

界面の振動分光学

Vibrational spectroscopy at an interface

京都大学 化学研究所 環境物質化学研究 分子環境解析化学

岡 昂徹

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、Gaussian による振動スペクトルの量子化学計算等を行った。新規化合物の IR スペクトルを帰属するにあたり、構造最適化した分子構造から計算される振動スペクトルを参照して帰属を進めた。本研究では熱転化反応における初期構造・中間体・目的構造の区別を IR スペクトルから行うために詳細な振動バンドの帰属が求められた。具体的には類似化合物の反応経路を参考に生成される中間体化合物を推定し、それぞれの分子構造について構造最適化と振動スペクトルの計算を目的とした量子化学計算を行った。計算したそれぞれの振動スペクトルを比較した結果、振動バンドのわずかなピークシフトや形状変化が認められたため、それらに基づいて実測の IR スペクトルの解析に取り組んだ。計算と実測を比較することで、中間体が混在する複雑な分子凝集構造を解明した。