

Title	芳香属系高分子材料の構造解析
Author(s)	野村, 亘
Citation	
Issue Date	1996-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2305
Rights	
Description	材料科学研究科, 修士

芳香属系高分子材料の構造解析

野村 亘 (佐々木 研究室)

【はじめに】

芳香属系高分子は強度や耐熱性に優れた高性能材料としてだけでなく、導電性などの点で高機能材料として注目されている。ところが、一般に分子鎖が剛直なために熔融性・溶解性が悪く構造解析に適した配向試料を得ることは困難である。このように重要な物質でありながら解析が困難な芳香属系高分子の構造を明らかにすることは機能化のための指針を探るためばかりでなく方法論の上からも意義がある。本研究では、導電性高分子の1つとして合成された poly(thiophene-*alt*-2,3,-diphenylquinoxaline)(PTQ) について結晶構造解析を行った。

【実験】

試料は山本隆一氏（東工大）によって提供された。粉末 X 線測定は透過法と反射法を用いた。試料は粉末状で結晶化度が低く、解析に十分な回折データを得るためいくつかの工夫を施した。

【解析】

非結合原子間相互作用の計算より、内部回転角 ϕ_1 は 60 °から 120 °の間に、内部回転角 ϕ_2 は 45 °から 90 °の間にあると考えられた。また、X 線回折から面間隔が 15.8₆、7.93、5.29、3.94 Å の回折が観測され、これらの比が 1 : 1/2 : 1/3 : 1/4 であることより、c 軸 (分子軸) 方向に 2 モノマー分の長さ 15.8₇ Å の周期構造が示唆された。密度を考慮するなどして、これらの反射は子午線反射であると帰属された。他の回折は赤道線反射として格子定数 $a=10.0_6$ Å、 $b=6.83$

Å、 $\gamma = 113^\circ$ の単斜晶系単位格子で説明された。実測強度より、分子軸方向から見た電子密度分布を推定した。これから、分子は平面的な構造をしていることが分かった。基本的な繰り返し単位は 31.7 Å で、4 モノマー単位を含む。PTQ の結晶構造の模式図を図 1 に示す。回折線の現れ方から、平面的な分子鎖が積層しており、積層の乱れや分子軸方向の位置の乱れがあることが分かった。

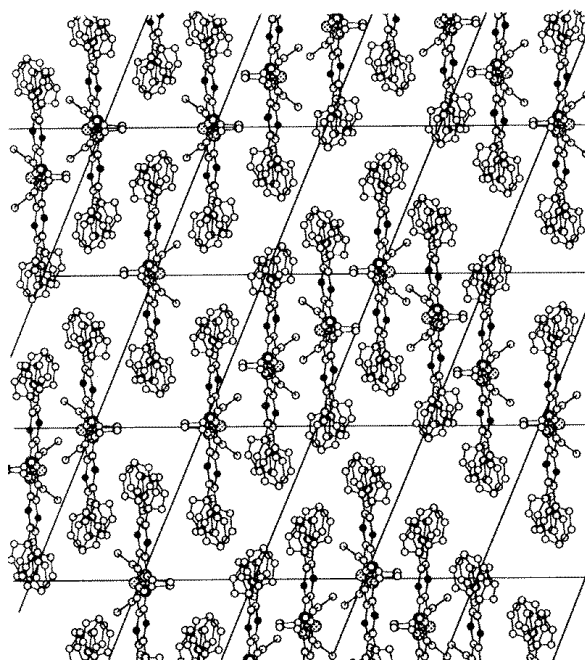
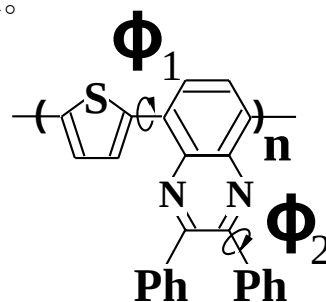


図 1: PTQ の結晶構造 (c 軸に垂直な断面の模式図)



PTQ

keywords

芳香属系高分子、導電性高分子、結晶構造、X線解析、エネルギー計算