

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ピング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（アニオンがドーピングされたときの伸縮長さ）より電解伸縮長さをもたらしする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。

ドーピング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個がドーピング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 $\Delta d_{\text{av}}(\mathbf{A}-\mathbf{B})$ 、

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.

$d_{\text{av}}(\mathbf{A})$ (in Å)	$d_{\text{av}}(\mathbf{B})$ (in Å)	$\Delta d_{\text{av}}(\mathbf{A}-\mathbf{B})$ (in Å)	F (in dyn)	ΔW (in Hartree)	$E_{\text{Mout,max}}$ (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 $E_{\text{Mout,max}}$ を求めた。(Table 1) 本研究で得られた $E_{\text{Mout,max}}$ 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.

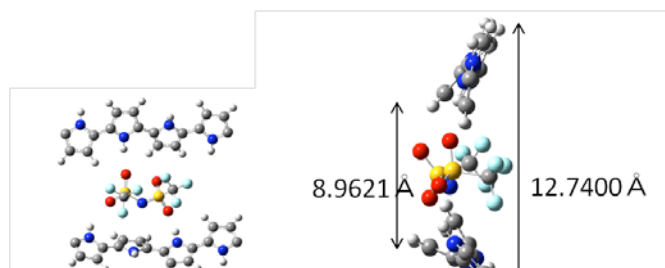


Fig. 1 Two-chain model **B** of polypyrrole doped with a TFSI molecule.