

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。そこで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[2]。

本研究では塩処理の過程の化学反応を解析するために、より微弱なピークの測定に適した、拡散反射(DR)法を用いた IR 解析を行った。PTFE の IR スペクトルについて考察するにあたり、過去の研究例[3]を参考にしながら末端の構造を $-CF=CF_2$ 基や $-COOH$ 基とした 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、塩処理によって $-CF=CF_2$ 基に由来するバンドの強度が減衰し、新たに $-COOH$ 基などに由来するバンドが出現することを見出した。これは塩処理による高分子鎖の末端構造の化学変化や、分子鎖の切断による新たな分子末端の生成を示唆している。本研究で明らかになった末端構造の変化は、塩処理メカニズムの解明に資する基礎的な知見であり、今後リサイクル条件を最適化するための指標となると期待される。

参考文献

- [1] T. Hasegawa, *Chem. Rec.* **2017**, 17, 903.
- [2] T. Oonuki, et al. *J. Phys. Chem. B.* **2025**, 129(17), 4249.
- [3] W. V. Venner, et al. *J. Fluor. Chem.* **2019**, 217, 63.