

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		分子内電子のカイラリティによる自然界の鏡像異性体過剰の起源の解明			
研究テーマ (欧文) AZ		Homochirality generated by electron chirality in chiral molecules			
研究氏 代表 者	カナ CC	姓) セナミ	名) マサト	研究期間 B	2017 ~ 2018 年
	漢字 CB	瀬波	大土	報告年度 YR	2018 年
	ローマ字 CZ	Senami	Masato	研究機関名	京都大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		京都大学 大学院 工学研究科・講師			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>本研究では自然界の鏡像異性体過剰の謎の解明のために、これまで見落とされていた鏡像異性体中の電子のカイラリティについて研究した。地球の生体分子には鏡像異性体の L 体、D 体のうち片方しか存在しない。例えばアミノ酸には L 体のみ存在する。なぜこのような偏りが生じたのかは未解明だが、最初に何らかの鏡像異性体の均衡の破れが生じ、不斉増幅機構によって大きな鏡像体過剰率へと増幅したと考えられている。この最初の均衡の破れの主要因が何かは解明されておらず、様々な提案が議論されている。</p> <p>本研究では、新たな効果として、鏡像異性体分子間での弱い相互作用との反応率の違いについて検討する。電子はそのカイラリティにより弱い相互作用への反応が異なることが知られている。原子核近傍での局所的な電子のカイラリティの非対称性により、弱い相互作用を通じて鏡像異性体の L, D 体間にエネルギー差があることが知られている。しかし、分子全体でのどのくらいの電子カイラリティの非対称性があるかは全く注目されていない。そこで、本研究では、自然界の鏡像異性体過剰の謎の解明に向け、鏡像異性体間での電子カイラリティの差について理論的研究を行った。</p> <p>本研究では、四成分スピノルを用いた相対論的量子化学計算によりディラック方程式を解いて得られる分子内電子の波動関数を用いて、電子カイラリティの非対称度の評価を行った。具体的には簡単な鏡像異性体分子 H_2X_2 ($X=O, S, Se, Te$) について、スピン軌道相互作用の変化に応じて電子カイラリティの値が大きくなることを示した。H_2O_2 では、スピン軌道相互作用が小さく誤差が大きな結果となった。その後、鏡像異性体を持つ中で最も簡単なアミノ酸であるアラニン・セリン・バリンに対して、どの程度の非対称度があるか定量的に評価を行ったが、H_2X_2 と同様にスピン軌道相互作用が小さく信頼度の高い結果ではないが、電子カイラリティの非対称性を持つことを示した。</p>					
キーワード FA	ホモカイラリティ	鏡像異性体	スピン軌道相互作用		

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Computational analysis method of local electrical conductive property in nano-size materials							
	著者名 ^{GA}	M. Senami, M. Nakanishi, A. Tachibana	雑誌名 ^{GC}	AIP advances					
	ページ ^{GF}	025106-1~025106-8	発行年 ^{GE}	2	0	1	8	巻号 ^{GD}	9
雑誌	論文標題 ^{GB}	Asymmetry of electron chirality between enantiomeric pair molecules and the origin of homochirality in nature							
	著者名 ^{GA}	M. Senami and K. Ito	雑誌名 ^{GC}	Physical Review A					
	ページ ^{GF}	012509-1~012509-9	発行年 ^{GE}	2	0	1	9	巻号 ^{GD}	99
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

In this work, a new mechanism using the electron chirality in enantiomers is proposed for the mystery of homochirality. Biological molecules on the earth have strong bias between L and D enantiomers. For example, almost all amino acids are L-molecules. It has not been clarified why this bias is generated. It is widely believed that once a small difference between L and D enantiomers and this an initial bias is enhanced by amplification mechanism. The origin of the initial bias is the target of this work.

We propose that the difference of reaction rate by the weak interaction between L and D enantiomers may contribute the initial bias. The coupling constant of the electron to the weak gauge boson is different dependent on the chirality of the electron. It is known that the nonzero electron chirality exists around nuclei in an enantiomer and this makes parity violating energy difference between enantiomers. But, the total electron chirality of the whole molecule has not been paid attention to.

In this work, we study the electron chirality in enantiomers. We calculate the total electron chirality by using the four-component wave function derived by relativistic quantum chemistry computations. First, H_2X_2 ($X=O, S, Se, Te$) is studied and the dependence of the total electron chirality on the spin-orbit interaction is shown. Second, we have shown that alanine, serine and valine have also the nonzero total electron chirality.