

第 219 回 化学コースコロキウムのご案内

日時 2013年2月22日(金) 16:00-17:00

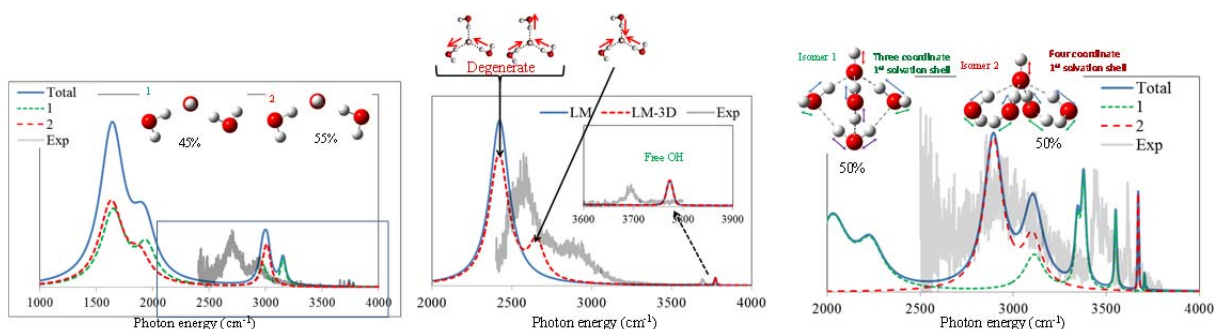
場所 11号館201室

講師 台湾中央研究院 原子分子科学研究所 助研究員 高橋開人 博士

題目 $\text{OH}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$ $n=2-4$ の振動スペクトルに関する理論的考察: $\text{OH}\cdot$ の第一水和数は?

Theoretical study on the broad strongly hydrogen bonded OH stretching peaks of $\text{OH}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=2-4$: Vibrational spectral signatures of the 1st solvation shell structure of hydroxide

要旨 水溶液中の酸塩基反応の理解において、プロトンおよび水酸基 $\text{OH}\cdot$ の水和構造は不可欠である。特に、 $\text{OH}\cdot$ と水の相互作用は通常の水水間の水素結合よりも4倍ほど強く、 $\text{OH}\cdot$ は周辺の水素結合ネットワークに大きな影響を及ぼす。そのため、 $\text{OH}\cdot$ の第一水和数に関してさまざまな研究が行われてきている。水溶液中の計算もさまざまな手法を用いて行われているが、 $\text{OH}\cdot$ の酸素側に水が何個水和しているかきちんとした見解は得られていない。本研究では水の個数が固定された水和クラスター $\text{OH}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$ $n=2-4$ に注目し、その振動スペクトルの計算を行い実験値と比較した。MP2/6-311++G(3df,3pd)を用いて OH 結合に関するポテンシャル関数と双極子モーメント関数を計算し、多次元振動計算を行い、ピーク位置と吸収強度をもとめた。さらに、on the fly dynamics シミュレーションよりピーク幅を理論的にもとめ、これらを用いて振動スペクトルを計算した。水和数によって $\text{OH}\cdot$ は周辺の水の OH 伸縮振動のピーク位置および幅が大きく変化することを示した。さらに、これらのスペクトルが $\text{OH}\cdot$ は周辺の水の情報の色濃く反映することが分かった。今まで気相中の $\text{OH}\cdot(\text{H}_2\text{O})_4$ において、第一水和数は3だと言われていたのに対して、3と4個の混ざったものが実際の実験のなかで存在していることを理論的に示した。



連絡先 分子物質化学専攻 橋本健朗 (3543, hashimoto-kenro@tmu.ac.jp)