量子化学計算による色素分子のUV-Visスペクトルシミュレーション

UV-Visスペクトルシミュレーションにより分子の電子的性質が調べられます

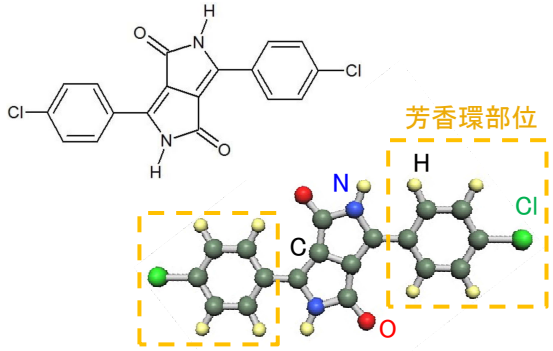
測定法　：計算科学・データ解析、UV-Vis
製品分野：照明、ディスプレイ、化粧品、日用品
分析目的：化学結合状態評価

概要

ピグメントレッド254(*p*-Cl DPP)は鮮明な赤色を呈するDPP(ジケトピロロピロール)顔料の一種です。DPP顔料は優れた耐候性を有する赤色顔料として用いられ、さらに大量生産しやすく低コストのため有機EL材料としての活用も期待されています。本資料では溶液中のピグメントレッド254を対象に量子化学計算に基づくUV-Visスペクトルシミュレーションを実施した事例を紹介します。シミュレーション結果を参照することで、実測データのスペクトル形状を解釈することができます。

データ

■ シミュレーション対象



ピグメントレッド254 (*p*-Cl DPP)の分子構造

【UV-Visスペクトルシミュレーション条件】

溶質分子：ピグメントレッド254 (*p*-Cl DPP)
※芳香環部位は溶液中で自由度を持つため、平面構造に加え、五員環に対し芳香環が45度回転した非平面構造(角度固定)についても計算を実施しました

溶媒分子：ジメチルスルホキシド (DMSO)
※誘電体分極連続体モデルを適用

計算方法：時間依存密度汎関数 (TD-DFT) 法

■ 結果と考察

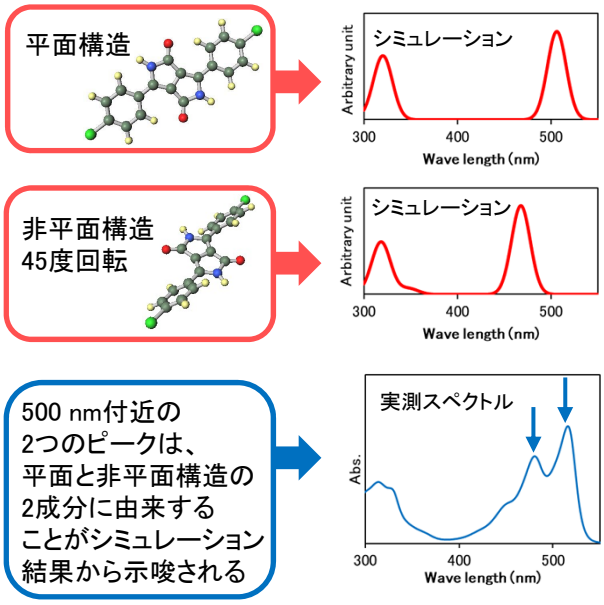
●シミュレーション結果と実測データの比較から、溶液中において平面構造に加えて、芳香環が45度程度回転した非平面構造の共存が示唆された。

●芳香環の回転による分子の平面性の変化に伴い、π電子の共役長が変化することで吸収波長のシフトが生じると考えられる。

✔ **溶媒の効果を考慮したUV-Visスペクトルシミュレーションを行うことができます。**

✔ **シミュレーション結果を参照することで、実測スペクトルの形状を解釈し、分子の電子的性質の知見が得られます。**

✔ **データベースに無い新規材料分子に対しても、候補構造からシミュレーションを行えます。**



シミュレーション結果と測定結果の比較

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/