

自然科学系 教授

梅林 泰宏 UMEBAYASHI Yasuhiro

専門分野

溶液化学、分析化学、電気化学

環境・エネルギー

Raman分光と誘電緩和分光の二次元相関解析

キーワード Raman分光、誘電緩和分光、相関係数、

研究の目的、概要、期待される効果]

私たちは、Raman分光法と誘電緩和分光法(DRS)を組み合わせ、高速イオン伝導を示す新規電解液に適用することで、そのイオン伝導機構の解明を目指しています。DRSは、溶液中の溶媒分子やイオン対の構造や局所的な回転ダイナミクスを評価するのに有用な手法です。しかし、誘電緩和スペクトルにおける溶存化学種に対応する緩和の帰属は困難であり、溶液中の構造とダイナミクスの理解には制約があります。

誘電緩和スペクトルにおける緩和の帰属を明確にするため、Raman分光と誘電緩和分光の二次元相関解析を実施しました。具体的には、与えられた周波数における ϵ'' の濃度依存性と、与えられた波数におけるRaman強度の濃度依存性に関してPearsonの相関係数を求めるとともに、Noda-Ozakiの二次元相関同期・非同期解析を行いました。Pearsonの相関係数は、線形最小二乗法(回帰分析)によるGoodness of fitの指標であり、-1から1の範囲を取ります。線形関係が強いほど、その絶対値が大きくなります。一方、Noda-Ozakiの二次元相関解析における同期相関はPearsonの相関と類似していますが、非同期相関は強度の変化の仕方に差がある場合に強くなります。

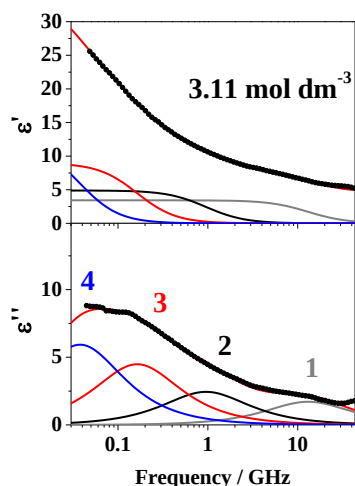


図1. 誘電緩和スペクトルのDebye緩和の重ね合わせフィッティング

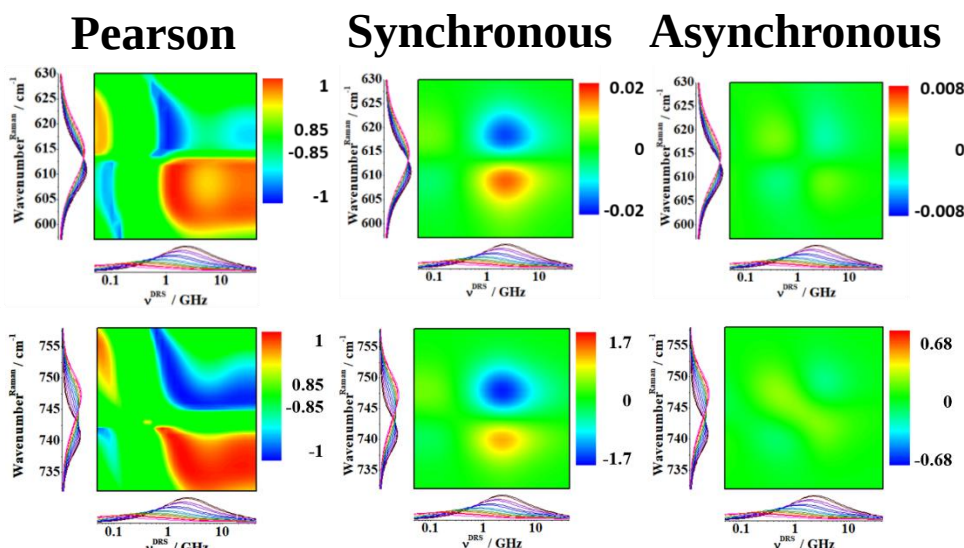


図2. 溶媒(上)と陰イオン(下)由来のRamanスペクトルと誘電緩和スペクトル(DRS)の二次元相関分析。赤と青色はそれぞれ正と負の相関が強いことを意味する。

アピールポイント

二次元相関解析は、他の分光スペクトルにも適用可能であり、分光スペクトルの動的変化をより明確に捉えることができる。

つながりたい分野(産業界、自治体等)

- ・混合物のスペシエーションを目的としている方

参考文献

Faraday Discuss., 2024,253, 42-54