

グリシン-K⁺ におけるミュオニウムの量子的局在化

○本田知大 吉川武宏 高柳敏幸 (埼玉大学大学院 理工学研究科)

ミュオニウム(Mu) は 水素原子(H)の同位体のひとつであり、正ミュオン(μ^+) と電子(e^-)からなる粒子である。Mu の電子構造は H と同じであるとみなせるが、Mu の質量は H のおよそ 1/9 である。そのため H を Mu に置換した分子は、元の分子とは異なる挙動を示しうる。

本研究では水素原子を Mu に置換したグリシンとカリウムイオン(K⁺)の錯体に注目した。Fig.1 にグリシン-K⁺ 錯体のエネルギーダイアグラムを示した。グリシンは分子内プロトン移動反応によって、中性型の構造と双性イオン型の構造の 2 つの構造をとる。グリシン-K⁺ 錯体においては中性型の EQ₁ と双性イオン型の EQ₃ の相対エネルギーが同程度であり、分子内プロトン移動反応のバリアは低い。今回は分子内プロトン移動反応を表すことのできる、EQ₁ と EQ₃ の周辺の局所的なポテンシャルエネルギー関数を作成した。そのポテンシャルエネルギー関数を用いて、核の量子効果を考慮することのできる経路積分分子動力学計算 (PIMD 計算) を行い、グリシン-K⁺ 錯体の水素原子を Mu に置換した場合と置換しない場合のプロトン移動反応の相違を明らかにした。詳細は当日報告する。

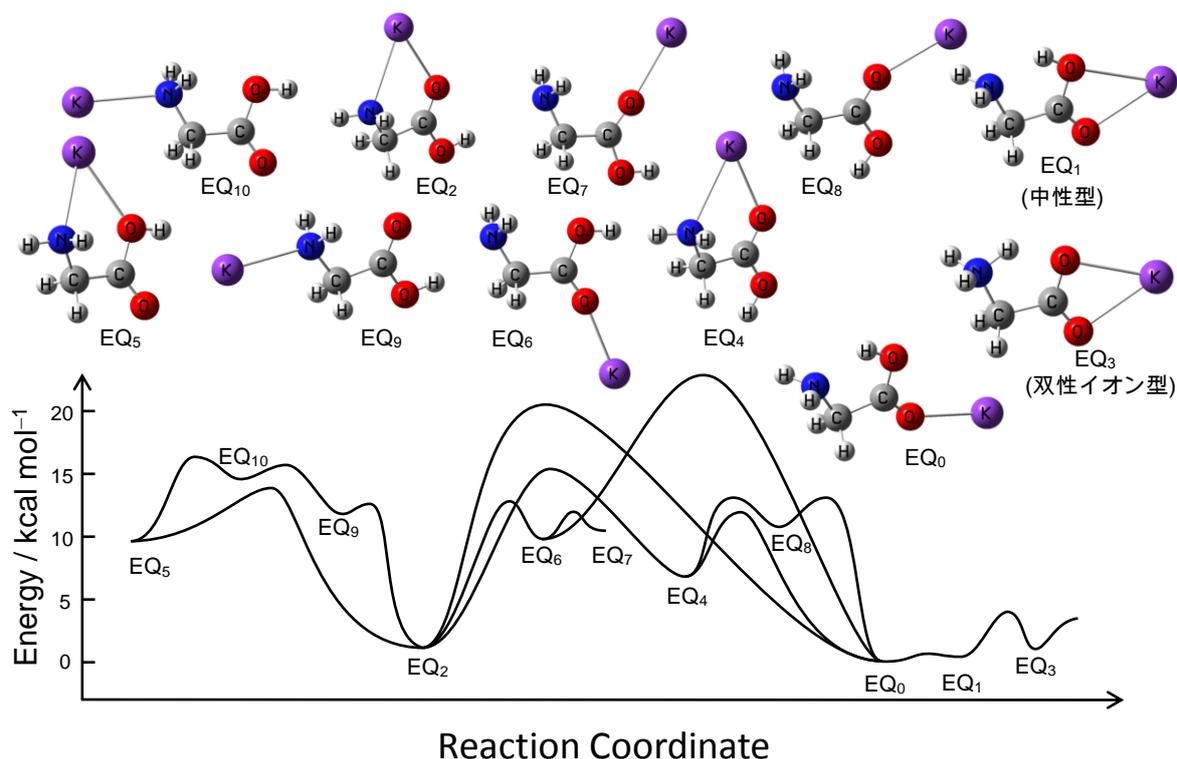


Fig.1 グリシン-K⁺ 錯体のエネルギーダイアグラム。

GRRM11^[1-4] を用いて B3LYP/6-31+G(d) レベルで反応経路探索を行った。

- [1] K. Ohno, S. Maeda, Chem. Phys. Lett. 384 (2004) 277. [2] S. Maeda, K. Ohno, J. Phys. Chem. A 109 (2005) 5742.
[3] K. Ohno, S. Maeda, J. Phys. Chem. A 110 (2006) 8933. [4] S. Maeda, K. Ohno, J. Phys. Chem. A 111 (2007) 4527.