

Title	チオフェン系導電性高分子のX線構造解析
Author(s)	前原, 一宣
Citation	
Issue Date	2001-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2763
Rights	
Description	Supervisor:佐々木 伸太郎, 材料科学研究科, 修士

はじめに】導電性を目指した高分子の中でもチオフェンユニットを含む高分子は化学的に安定で数々の研究報告がある。これらの高分子は剛直な分子構造のため加工性に問題があり、側鎖付与や共重合などの化学修飾が行われている。本研究では、poly(thiophene-*alt*-2-*n*-alkylbenzimidazole-4,7-diyl) (Th-Bimx): アルキル基の炭素数 = 5, 7, 10, 18)、poly(thiophene-*alt*-thiophene-1,1-dioxide) (TTO)、poly((bi)thiophene-*alt*-2,6-diphenyl-tetrathiafulvalene-3,7-diyl) (P(Th(-Th)-TTF))の構造

【試料・方法】試料は山本隆一氏（東工大）より提供された。対称反射光学系の粉末X線回折計(Cu K α)を用い積算測定を行った。試料の密度は浮沈法により25°Cで測定した。解析には、Linked-atom Rietveld法を用いた。この方法は標準的な結合長・結合角を用いて構築したモデルを基にX線散乱曲線計算し、これを実測曲線に合うように最適化する方法である。

【結果・考察】PTTOの解析の結果、平面骨格形態の分子($c = 0.770\text{nm}$)が 1.7mg ことが分かった(図1)。赤道線反射を用いて計算した散乱曲線と実測曲線の一致は、不純物によると思われる鋭い回折線を除けば非常によいものであった。計算密度は 1.7g/cm^3 であるが、分子軸方向には位置の乱れがある。

Th-Bimx'sでは層構造に由来する回折が低角に観測された。その面間隔(a_1)の x に対するプロット(図2)から、メチレン基1個あたりの増分は約 $a = 0.14\text{nm}$ 、 $x \rightarrow 0$ に外挿した主鎖層の厚さは $a_0 \sim 1.2\text{nm}$ であった。密度より推したモノマー単位あたりの体積を v_1 で割ることにより、層の面でモノマー単位あたりに割り当てられた面積は 0.19nm^2 と見積もられた。これより $a = \sqrt{v_1}/0.19 = 0.14\text{nm}$ となり実測と一致した。P(Th-Bim18)の一連の反射強度から層の面に垂直な方向の電子密度分布を求めた。(Th-Bim-Th)ユニットをつの大きな結合と見なしたとき、

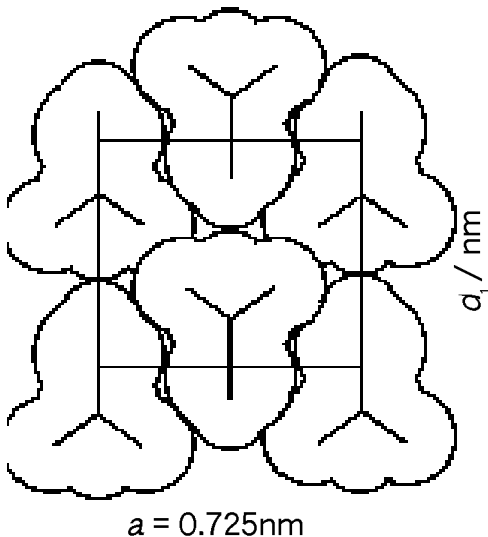


Fig. 1. Packing model of PTTO.

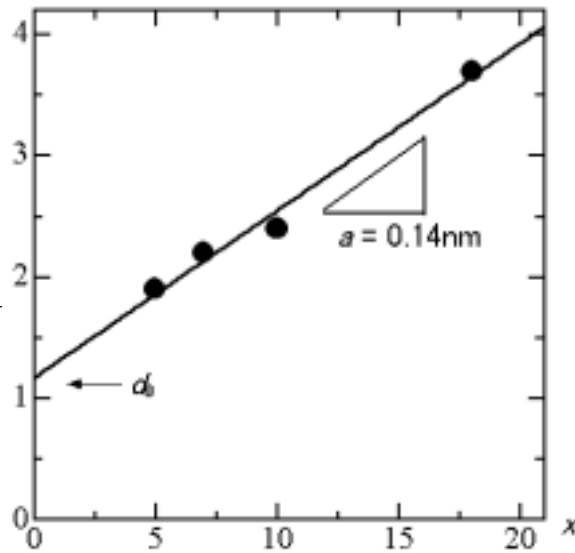


Fig. 2. Dependence of layer repeat distance on the side-chain carbon number.

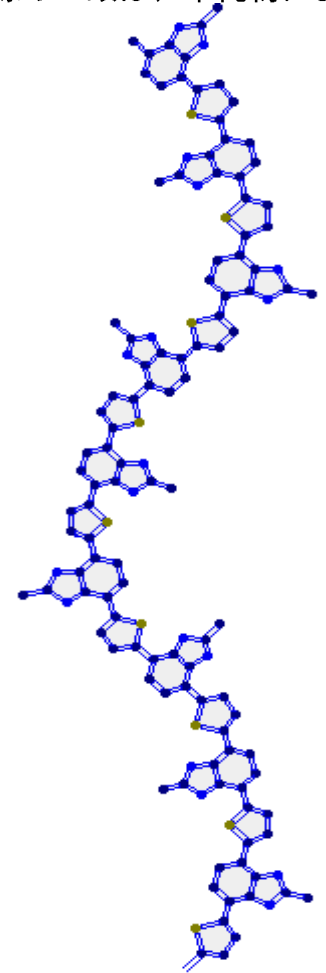


Fig. 3. A model of P(Th-Bimx)

Keywords 導電性高分子, チオフェンコポリマー, X線解析, Linked-atom Rietveld法