

課題名 (タイトル) :

非線形光学感受率の計算

利用者氏名 : ○山口 祥一\*

Sudip Kumar Mondal\*

Ahintya Kundu\*

所属 : \*和光研究所 基幹研究所 田原分子分光研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係：普通の温度では水は液体で、冷やせば固体の氷になり、熱すれば気体の水蒸気になる。これら 3 つの状態 (気相, 液相, 固相) において、水の分子がどのような構造をとっているかは、赤外分光, ラマン分光, X 線回折, 電子線回折などの方法によって研究されていて、もう 50 年以上前から大体のところはわかっている。さて、2 つの相が共存していると、その間には相と相を隔てる「界面」と呼ばれる領域が必ず存在する。この界面には、それ以外の領域 (バルクという) には無い面白い性質があり、広く注目されている。しかし、例えば、界面で水の分子がどういう構造をとっているかがわかってきたのは、実はここ 10 年ほどのことである。この界面の分子構造の研究方法の中で、最も重要なものが「偶数次の非線形レーザー分光」という方法である。これは、界面とバルクをその対称性によって見分けるとても巧みな方法で、我々のグループでは、ユニークで新しい偶数次非線形レーザー分光法を開発して、色々な界面での分子の構造やダイナミクスを研究している。実験結果として得られる界面分子の電子・振動スペクトルから分子構造を決定するには、ガウシアンを用いた分子科学計算がとても役立つ。
2. 具体的な利用内容、計算方法：Gaussian03 と DALTON を用いて、分子集団の構造最適化、振動数計算、励起電子状態計算、分子超分極率計算を行っている。その計算結果と、実験結果を比較することによって、界面分子の構造についての知見を得ている。
3. 結果：実験で利用している分子の超分極率テンソルの成分の値を得た。
4. まとめ：今回の研究によって、界面の面白い性質の一端を示すことが出来た。
5. 今後の計画・展望：界面の多様性に鑑みれば、今後さらに興味深い性質を明らかにすることが出来ると考えている。
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容：数種類の分子について計算を完了した。今後、別の 3~5 種類の分子について、同様の計算を行う。

