

# アミノ酸分子への陽電子吸着の理論的解析

○小柳 勝彦、北 幸海、立川 仁典

横浜市大院生命ナノ (〒236-0027 神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2)

## 【はじめに】

陽電子は、電子と同質量、同スピン、そして正電荷(+1)を持っている。物質中に入射された陽電子は、電子との対消滅をする前に、原子・分子に吸着される陽電子複合体の形成など、様々な反応を起こすことが実験的に知られている[1]。しかし陽電子自身の寿命が短いため、陽電子の吸着機構等の基礎的性質を実験的に解明することは困難であり、第一原理計算による理論的解析が期待されている。分子が陽電子複合体(原子・分子と陽電子から成る一時的な束縛状態)を形成するためには、1.625 Debye 以上の双極子モーメントが必要である事が理論的に示唆されている[2]。一方、タンパク質を構成するアミノ酸分子には様々な構造異性体が存在し、その中にはこの閾値以上の双極子モーメントを持つものが存在する事が理論的に示唆されている[3]。しかしながら、その陽電子吸着に関する詳細は理論的にも実験的にも一切明らかになっていない。

そこで本研究ではアミノ酸分子の陽電子吸着能を明らかにすることを目的に、電子・陽電子を量子力学的粒子として取り扱うことのできる多成分分子軌道(MC\_MO)法[4]を用いて、20 種類のアミノ酸分子の陽電子親和力(陽電子の束縛エネルギー, PA)を系統的に解析した。

## 【方法】

天然に存在する 20 種類のアミノ酸分子の最安定構造および分子内水素結合を有する準安定構造(以下 HB 構造)に着目し、その双極子モーメントと PA を解析した。親分子の構造は HF/6-31G\*レベルで最適化し、その最適化構造における PA を HF レベルの MC\_MO 計算により解析した。MC\_MO 計算では、電子に対して 6-31G\*、陽電子に対して[11s9p4d2f1g]Gauss 型基底を用いた。

## 【結果】

正の PA は、親分子が陽電子を束縛し安定化する事を意味する。本研究で解析した 20 種類のアミノ酸分子では、最安定構造において正の PA が得られたのは、Trp、Gln、His のみであった。一方、HB 構造においては、20 種類全てのアミノ酸分子について正の PA が得られた。Fig.1 に正の PA が得られたアミノ酸分子の双極子モーメントと PA の関係を示す。この図より、アミノ酸分子への陽電子吸着では、双極子モーメントと PA の間に強い相関関係がある事がわかる。陽電子は双極子モーメントが大きな構造異性体に、より強く吸着されると考えられる。

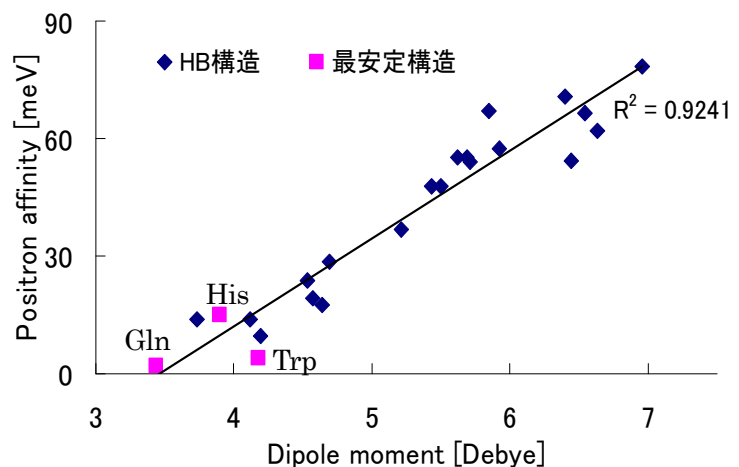


Fig. 1 双極子モーメントと PA の相関図

## 【参考文献】

- [1] 陽電子計測の科学, 日本アイソトープ協会 (1993). [2] O. H. Crawford, Proc. Phys. Soc. **91**, 279 (1967). [3] S. Gronert *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **117**, 2071 (1995) [4] M. Tachikawa *et al.*, J. Chem. Phys. **101**, 5925 (1994).