

水溶性ビタミンのテラヘルツ振動の特性

¹東北大農、²東北大院農

○丁小萌¹、樊欣熠²、岡村暢之²、高橋まさえ²

Properties of THz vibrations in Water-Soluble Vitamins

○Xiaomeng Ding¹, Xinyi Fan², Nobuyuki Okamura², Masae Takahashi²

¹Faculty of Agriculture, Tohoku University, Japan

²Graduate School of Agricultural Science, Tohoku University, Japan

【序】ビタミンは水溶性ビタミンと脂溶性ビタミンに大別される。水溶性ビタミンには多種多様な分子間水素結合が存在しており、水素結合の伸縮振動を観察する良い対象と考えられる。我々は、極最近、THz 振動のひとつの特性として、温度依存性をもとに、非調和性と分子間水素結合の関係について報告した[1]。今回は、5 種の水溶性ビタミンの THz 振動について温度依存性、線幅、モル吸光係数などのスペクトル特性を定量的に調べた。

【方法】THz 分光測定は、Bomem DA-8 フーリエ変換赤外分光装置を、低温測定には、クライオスタット (OPTISTAT-CF, Oxford Instruments, plc.) を用いた。測定分解能は、77

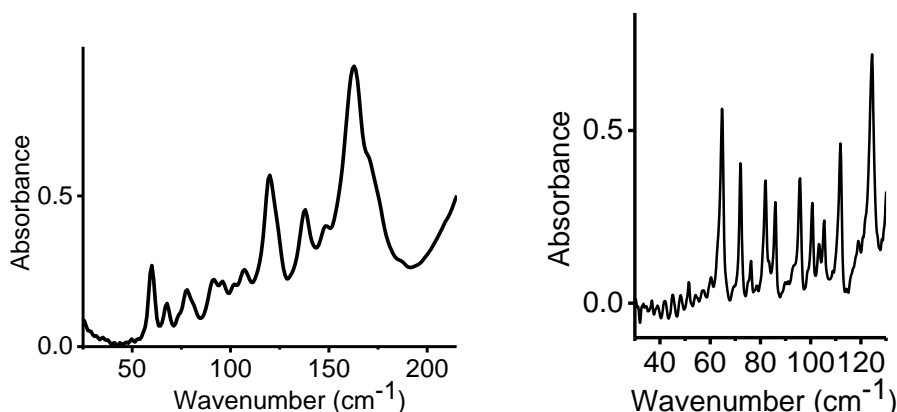


Fig. 2. THz Spectra of Ascorbic Acid at Room Temperature (left) and 77 K (right).

K と 14 K では 0.5 cm^{-1} 、室温では 2.0 cm^{-1} で行った。モル吸光係数は室温のピークの高さから求め、室温スペクトルは複数回測定し、再現性を確認した。ペレットの膜厚測定には LITEMATIC VL-50A (Mitutoyo) を使用した。THz スペクトルの振動解析のために、CASTEP code (ver.8.0) を用い、平面波基底密度汎関数理論 (DFT) 計算を PBE/ノルム保存擬ポテンシャルで行った。分散補正には Tkatchenko-Scheffler (TS) 法を、振動解析には有限変位法を用いた。半値全幅は ローレンツ関数を使って求めた。

【結果・考察】図 2 にはアスコルビン酸の室温と 77 K の THz スペクトルを示す。温度を下げると、ピークは鋭くなり、高波数側にシフトし、いくつかの新たなピークが現れた。分散補正平面波基底 DFT 計算を用い THz ピークを同定した結果、低波数領域 (130 cm^{-1} 以下) のピークは主に分子間の並進及び回転のモードであることがわかった。分子間水素結合の伸縮振動は分子間並進及び回転モードとともに現れ、 $50\text{--}90 \text{ cm}^{-1}$ に観測される弱い水素結合の伸縮振動は鋭い半値全幅と $4\text{--}10 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ のモル吸光係数を持つことが分かった。

【参考文献】 [1] M. Takahashi, N. Okamura, X. Fan *et al.* *J. Phys. Chem. A* **121** 2558 (2017).