

密度汎関数法による THF-CH のラマンスペクトルの解析

Density functional theory analysis of Raman scattering of
tetrahydrofuran clathrate hydrate

青学大理工¹, 聖マリ医大² ^{○(M1)}加藤雅洋¹, 松本悟¹, 高嶋明人¹, 高須雄一², 西尾泉¹
Aoyama-gakuin Univ.¹, St.Marianna Univ. Sch. Med.² ^{○(M1)}Masahiro Kato¹, Satoru Matsumoto¹,
Akito Takashima¹, Yuichi Takasu², Izumi Nishio¹
E-mail: kato.m14@nishio-lab.net

近年、日本近海で大量に発見されたメタンハイドレートが石油に代わるエネルギーとして期待されている。それに伴い安価で高密度貯蔵が可能なガス貯蔵材としての応用が期待されるクラスレートハイドレート (以下 CH) にも関心が高まっている。一般的な CH の生成には 220 MPa、249 K といった低温高压の厳しい条件が必要なのに対し、テトラヒドロフラン (以下 THF) をゲスト分子とする CH (以下 THF-CH) は常温常圧付近で CH 構造が形成される。これは、水が THF と相互作用することによって CH 構造が安定化したためであると考えられる。この水と THF との相互作用を詳しく理解することで CH のさらなる生成条件の緩和と安定化が期待できる。本研究では、THF-CH の基礎物性を調べることを目的としており、ラマン分光法による測定を行った。測定の結果、THF 分子の C-C-C-C breathing mode に起因する 910 cm^{-1} 付近のピークが 100 K 以下の温度で分裂することが確認された。これは CH と THF の相互作用によって生じたと考えられる。この結果について、密度汎関数法を用いて水分子と THF 分子のモデル化を行い、それぞれに働く相互作用について考察した。また、THF-CH では 3000 cm^{-1} 付近に OH stretching mode に由来するピークが複数存在し、 3100 cm^{-1} 付近の symmetric stretching mode に対応しているピークが、試料温度を低下させることにより低波数側へとシフトすることも確認された。講演では、これらの結果について詳しく報告する。

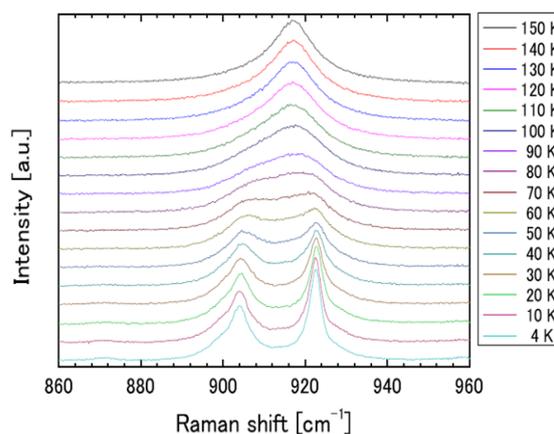


Figure.1 Raman spectra of THF - CH

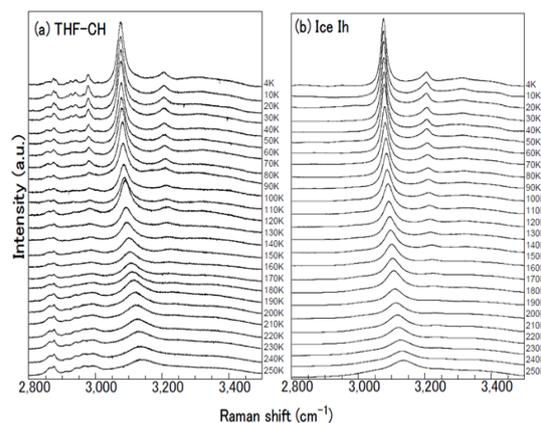


Figure.2 Raman spectra of THF - CH and Ice