

課題名 (タイトル) :

高分子低周波振動スペクトルの量子化学計算

利用者氏名 : ○保科 宏道*, 鈴木 晴*, 尾崎 幸洋*, 大西 絵里香*

所属 : *仙台支所 テラヘルツイメージング研究チーム

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

テラヘルツスペクトルには高分子高次構造の振動スペクトルが現れるため、その解析から高分子構造の詳細や、高分子物性の起源となるダイナミクスを明らかにできる可能性がある。本課題では高分子のテラヘルツスペクトル計算手法の確立を目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題ではテラヘルツ吸収スペクトルの振動モードのアサイメントのため、分子断片化法によりテラヘルツ周波数帯の振動周波数の量子化学計算をおこなう。そのさい、プログラム上から Gaussian09 を呼び出す。また、市販の結晶構造解析ソフト Crystal09 による計算も行い、結果を比較する。

3. 結果

これまで、本研究グループでは、分子断片化法プログラムとガウシアンをローカルの計算機上で実行してきた、今年度はこの計算のうち、ガウシアンの計算を RICC に移行することで、どの程度の高速化が可能になるか、ナイロンを対象として、いくつかの計算を用いて試みた。

4. まとめ

今年度は年度の途中から RICC の仕様を開始したため、RICC を用いた計算の研究体制が整っておらず、まだほとんど活用できていない。そのため、いくつかの試験的な計算を行ったに過ぎない。

5. 今後の計画・展望

来年度 (平成 25 年度) から、本格的に Gaussiann をつかった低周波数振動スペクトルの計算を試みる。