

# 28AB-am286

テオフィリン及びイソニアジドの単結晶成長とテラヘルツ振動解析

○佐々木 哲朗<sup>1</sup>, 大塚 誠<sup>2</sup>, 坂本 知昭<sup>3</sup> (静岡大電研,<sup>2</sup>武蔵野大薬,<sup>3</sup>国立医薬品食品衛生研)

**【目的】** 中赤外線帯域で観測される分光吸収スペクトルは原子の局所振動に対応することに対して、テラヘルツ (THz) 帯域に現れるスペクトルは分子の骨格振動や分子間振動に対応するので、分子あるいはその結晶に固有のスペクトルとなる。この特徴を用いると、THz 帯の一つの吸収線に着目して高速に物質の識別や空間分布を求めることも可能である。しかしながら、THz 帯域は中赤外線帯域と比べるとスペクトルデータベースも整っておらず、それらの振動の帰属も未だほとんど解明されていない。本報告では、THz 帯分子振動の異方性を利用した振動モード帰属解明手法を提案する。

**【方法】** 有機分子単結晶に対する偏光分光スペクトルと密度汎関数を用いた量子化学計算による振動数計算結果を照合して、これらの帰属解明を進めている。今回、テオフィリンおよびイソニアジドについて、THz 測定に適する特殊形状の単結晶成長を行い、この結晶に対する偏光分光スペクトルと密度汎関数理論 (DFT) を用いた量子化学計算による振動強度の結果を照合することで THz 帯振動帰属解析を実施した。尚、THz 分光スペクトル測定には、自作の連続波 ガリウムリン (GaP) THz 分光スペクトル測定装置 (帯域 0.5~5.9THz、精度 10MHz 以下) を用いた。

**【結果及び考察】** 水溶液からの温度差法により成長して得られた単結晶の一部を粉碎し、粉末 X 線回折によりその結晶形を確かめるとともに 70~300K の温度範囲で THz 分光吸収スペクトル測定を適用した。更に、単結晶に対する X 線回折極点図測定から結晶方位を確認し、THz 偏光分光測定によってそれぞれの方位にする分子振動を分離し、それらの振動周波数と振動強度を比較した。発表ではそれぞれの分子の具体的な振動モードについて議論する。