

キラル分子の共鳴光圧のサイズ依存性と選別手法の理論研究

Theoretical study of enantiomer sorting by size dependent optical force on chiral molecules

阪府大院工¹, 阪大院基礎工² °蓬萊 貴大¹, 石原 一^{1,2}

Osaka Pref. Univ.¹, Osaka Univ.², °Takao Horai¹, Hajime Ishihara^{1,2}

E-mail: horai-2@pe.osakafu-u.ac.jp

キラル分子を選別するための一般的な方法論は長年求められてきたが、現在も有効な手法は確立していない。現在は化学的手法によるものが通常であるが、もし物理的手法が実現されれば触媒等を必要としないより一般的な手法となることが期待される。申請者は有力な物理的機構の一つとして光圧に注目した。申請者のグループでは、キラル物質として Crossley らに合成された Tröger 塩基型ポルフィリン分子二量体を想定し、その微視的な構造から Gouterman の 4 軌道モデルに基づき結合遷移双極子としてモデル化することでポルフィリン分子二量体にかかる光圧を評価した [1]。その際、分子の吸収帯における共鳴光圧 [2] を利用した場合に良いキラル選択性が得られる可能性が示唆された。前回の発表 [3] では、常温の水中といった現実的条件下を想定し、R 体と S 体の光圧差を利用して左右円偏光を対向照射 [4] する手法を検討した。更に、共鳴光圧による輸送距離が拡散距離を超えるための条件 [5] を評価することでその有用性や各種分子に対する適用範囲などを議論してきたが、単一キラル分子を選別するためにはかなり強い光強度が必要であることが分かった。そこで、キラル分子がナノ結晶化した状況で選別することを考え、単純な体心立方格子のラセミ混合物などを仮定した範囲では適度な光強度で選別できる可能性があることを示した。

前回の考察で残った課題は、キラル、或いはアキラルな分子が形成する現実的な結晶構造に基づいた考察、及び、ナノ結晶のサイズが大きく分布している場合の考察である。今回は、対象として、色素分子が螺旋状にスタックしたような会合体が形成された場合、あるいは、キラル分子がラセミ混合物を形成する際の実際の結晶データに基づいたモデル計算により選別可能性を考察する。特に分子、分子会合体、ナノ結晶などが混在し、大きくサイズ分布している場合、大きめのサイズの結晶が対向波で選別できても小さなサイズの会合体などの拡散距離を凌いで分離距離を稼げるかについては数値的な検討が必要になる。今回、このような議論も併せて、どの程度のサイズ分布であれば、エナンチオ分離が可能であるかも検討する。

[1] 江口弘樹, 飯田琢也, 石原一, 第 19 回光物性研究会論文集, 162-165 (2008).

[2] T. Iida and H. Ishihara, *Phys. Rev. B* **77**, 245319 (2008).

[3] 蓬萊貴大, 石原一, 第68回応用物理学会春季学術講演会, 16p-Z09-6, 口頭, オンライン, 3月, 2021年

[4] G. Tkachenko and E. Brasselet, *Nat. Commun.* **5**, 4577 (2014).

[5] T. Wada, H. Fujiwara, K. Sasaki, and H. Ishihara, *Nanophotonics* **9**, 3335 (2020).