}