

## プロリン分子における陽電子消滅スペクトルの理論計算

<sup>1</sup>埼玉大学・理, <sup>2</sup>横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科  
○杉浦悠太郎<sup>1</sup>, 鈴木健人<sup>1</sup>, 高柳敏幸<sup>1</sup>, 北幸海<sup>2</sup>, 立川仁典<sup>2</sup>

### Theoretical calculations of positron annihilation spectra for proline

○Yutaro Sugiura<sup>1</sup>, Kento Suzuki<sup>1</sup>, Toshiyuki Takayanagi<sup>1</sup>,  
Yukiumi Kita<sup>2</sup>, Masanori Tachikawa<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Chemistry, Saitama University, Japan

<sup>2</sup> Graduate school of Nanobioscience, Yokohama City University, Japan

#### 【Abstract】

Positrons having positive charge are anti-particles of electrons. When positrons collide with electrons, gamma rays are emitted through positron-electron annihilation. This unique nature has been widely employed to Positron Emission Tomography (PET) and Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS). However, interactions between positron and molecules are not clearly understood at an atomic level. Theoretically, it is known that positrons are bound to polar molecules which have a certain dipole moment. Recently, development of experimental technique has enabled measurement of positron binding energies for various molecules. In this work, we have calculated the annihilation spectrum for proline using the reduced-dimensionality quantum wave packet method. To obtain the positronic potential energy surface, we have used multi-component molecular orbital (MC\_MO) theory. Several resonance peaks seen in the calculated spectrum indicate that a positron is temporarily resonance in proline.

【序】陽電子は電子の反粒子であり、正の電荷をもつ。また、電子と衝突すると、ガンマ線を放出し対消滅を起こす。この特異な性質から、陽電子は医療分野では体内の癌細胞を見つけるポジトロン断層法(PET)や、材料工学分野では陽電子対消滅寿命(PALS)法に使われている。しかしながら陽電子と分子の原子レベルでの詳細な相互作用については、あまりわかっていない。そこで我々はアミノ酸の一つであるプロリンに対して、陽電子消滅スペクトルを理論計算により求めた。スペクトルには鋭いピークがみられ、このことは陽電子が一時的に分子に束縛される、共鳴状態が存在していることを示唆している。

#### 【方法】

プロリン分子は気相中で様々な構造をとりうるが、分子内水素結合をしている構造が最安定構造であることが知られている[1]。この構造のプロリン分子において、Fig. 1. のように C-O-H の変角振動と CO の伸縮振動( $Q_{36}$ )、OH の伸縮振動( $Q_{44}$ )の 2 つの核の自由度を考慮した陽電子付着プロリン分子のポテンシャルエネルギー曲面を多成分分子軌道(MC\_MO)法により計算した[2]。得られたポテンシャルエネルギー曲面を Fig. 2. に示す。このポテンシャルエネルギー曲面上で

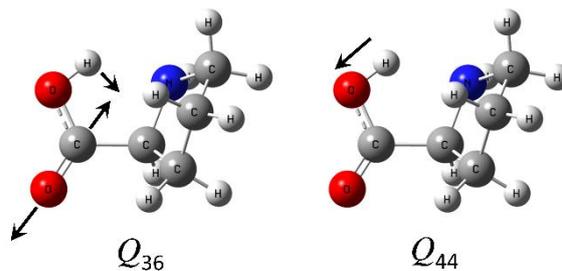


Fig. 1. Two normal-mode vectors of proline

Local-Complex Potential モデルに基づき量子波束法を用いて対消滅速度  $Z_{\text{eff}}(E)$  計算した。解くべき時間依存の Schrödinger 方程式は、以下のようなになる。

$$i\hbar \frac{\partial \psi(Q_{36}, Q_{44}, t)}{\partial t} = [T + V^p(Q_{36}, Q_{44}) - i\Gamma/2] \psi(Q_{36}, Q_{44}, t) \quad (1)$$

$T$ は運動量の演算子、 $V^p$ は陽電子付着のポテンシャルエネルギー、 $\Gamma$ は陽電子付着の寿命を決定する共鳴幅である。 $Z_{\text{eff}}(E)$ は以下のような式になる。

$$Z_{\text{eff}}(E) = \frac{\pi}{k(E)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right) \langle \psi(Q_{36}, Q_{44}, t=0) | \rho_d(Q_{36}, Q_{44}) | \psi(Q_{36}, Q_{44}, t) \rangle dt \quad (2)$$

$k(E)$ は陽電子の衝突エネルギー、 $\rho_d$ は電子-陽電子重なり密度である。 $\rho_d$ は MC\_MO 法により簡単に求めることができる。また $\Gamma$ の値は以下の式を用いた。

$$\Gamma = \alpha E_{\text{PA}}(Q_{36}, Q_{44})^\beta \quad (3)$$

$E_{\text{PA}}$ は陽電子親和力である。 $\alpha$ と $\beta$ の値はプロリン分子の最安定構造において、 $\Gamma$ が Gribakin らの式に合うように定めた[3]。

### 【結果・考察】

陽電子消滅スペクトルを Fig. 3 に示す。 $\beta$ の値が大きいと、スペクトルがブロードになっていることが分かる。これは共鳴幅が大きくなるためと考えられる。これらのピークにおいて共鳴波動関数を Fig. 4 に示す。これより 0.034 eV, 0.122 eV の波動関数は、 $Q_{36}$ に沿った振動準位に関連していることが分かる。詳細は当日に発表する。

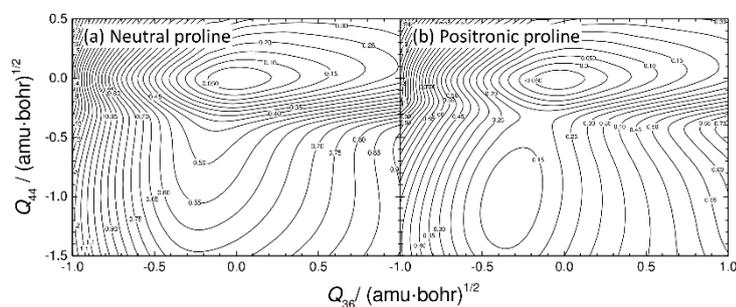


Fig. 2. Potential energy surface

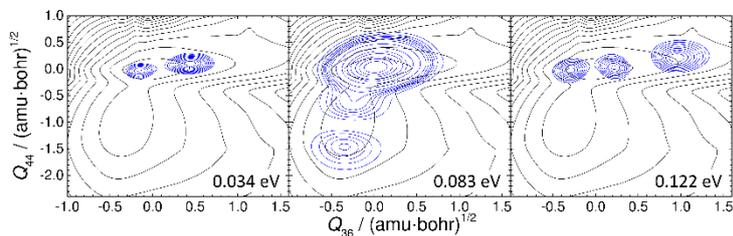


Fig. 4. Resonance wavefunctions

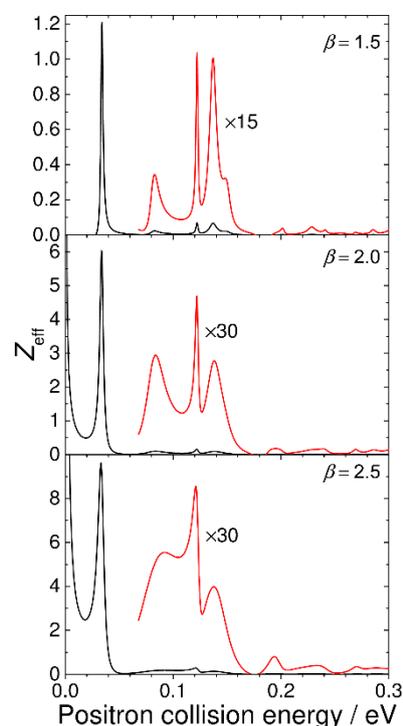


Fig. 3. Calculated annihilation spectra

### 【参考文献】

- [1] G. Kaur *et al.* *RSC Adv.* **5**, 82587–82604 (2015).
- [2] Y. Sugiura *et al.* *J. Comp. chem.* **39**, in press (2018).
- [3] G. F. Gribakin *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **97**, 193201 (2006).