

## 化学反応と電子物性に関する理論的研究

## Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

工学研究科分子工学専攻量子機能化学講座 笛野 博之

## 背景と目的

近年、人間に近い柔らかな動きをする家庭用ロボットの開発にあたり、柔軟に伸縮可能なソフトアクチュエーターとして導電性高分子は優れた材料である。本研究では結晶軌道法解析により、ポリピロール鎖間にアニオンをドーブした際の鎖間距離の伸縮に伴って発生する力を理論的に求めた。

## 結果と考察

ソフトアクチュエーターの負荷特性についての伸縮挙動を表すため基本式[1]に従い、当該高分子材料の長さ、電解伸縮長さ（アニオンがドーブされたときの伸縮長さ）より電解伸縮長さをもたらすために必要なエネルギー $\Delta W$ 、機械的出力エネルギー $E_{Mout}$ を求めた。これらの値を見積もるため、Gaussian09 を用い B3LYP/ 6-31G\*\*法による結晶軌道計算を行った。

ドーブされるアニオンとして TFSI (トリフルオロメタンスルホニルイミド) を用いた。ポリピロール 2 本鎖モデル **A** (単位セルはテトラピロール)、面間に TFSI 分子 1 個がドーブされたときの安定構造 **B** を求めた。

(Fig. 1) TFSI の Mulliken 正味電荷は  $-0.815$  であって、アニオン性はかなり強い。

モデル **A**、**B** の平均面間距離及びその差  $\Delta d_{av(A-B)}$ 、

TFSI が挿入された安定構造から TFSI を除いたピロールモノマー当たり

Table 1 Calculated data for anion drive.

$d_{av(A)}$ (in Å)	$d_{av(B)}$ (in Å)	$\Delta d_{av(A-B)}$ (in Å)	$F$ (in dyn)	$\Delta W$ (in Hartree)	$E_{Mout,max}$ (in J kg <sup>-1</sup> )
5.4092	10.8510	5.3614	$4.1202 \times 10^{-6}$	$2.0260 \times 10^{-2}$	$2.5543 \times 10^4$

の発生力  $F$ 、エネルギー差 $\Delta W$ 、及び収縮に伴う単位重量当たりの機械的出力エネルギーの最大値  $E_{Mout,max}$  を求めた。(Table 1) 本研究で得られた  $E_{Mout,max}$  は  $10^4 \text{ J kg}^{-1}$  のオーダーであり、実験で報告されている最大値  $9.2 \times 10^{-1} \text{ J kg}^{-1}$  [2] よりかなり大きい、実験からも構成の改良に伴って比較的容易にオーダーを改善できるものであり、本研究における値はある種の上限值を与えるものと考えられる。

## 参考文献

[1] G. M. Spinks and V.-T. Truong, *Sensors and Actuators A*, **119**, 455 (2005).

[2] 生嶋君弥, J. Stephen, 小野敦, 長光左千男, *Panasonic Tech. J.*, **56**(3), 10 (2010).

## 発表論文

M. Kobayashi, N. Hayakawa, K. Nakabayashi, T. Matsuo, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, and K. Tamao, *Chemistry Letters*, in press.

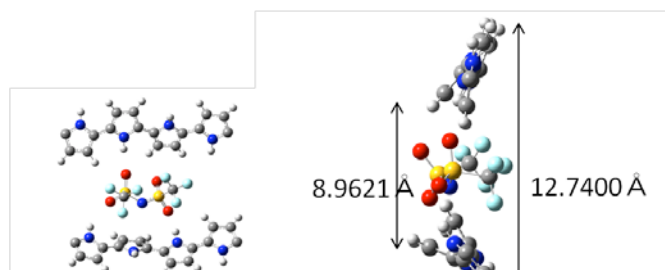


Fig. 1 Two-chain model **B** of polypyrrole doped with a TFSI molecule.