

水素結合形成状態に依存した水分子の振動強結合状態評価

(北大理¹・北大院理²・JST-さがけ³) ○岩佐 敦己¹・板谷 昌輝²・福島 知宏^{2,3}・村越 敬²

Evaluation of Vibrational Strong Coupling of Water depending on Hydrogen Bonding Network (¹Faculty of Science, Hokkaido University, ²Department of Chemistry, Faculty of Science, Hokkaido University, ³JST-PRESTO) ○ Nobuki Iwasa,¹ Masaki Itatani,² Tomohiro Fukushima,^{2,3} Kei Murakoshi²

The hydrogen bond network of water depends on the molecular environment such as the presence of solutes and temperature. In this study, we evaluated vibrational strong coupling state of water as a function of temperature. We investigated that homogeneous broadening of the vibrational mode can lead to a single or a small number of pairs of polaritonic states even in the presence of the complex hydrogen bonding network.

Keywords : Vibrational Strong Coupling; Water; Hydrogen Bonding.

【序論】水の OH 伸縮振動は水素結合状態に応じて複数種類に分類することができ、溶質や温度変化などに応じて水素結合ネットワークが鋭敏に変化する。水の振動モードと共振器の光学モードが近接することで発現する振動強結合は、水の関与する化学反応や溶媒和などの分子物性制御が実現する。本研究では Fabry-Perot 共振器を用いて OH 伸縮振動と振動強結合状態として、*in-situ* で温度を変化させ赤外分光計測および解析を行った。

【実験】CaF₂ 基板に Ti 2 nm、Au 8 nm、SiO₂ 20 nm を蒸着し、向かい合わせにすることで Fabry-Perot 共振器を作製した。共振器内に水を注入し、共振器長を制御した。恒温槽を用いて 10°C から 40°C の範囲で昇温速度を 0.8°C / min.、降温を 0.4°C / min. で温度制御に同期して赤外分光計測を行った。

【結果と考察】Figure に温度制御に同期した赤外分光透過スペクトルの 2 次元プロットを示す。セルの温度制御に伴い共振器長は 3.3 μm から 3.6 μm の間での可逆的な変化が確認された。10°C と 40°C での赤外分光測定透過スペクトルでは、4000 cm⁻¹ より高波数側の領域において共振器モードに由来するピークが観測され、3400 cm⁻¹ 近傍に 3 次の共振器モードと結合した振動強結合に由来する 2 準位のポラリトンが観測された。超強結合状態の形成に伴い、水分子の振動モードが水素結合ネットワーク強度に依存して均一広がりを変調する可能性が示唆された。以上の検討から温度変調によって、水素結合ネットワークの変化に依存した振動強結合状態の評価が可能となることが示された。

【参考文献】T. Fukushima *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, **2021**, *125*, 46, 25832-25840.

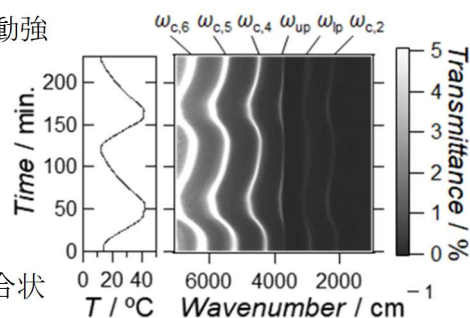


Figure. Temperature dependence of the IR transmission spectrum of water in cavity. ω_c is Cavity Mode and bond order. ω_{up} and ω_{lp} are upper and lower polariton.