

界面の振動分光学
Vibrational spectroscopy at an interface

京都大学 化学研究所 環境物質化学研究系 分子環境解析化学 金野 俊

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用い、量子化学計算ソフトウェアアプリケーションである Gaussian を用いて、パーフルオロアルカン(C_nF_{2n+2})の化学分子の構造最適化と振動計算を行い、非調和振動解析に基づいて、2 倍音や 3 倍音に対応する IR スペクトルピークがどの波数位置に現れるか、またそれらの振動モードがどのような特徴を持つかをシミュレーションすることを目的とした。得られた理論スペクトルを、実験データのピーク位置と比較し、倍音ピークを界面での振動解析に利用できる可能性があるかを検討する方針で研究を進めた。

一方で、全領域にわたる非調和振動解析のためには非常に膨大な計算メモリと計算時間を必要となることが明らかであり、計算時間の短縮を目的として SINDO

(<https://tms.riken.jp/research/software/sindo>; <https://github.com/yagiki yoshi/sindo>)

というオープンソースの分子振動プログラムの導入を行なった。

しかし、SINDO 導入後も依然として計算負荷は大きく、加えて研究全体の進行上、その他の研究課題を優先する運びとなったために、この研究は一時中断中である。そのため年度内での外部発表可能な形での研究成果を出す段階には至らず、引き続き他の研究と並行しながら進めていく予定である。

この研究課題以外で新しく、PFAS の物性の構造依存性やフッ素系溶媒を用いた分子間相互作用の定量化手法についての研究を進めており、これらに関しては新年度の主要な研究課題として推進していく所存である。