

分子センシングメタマテリアル設計のためのカイラル媒質モデルの構築

Development of Chiral Medium Model for Molecular-Sensing Metamaterials Design

岡山大学院自然 〇木原淳, 飯田琢海, 鶴田健二

Okayama Univ. 〇Atsushi Kihara, Takumi Iida, and Kenji Tsuruta

E-mail: tsuruta@okayama-u.ac.jp

生命体の構成や生理機能を担う有機化合物には光学異性体を持つものが存在し、一方は生体内で有害となる場合がある。光学異性体を持つ分子はカイラル分子と呼ばれ、その構造解析の方法として左右円偏光に対する吸収度の違いを測定する円二色性(CD)測定がある。赤外光による分子振動に起因した振動円二色性(VCD)応答を測定することで、ほぼ全ての有機化合物のCD測定が可能となり構造解析ができる。VCD測定ではいくつかの測定原理上の制約が存在するが、その解決策として、金属ナノ構造を集積したメタマテリアルが作り出す局所光学活性と呼ばれる局在した円偏光を利用した高感度な構造解析が報告されている⁽¹⁾。このような機能を持つメタマテリアルの設計には、カイラル媒質の有無に対するメタマテリアルのVCD応答の違いを予め定量的に評価しておく必要があり、電磁波に対するカイラル媒質の振動状態などを考慮した電磁界数値解析が有効である。そこで本研究では、第一原理計算と有限要素法を組み合わせるVCD応答を予測する理論スキームを提案する。この手法を用いて最も基本的なカイラル分子であるD/L-アラニンに適用した。次に有効媒質近似とメタマテリアルを組み合わせたモデルを有限要素法に基づく電磁界解析を行い、局所光学活性と媒質層との相互作用を明らかにした。

有限要素法に基づく電磁界解析でVCD応答を考えるためには、電界と磁界の相互作用を表すカイラルパラメータをマクスウェル方程式に組み込む必要がある⁽²⁾。カイラルパラメータはCD応答のピーク波長、強度と尖鋭度を表し、第一原理計算を行うことで対象とする分子が持つカイラルパラメータを予測した。予測したカイラルパラメータをカイラル媒質層に組み込むことで有効媒質近似モデルを作成し、電磁界解析からD/L-アラニンのVCD応答を計算した結果を図1に示す。カイラル媒質層とメタマテリアルを組み合わせたモデルを電磁界解析することで、図2に示すように局所光学活性によってカイラル媒質層のVCD応答が変化すると分かった。

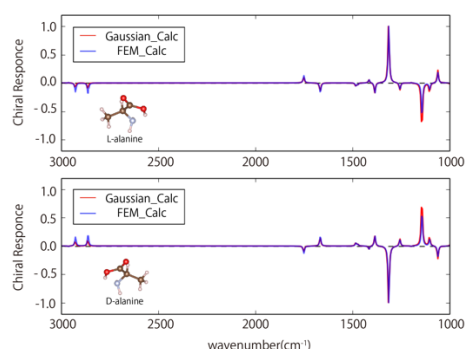


Fig.1 Calculation of D/L-alanine VCD response

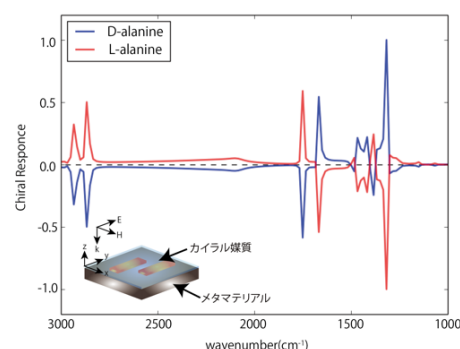


Fig.2 VCD response by local optical activity

参考文献

- (1) E. Hendry, T. Carpy, J. Johnstom, and M. Popland, *Nature Nanotechnol.* **31**, 783~787 (2010).
- (2) I. V. Lindell *et al.*, "Electromagnetic Waves in Chiral and Bi-Isotropic Media," Artech House 1994.