

光駆動キラル分子モーターの運動伝達に関する理論的研究

(東北大院理) ○中山 慎一朗、八巻 昌弘、保木 邦仁、河野 裕彦、藤村 勇一

近年、ナノ技術に対する関心が高まっている。従来の巨視的な機械において重要な部品の一つにモーターが挙げられるが、それを分子サイズで実現する回転駆動機構の設計・解析は非常に興味深い試みである。我々の研究室では、レーザーにより駆動される分子モーターの設計について理論的考察を行ってきたが[1]、そこでは駆動対象となる分子ローターの回転運動に対応するただ1つの自由度のみを考慮していた。しかし、分子ローターが他の何らかの原子団と相互作用し、その運動を誘起する分子モーターとして機能するためには、駆動対象の運動を表すもう1つの自由度を考慮することが必要不可欠である。この目的を達成するために、互いに相互作用する2つの自由度を持った分子モデルを構築し、その運動伝達の様相を考察する。

図1に示されるキラルな分子((R)-2-chloro-5-methyl-cyclopenta-2,4-dienecaldehyde)を考える。アルデヒド基(-CHO)の回転角を ϕ 、メチル基(-CH₃)の回転角を χ で表し、分子の最安定構造における ϕ 及び χ の値を0とする。電子状態計算(B3LYP/6-31+G(p,d)、Gaussian03)により、 ϕ と χ を変化させながら構造最適化を行い、ポテンシャルエネルギー曲面(図2)及び電気双極子モーメントを求めた。双極子モーメントの電場方向の成分 $\mu_x(\phi, \chi)$ は、 χ に関して殆ど変化していなかった。この2つの回転基と直線偏光電場 $E_x(t)$ の相互作用を双極子近似を用いて記述する。系のハミルトニアンは次のように書ける。

$$H = \frac{L_\phi^2}{2I_\phi} + \frac{L_\chi^2}{2I_\chi} + V(\phi, \chi) - \vec{\mu}(\phi, \chi) \cdot \vec{E}(t)$$

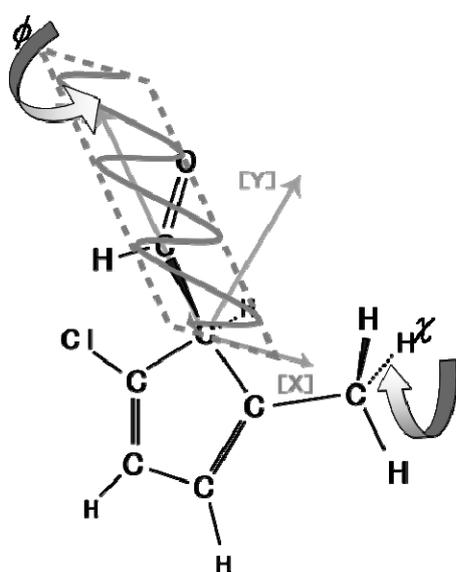


図1 モデル分子 (C₇ClH₇O)

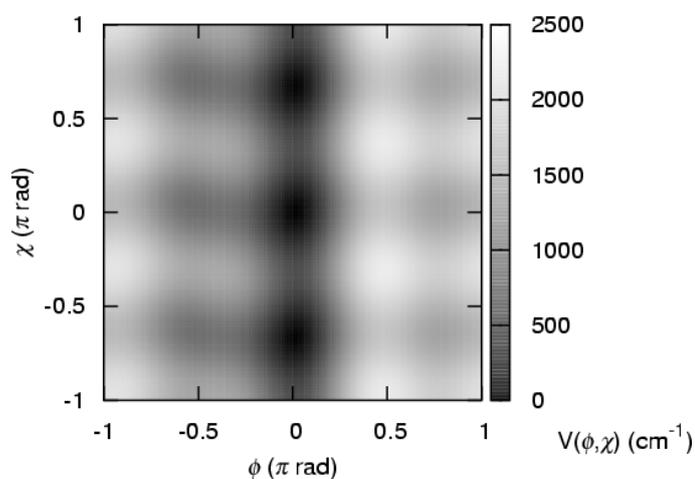


図2 ポテンシャルエネルギー曲面

但し、 L_ϕ と L_χ はアルデヒド基とメチル基の角運動量、 I_ϕ と I_χ はそれらに対応する慣性質量であり、パルス電場は \sin^2 型の包絡関数を持つとした。初期時刻における位置および角速度分布をカノニカル分布と考え、分子の古典的な運動を速度ベルレ法で求めた。

結果を図4と5に示す。ここで、パルスの時間幅は6 psとした。 ϕ 方向の角運動量期待値と χ 方向の角運動量期待値には明確な相関が存在することが分かった(図4、図5の黒破線どうし、白点線どうしの対応)。その相関の符号は負であり、一方が正ならばもう一方は負、一方が負ならばもう一方は正方向に回転していた。すなわち、アルデヒド基(-CHO)がメチル基(-CH₃)と噛み合っただけで回転運動を行っていると言える。また、 ϕ 方向のみ、ないし χ 方向のみの自由度を考慮した1自由度の計算を行った結果、 ϕ 方向のみの場合には回転運動が現れるが、 χ 方向のみの場合には明確な回転運動が見られないことも分かった。従って、まずレーザー光によりアルデヒド基の回転運動が駆動され、それがメチル基の回転運動に伝播するという描像を立てることができる。

図6に、電場振幅1.75 GV/m、角振動数85 cm⁻¹で計算した角運動量期待値の時間変化を示す。3 ps周辺で回転運動の一方向性が生じ、パルス消滅後もそれが残っていることが分かる。この場合、光駆動分子モーターにより生成されたメチル基の運動の回転数は約 7.98×10^{10} 回/秒であった。当日は、運動機構の詳細、及びその駆動効率の評価案等について述べる。

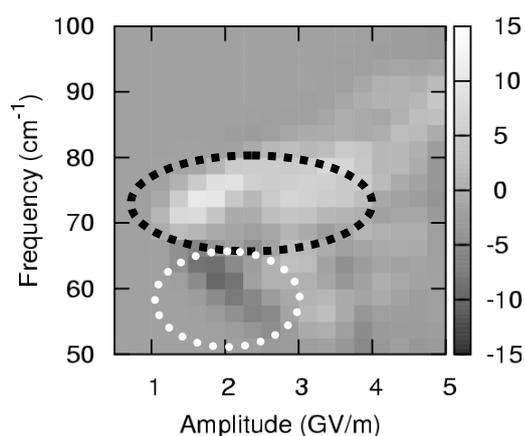


図4 ϕ 方向の角運動量期待値

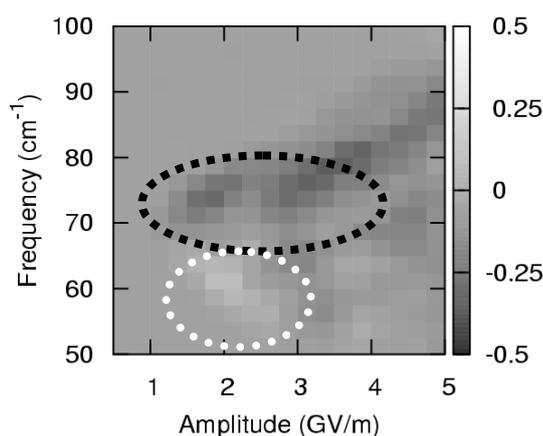


図5 χ 方向の角運動量期待値

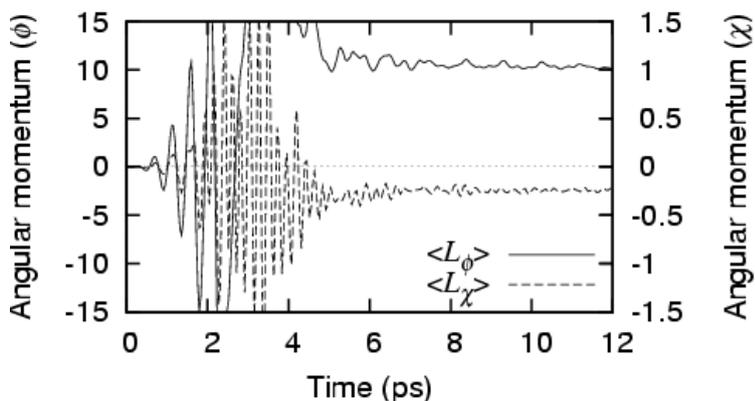


図6 角運動量期待値の時間変化(レーザー電場の最大振幅1.75GV/m、パルス長6ps、中心周波数72.5cm⁻¹)