

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 ΔW 、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

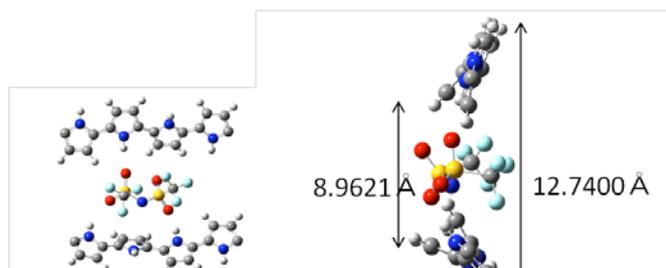


Fig. 1 Two-chain model B of polypyrrole doped with a TFSI molecule.

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)	ΔW (in Hartree)	$E_{Mout,max}$ (in J kg ⁻¹)
	5.4092	10.8510	5.3614	4.1202×10^{-6}	2.0260×10^{-2}	2.5543×10^4

の発生力 F 、エネルギー差 ΔW 、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 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.