

Title	テトラチアフルバレンユニットを主鎖に有するくし形 高分子の構造解析
Author(s)	高木, 謙太郎
Citation	
Issue Date	2000-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/2664">http://hdl.handle.net/10119/2664</a>
Rights	
Description	Supervisor: 佐々木 伸太郎, 材料科学研究科, 修士

# テトラチアフルバレンユニットを主鎖に有するくし形高分子の構造解析

高木 謙太郎 (佐々木研究室)

## 【はじめに】

導電性高分子では  $\pi$  共役基間の相互作用が機能に影響するものと考えられる。 $\pi$  共役基の相互の位置関係および材料としての加工性に影響を与えるものとして、側鎖による化学修飾がある。本研究では、テトラチアフルバレン (TTF) ユニットの主鎖骨格とし側鎖に *n*-hexyl 基および *n*-decyl 基を有する高分子 (以下、PTTF6 および PTTF10 と記述) について、X 線回折法により構造を推定した。

## 【実験】

無反射 Si 板に定着した微量の粉末試料を用いて測定した粉末回折計 (CuK $\alpha$  線) による散乱強度曲線と、イメージプレートを用いて測定した回折図形からの変換曲線を合わせて、各種の補正ののち散乱曲線を得た。モデル構造の散乱曲線のシミュレーションには Linked-atom Rietveld 法を用いた。

## 【結果】

PTTF6 と PTTF10 は層構造をとることがわかった。層構造の間隔  $d_1$  に相当する反射が小角に観測されたが、stack した分子面間の間隔  $d_2$  に相当する反射は見られず、 $2\theta \sim 20^\circ$  付近にはアモルファス性の散漫な散乱が見られた。これより主鎖の積層および側鎖の凝集状態にあまり秩序性はなく、実測密度および分子モデルから  $d_2 = 3.6 \sim 4 \text{ \AA}$  と推定した。分子軸方向の周期  $c$  も分子モデルから  $8.34 \text{ \AA}$  と推定した。 $d_1$  対 アルキル炭素数のプロット (図 2) では傾きは約  $1.6 \text{ \AA}$  であった。層構造において側鎖が層面法線方向から平均的に  $\phi$  だけ傾いて出ているとき (図 3)、側鎖一本当たりに許される断面積は  $cd_2 \cdot \phi$  である。この面積は最大 ( $\phi = 0$  のとき) でも、およそ  $30 \text{ \AA}^2$  である。アルキル鎖の有効断面積は約  $20 \text{ \AA}^2$  なので、隣接層との間で側鎖どうしの割り込み (interdigitation) が起こるには不十分である。したがって、側鎖の配置が end-to-end 型で密に凝集するには  $\phi \sim \cos^{-1}(20/30) \sim 50^\circ$  となる。このとき、 $d_1$  対 アルキル炭素数のプロットの傾きは  $2 \cdot 1.25 \cdot \cos(50^\circ) \sim 1.6 \text{ \AA}$  となり、図 2 の結果と一致する。散乱曲線のシミュレーションを行ない、実測曲線と比較した。

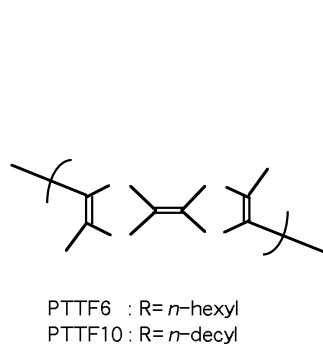


Fig. 1. Structure of PTTFs.

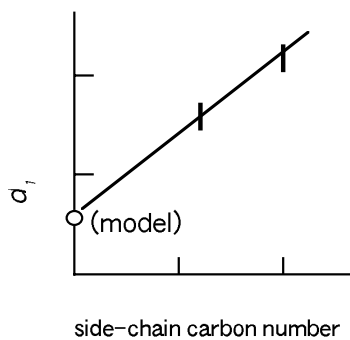


Fig. 2. Spacing of layered

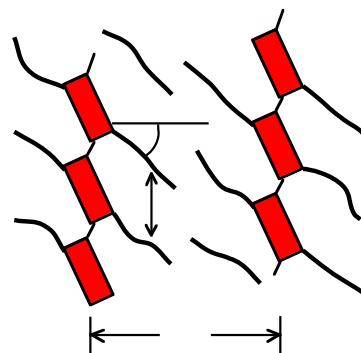


Fig. 3. Layered structure.

keywords

テトラチアフルバレン, X 線解析, Linked-atom Rietveld 法