

量子化学計算による銅フタロシアニンのラマンスペクトル帰属

実測とシミュレーションの組み合わせにより、詳細なピーク帰属が可能です

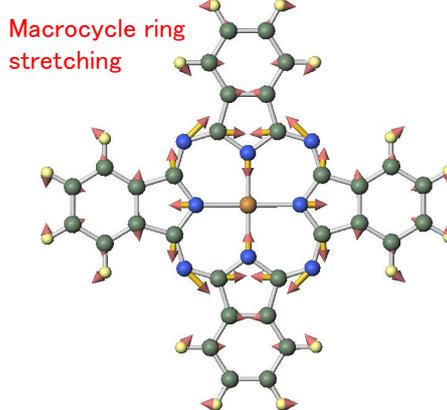
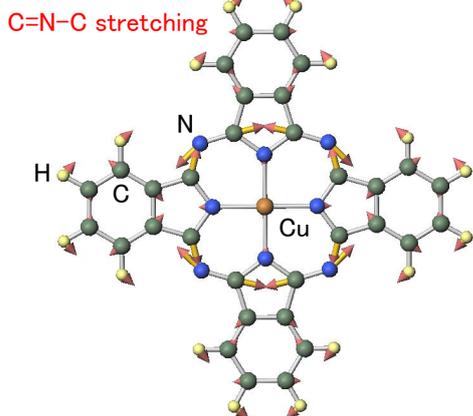
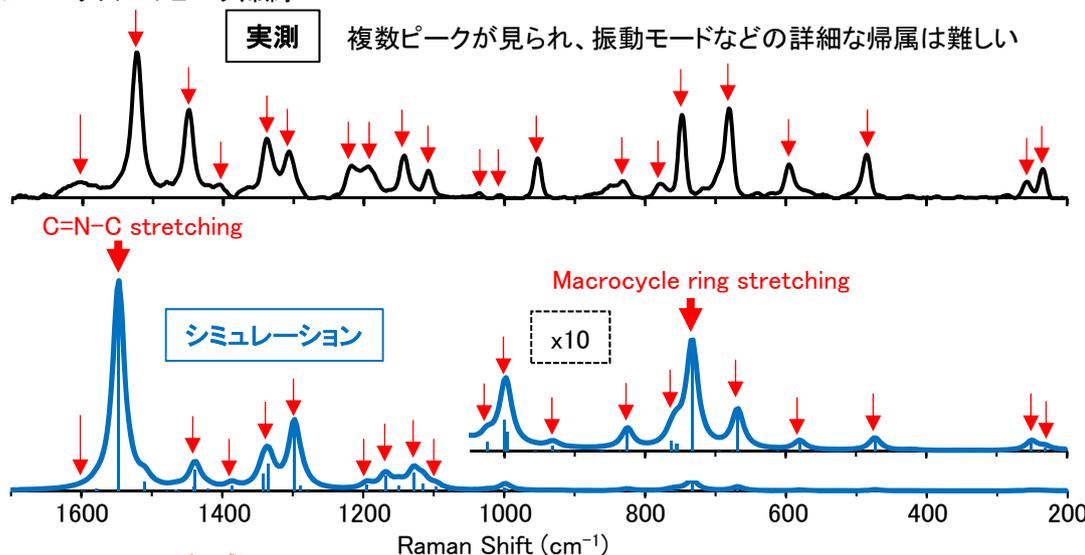
測定法 : 計算科学・AI・データ解析、Raman
 製品分野 : ディスプレイ、電子部品、日用品
 分析目的 : 化学結合状態評価、構造評価

概要

有機デバイスの性能を決める重要な要因として構成分子の構造、分子配向、凝集構造などがあり、これらの知見を得るためにラマン分光法は有効です。しかし分子構造が複雑な試料ではスペクトルの解釈が困難となります。実測と量子化学計算によるシミュレーション結果との比較からスペクトル帰属を行うことで、振動モードの解析が可能です。この解析から化学結合の種類、構造等の知見が得られます。本資料では有機薄膜トランジスタ等への活用も期待される「銅フタロシアニン」の解析事例を紹介します。

データ

■ ラマンスペクトルのピーク帰属



※実測ピークと、対応するシミュレーションピークを赤矢印で示す
 ※ブロードニング前のシミュレーションピークを青縦線で示す
 ※シミュレーションスペクトルの縦軸はRaman activity($\text{\AA}^4/\text{AMU}$)

Point シミュレーション結果との比較から
 実測スペクトルのピーク(振動モード)の
 詳細な帰属が可能となり、分子の化学結合
 の種類、構造等の知見が得られます

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp
 URL : <https://www.mst.or.jp/>