

カイラル分子における電子カイラリティの相対論的量子化学計算

Relativistic quantum chemical calculation of the electron chirality in chiral molecules

京都大学大学院 工学研究科 マイクロエンジニアリング専攻 生命数理科学研究室
黒田 直也

研究成果概要

カイラル分子の鏡像異性体間には、パリティ対称性の破れに起因したエネルギー差 Parity-Violating energy difference (PVED) が存在すると予想されているが、PVED の値は非常に小さいため未だ実験で観測されていない。将来の実験で PVED を検出するためには、より大きな PVED の値を持つカイラル分子とその電子状態を探索する必要がある。申請者の研究グループによる従来の研究では、最も単純なカイラル分子 H_2X_2 をモデルとして、電子励起により PVED が 100 倍以上増大することを相対論的量子化学計算で証明した(N. Kuroda, T. Oho, M. Senami, and A. Sunaga, Phys. Rev. A **105**, 012820 (2022)).

本研究では、申請者の研究グループによる従来の研究で計算対象とした H_2X_2 ではなく、実際の実験で PVED の探索が行われている $CHFCIBr$ 分子や、アラニン、セリン、バリン、システインなどのアミノ酸を計算対象として、電子励起状態やイオン化状態において PVED が増大するかどうかを相対論的量子化学計算により調査した。また、分子全体の電子カイラリティである ECCM は、自然界におけるホモカイラリティの起源の可能性としての観点で PVED よりも重要であると考えられているため、原子核近傍の電子カイラリティに対応する PVED だけでなく、ECCM についても電子励起状態やイオン化状態で増大するかどうか調べた。数値計算は、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに相対論的量子化学計算プログラムパッケージ DIRAC21 をインストールして行った。

研究成果として、現在の研究段階では、アラニン、セリン、バリンを対象として、HF レベルで Dirac-Coulomb-Gaunt ハミルトニアンを用いた電子構造計算により基底電子状態における PVED および分子全体の電子カイラリティ (ECCM) の計算を行い、先行研究 (M. Senami and T. Shimizu, Phys. Lett. A **384**, 126796 (2020)) と定性的な結果が一致することを確認した。さらに、電子励起状態やイオン化状態における $CHFCIBr$ 分子とアミノ酸の PVED や ECCM の計算を進めている。電子励起状態やイオン化状態では、基底状態よりも大きな計算コストが必要となるため、今後の研究で、 $CHFCIBr$ 分子とアミノ酸の PVED や ECCM が電子励起状態やイオン化状態で増大するかどうかを明らかにする。