

界面の振動分光学

Vibration spectroscopy at an interface

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学

大貫 友椰

研究成果概要

ポリテトラフルオロエチレン(PTFE)は撥水撥油性や高い化学的安定性などの特異で有用な物性を持つため、様々な分野で使用されている。一方でその化学的安定性のために、分解、回収、リサイクルが難しいという問題点も存在し、効率的な処理、リサイクル方法の開発が望まれている。PTFE のようなパーフルオロアルキル(R_f)鎖を持つ化合物の様々な特異な物性を分子構造から理解するうえで、最も基本的な考え方をまとめた理論を stratified dipole-arrays(SDA)理論[1]という。SDA 理論によれば R_f 鎖が双極子間相互作用によって強固な2次元凝集構造を形成することで特異な物性が発現する。すなわち、この2次元凝集をほどこくことが、物性の制御や新たなリサイクル方法の開発につながると考えられる。本研究では強力な双極子モーメントを有する NaCl を利用することで、PTFE の凝集構造をほどこくことができるのではないかと考え、PTFE 粉末に NaCl を添加してボールミルで粉砕した。NaCl の添加、およびボールミルによる粉砕が PTFE の凝集構造に与える影響を、赤外分光(IR)法を用いて調査した。IR 測定の結果 IR スペクトルに3つの変化が生じることを見出した。PTFE の IR スペクトルについて考察するにあたり、PTFE のオリゴマーであるパーフルオロアルカン (C_9F_{20} , $C_{16}F_{34}$) について、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、Gaussian による振動スペクトルの量子化学計算等を行った。その結果、ボールミルの粉砕によって PTFE のコンフォメーションが変化していることが明らかになった。

次年度以降は凝集構造の変化による IR スペクトルの変化について量子化学計算を用いた解析を試みる予定である。

参考文献

[1] T. Hasegawa, *Chem. Rec.* **2017**, *17*, 903.