





図1. グルコース(上)とグルコース4水和体(下)の遠赤外振動スペクトルの計算結果。矢印はグルコース分子内振動モードを示す。

同様に、トレハロースについても、無水体と2水和体について、構造最適化と振動解析の計算を行った。無水トレハロースの基準振動モードの計算結果からは、テラヘルツ領域の複雑なスペクトルが得られた。しかし、水和体になると、多くのモードはその赤外吸収の強度が著しく減少した。実測のトレハロース2水和体テラヘルツスペクトルでは、 $100\text{ cm}^{-1}$  から  $200\text{ cm}^{-1}$  の領域のシグナルは、ブロードで複雑な微細構造を持っており、解析が困難である。 $100\text{ cm}^{-1}$  以下には、水分子由来のシャープなピークに加えて、2本の分子内振動と考えられるピークが観測された。トレハロース2水和体の計算でも、この領域には2本の比較的強度の強いピークが得られた。

固体のテラヘルツスペクトルには、分子内振動、分子間振動に加え、結晶を形成していることによる格子振動のモードを考慮する必要があるが、今回は、分子に着目して解析を行った。本試料に関しては、分子および、その水和体分子を考慮することで、実測されたスペクトルを比較的よく説明できた。当日は単結晶の偏向テラヘルツスペクトルについても議論する。

**【謝辞】** テラヘルツスペクトル測定データは、東北大学電気通信研究所伊藤弘昌教授、理化学研究所フォトダイナミクス研究センター石川陽一研究員に協力提供して頂いた。また、トレハロース結晶試料は、三重大学橋本教授、亀岡教授、林原生物化学研究所茶園博士に作成して頂いた。

#### 【参考文献】

- [1] M. Takahashi, Y. Ishikawa, J. Nishizawa, H. Ito, *Chem. Phys. Lett.* **2005**, *401*, 475.
- [2] E. Hough, S. Neidle, D. Rogers, P. G. H. Troughton, *Acta Cryst.* **1975**, *B 29*, 365.
- [3] G. M. Brown, D. C. Rohrer, B. Berking, C. A. Beevers, R. O. Gould, R. Simpson, *Acta Cryst.* **1972**, *B28*, 3145.