

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-2. ダイナミクス
小項目	1-2-10. 分子キラリティー変換

#### 概要（200字以内）

自然界にとって最も本質的な分子キラリティー（掌性）に関する物理化学的研究は、これまで、分子分光学の立場からなされてきた。核波束や電子波束理論の発展にともない、光（レーザー）による分子キラリティーの変換さらにはキラル分子を利用した機能発現の量子制御設計が21世紀前半の理論化学研究の重要なターゲットとなるであろう。フェムト・アト秒レーザー制御実験技法の進歩により、これらの量子設計が実証される時代になりつつある。

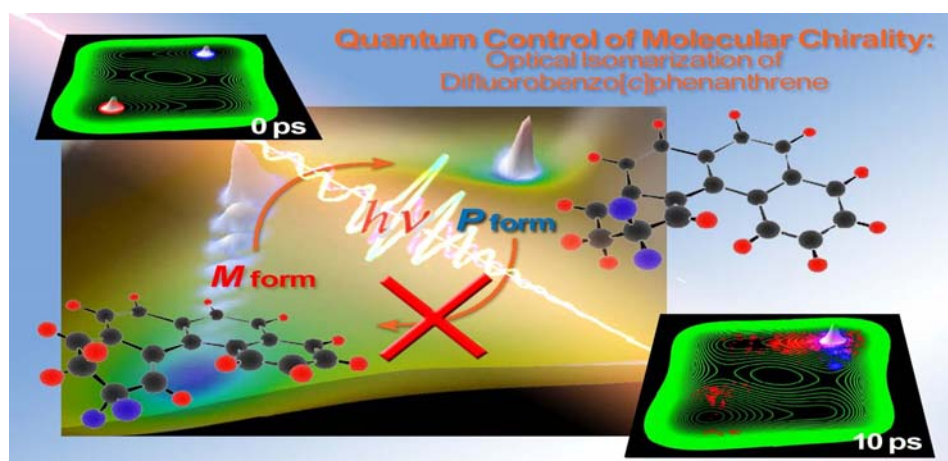


図1. 分子キラリティー（M → P）変換の核波束量子制御設計

#### 現状と最前線

分子キラリティーの量子変換：これまで、クロマトグラフィーや光学活性試薬などを用いてエナンチオマー（鏡像異性体）の選択・分離がなされてきた。パルスレーザーを用いて反応系の量子状態の時間発展を直接操作して、副生成物の生成を抑制し、ラセミ体（等しい割合の2種のエナンチオマー）から一方のエナンチオマーに変換する量子制御の理論的研究が始まっている。<sup>(1)</sup> 現段階では、単純化したモデルを用いて、基本的な量子制御シナリオが提案されている。レーザー電場として赤外領域の電場、あるいは、可視・紫外光の電場を用いるポンプ・ダンプ制御法や断熱通過法の取り扱いが報告されている。気相・溶液中では分子がそろっておらずランダムに配向であるため、ラセミ体のキラリティー量子制御は、はじめに空間（配向）制御を行ない、つぎに、反応ポテンシャル面上での核波束制御を行う2段階の制御法から成り立っている。

機能発現の量子設計：

キラリティーをもつ分子はポテンシャルエネルギーが非対称である。このことが分子ダイナミクスに一方方向性をもたせることになる。角運動量をもたない力が加わった場合でも、一方方向性の運動（左または右回転）が誘起される。この特質を利用してキラリティー分子に機能発現を誘起させることが出来る。<sup>(2)</sup> この原理を応用した研究に、核運動自由度を取り扱う光駆動キラリ分子モーターと電子運動自由度を扱う光誘起キラリ芳香族分子環電流の研究が報告されている。パルスレーザーを用いると、熱や電荷を用いる場合と比べて、より短時間内で制御が可能である。環電流制御では電子波束を扱い、数百アト秒時間内に制御が行われる。ヘリシティをもたない直線偏光パルスレーザーにより回転を誘起させると、その回転方向は分子のキラリティーを反映する。逆に、回転方向を観測することにより、分子のキラリティーを判定することができる。これは新しいキラリ認識・識別法に開発につながる。

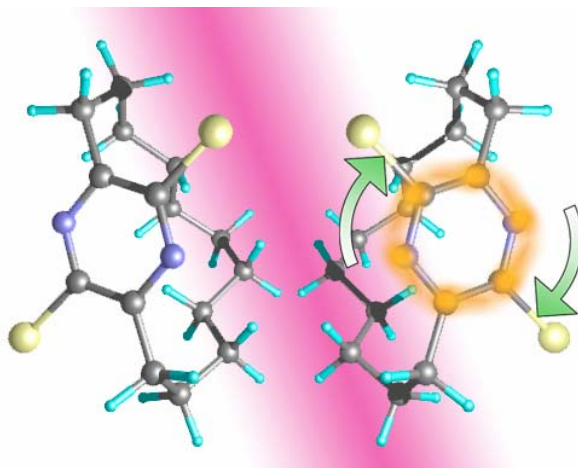


図2. アンサ（面性キラリ）芳香族分子の環電流の光制御 (Angew. Chem. Int. Ed. 45, 7995 (2006))

(1) キラリ分子の光異性化：理論的取り扱い、藤村勇一、光化学 34, 154 (2003)

(2) Optical Control of Chiral Molecular Motors, H. Hoki, et al. In “Progress in Ultrafast Intense Laser Science”, Springer-Verlag, Vol.3 (2007).

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

キラリティー変換：凝縮環境場中での分子キラリティーの量子制御設計

分子モーター：ナノスケールキラリ分子モーターのテラヘルツ波による量子制御設計

電子波束：環電流の光制御と環電流誘起磁場制御、CD（円二色性）法にかわるキラリ認識・識別超短時間分光法の開発

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

フラレーン等の3次元環電流光制御と単一分子光情報素子の量子設計、光駆動量子機械の設計

キーワード

キラリティー、量子制御、分子モーター、電子波束、環電流

(執筆：藤村勇一)