

糖類のテラヘルツ波吸収スペクトルシミュレーション

Computational study on terahertz spectra of carbohydrate

○高羽 洋充¹、佐々木 勇人¹、金子 健太¹、大橋 タケル²、佐藤 裕²、高橋 克巳²

(1. 工学院大工、2. IHI)

○Hiromitsu Takaba¹, Yuto Sasaki¹, Kenta Kaneko¹, Takeru Oohashi², Hiroshi Sato²,

Katsumi Takahashi² (1. Kogakuin Univ., 2. IHI)

E-mail: takaba@cc.kogakuin.ac.jp

1. 緒言

糖類は多くの水酸基を持ち、結晶中状態で多くの水素結合を形成することから、テラヘルツ領域で明確な吸収を示すことが知られている。しかしながら、吸収スペクトルは、水素結合配向性の僅かな違いや、温度に影響されると考えられ、分子間相互作用とスペクトルとの関連性については不明な点が多い。本研究では量子化学シミュレーションを用いて、糖類のテラヘルツ帯域における吸収スペクトルシミュレーションを行ない、実測値と計算値の比較を行った。スペクトル再現性、局所構造と振動モードの相関性、についての検討結果を報告する。

2. 計算方法

糖類として、スクロース($C_{12}H_{22}O_{11}$)を対象に検討を行った。スペクトルシミュレーションには密度汎関数法(DFT)に基づく第一原理計算を用いた。スクロース構造モデルとしては Fig.1 に示す単位結晶構造をベースに、格子定数を、各温度における実測値に基づいて変化させて、振動数計算を行った。また、分子間相互作用を改善する分散力補正がスペクトル計算結果に与える影響についても考察した。テラヘルツ波の測定は、IHI 社製テラヘルツ分光分析装置を用いて、スクロースを粉末ペレットにしたサンプルを用いて-175°Cから 25°Cの温度領域で実施した。

3. 結果と考察

Fig.2 に、各温度時における格子定数を用いてシミュレーションした吸収スペクトルを示した。温度上昇に伴い僅かに格子長が伸長することに伴い、3.5THz 付近および 2 THz 付近のピークがレッドシフトしていることがわかる。実測スペクトルでも同様の温度依存性がみられた。また温度が最も近い-175°C(実測)と-130°C(計算値)を比較すると、比較可能な 4 THz 以下の領域において良好に一致

していることが確認できる。また、Fig. 3 に示した分散力補正を用いた密度汎関数法では、実測と大きく異なるスペクトルが得られ、本系では分散力がテラヘルツスペクトルに大きく寄与していないことが示された。

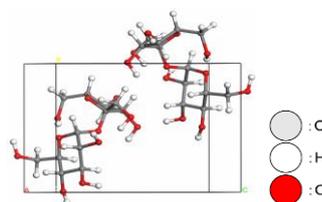


Fig.1 Picture of unit cell of sucrose.

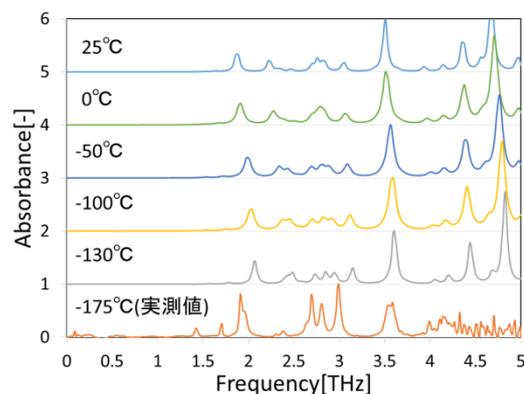


Fig.2 Calculated spectra with measured one.

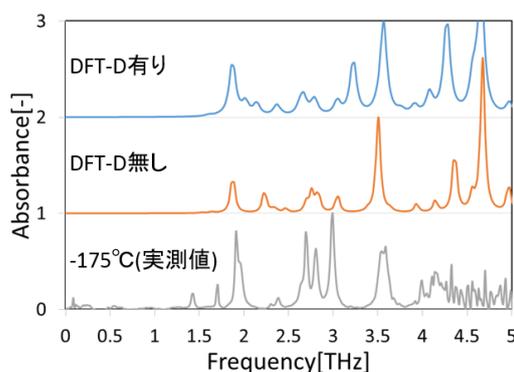


Fig.3 Influence of dispersion correction.