29p-D1-14

有機物単結晶のテラヘルツ偏光分光スペクトル測定と DFT 計算による分子振動帰属解明

Assignments of vibration modes in terahertz frequency range tried by polarization absorption spectroscopy and DFT calculation of single crystal bio-molecule

静岡大電研　°佐々木 哲朗，木村 寛子，神原 大

Shizuoka Univ. SRI, °Tetsuo Sasaki, Hiroko Kimura, Ohki Kambara

E-mail: tsasaki@rie.shizuoka.ac.jp

はじめに:　分光スペクトル測定と理論計算の対照によるテラヘルツ帯分子振動帰属解析が進められているが、一般的に粉末多結晶試料に対する測定結果の振動周波数値と強度の照合だけでは情報量として十分ではない。今までに我々は、重水素化による周波数シフトを、周期境界条件を考慮した密度汎関数（Density Functional Theory, DFT）計算結果と、低温試料の広帯域分光スペクトル測定結果を比較照合することによって、その帰属を確かめてきた[1]。単結晶の偏光テラヘルツスペクトル測定によれば情報量が３倍となり、計算との比較による振動帰属解析に有利になる。しかしながら、特に広帯域テラヘルツ帯測定には、通常100μm程度以下の比較的薄い単結晶試料が必要となるため、従来の単結晶成長法によって作成した試料を機械的加工により準備するには特殊な研磨や切削が必要となる。そこで、任意の厚さの試料結晶をセル中で、溶液法による単結晶成長し、その試料をセルとともに測定に適用する手法を開発し、斜方晶系結晶構造であるアスパラギン一水和物単結晶に適用することに成功した［2]。この手法を、対照がより複雑となる斜方晶系以外の結晶構造に適用した例を報告する。

結 果:　テラヘルツ透過性の高い樹脂材料（t = 2 mm）2枚を用いて、厚さ30～80μmの空隙を持つセルを作製し、温度差法によってセル中の所定の位置に、単斜晶系結晶構造となるアスパラギン酸の単結晶成長を実施した。単結晶Ｘ線回折(X-ray Diffraction, XRD)極点図測定を適用して面方位を確かめた後、テラヘルツ偏光分光スペクトル測定を適用した。スペクトル測定には、ＧａＰ結晶中の差周波発生による単色光を光源として用いるテラヘルツ分光スペクトル測定装置を利用する。Ｘ線結晶構造からの構造最適化と振動数計算にはDFT計算パッケージCRYSTAL09を用いた。B3LYP/6-31G(d,p)レベルでの計算によって求められた振動周波数における吸収強度を、偏光方向を考慮して比較検討する。

謝辞

Ｘ線回折極点図測定にあたり、スペクトリス株式会社 PANalytical 事業部瀬尾公一氏に感謝します。

参考文献

[1] O. Kambara, et al., Chem. Phys. Lett. 498, 86-89 (2010)

[2] 佐々木 他、第73回応用物理学会学術講演会, 11a-B1 (2012)

© 2013 年　応用物理学会