

密度汎関数計算に基づく遠赤外吸収分光法を用いたポリイミド薄膜のコンホメーション解析

(東工大理工) ○岡田朋大・安藤慎治

ビフェニルテトラカルボン酸二無水物から合成される全芳香族ポリイミド(PI)の構造解析を目的として, そのモデル化合物について, 実測の遠赤外(Far-IR)吸収スペクトルと密度汎関数(DFT)計算から得られた吸収スペクトルの比較を行い, $650\sim 200\text{cm}^{-1}$ 領域の吸収ピークがモデル化合物のコンホメーション (ビフェニル構造とイミドベンゼン環の二面角) に依存して大きく変化することを見出した. また, $<200\text{cm}^{-1}$ の低波数領域において分子間距離を考慮することで実測の Far-IR スペクトルが DFT 計算により精度良く再現できることを明らかにした. これらの知見を基に各種 PI 薄膜の実測 Far-IR スペクトルを解析し, 酸二無水物部のビフェニル構造の二面角が共平面かつ直線的な構造($\phi=180^\circ$)を有していることを明らかにした.

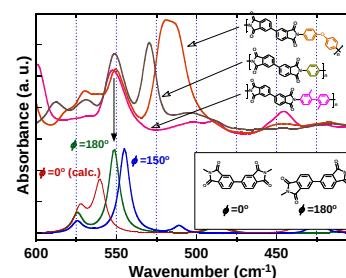


Fig. (上)PI 薄膜の実測と(下)モデル化合物の密度汎関数計算 Far-IR スペクトル.