

# グローバル COE 講演会報告書

大学院理学研究科 松本吉泰

研究集会名: グローバル COE 特別講演

講演者: Professor Marek J. Wójcik

(Jagiellonian University, Poland)

演題: “Theoretical modeling of vibrational spectra and multidimensional proton tunneling in hydrogen-bonded systems”

場所: 京都大学理学研究科 6号館 472号室

日時: 2012年4月5日 15:30-16:30

参加者: 化学専攻大学院学生、学部生、博士研究員、教員

参加者総数: 約 50名

講演内容:

水素結合は生体を含む様々な分野できわめて重要な役割を果たしている。本講演では、水素結合系における X-H(D)伸縮振動に着目し、その理論的取り扱いが主たる課題であった。前半は高振動数の X-H(D)伸縮振動と分子間の低振動モードとの結合を断熱的に取り扱い、二つの等価な水素結合間の共鳴的相互作用、Fermi共鳴、非調和結合などを取り込んだ計算により、実験結果が妥当に再現できることの紹介があった。後半は、 $\beta$ -oxalic 酸、トロポロンなどといった分子や錯体における多次元のプロトントンネルの理論的取り扱いについての紹介があった。量子化学的に計算された2次元ポテンシャルエネルギー面をフィッティングにより解析的に求め、このポテンシャルエネルギー面でのプロトンのダイナミクスを計算した。このモデルポテンシャルを用いることにより、分子の面内モードを励起することにより、プロトン移動が加速される反面、面外のモードを励起するとそれが減速されることを見いだした。この計算結果は実験的に得られたスペクトルをよく再現するものであった。セミナーではこれらの水素結合系のダイナミクスとその理論的取り扱いの妥当性について議論した。

