

1P01 カーボンナノチューブとポリビニルアルコールの吸着機構の検討

○ 小林俊樹、野村泰志、渡邊旭平、後藤康夫

信州大学 繊維学部 (〒386-8567 長野県上田市常田 3-15-1)

〈序論〉酸化インジウムの代替材料として単層カーボンナノチューブ (SWCNT) の透明導電膜への応用が期待されている。その透明導電膜はポリビニルアルコール (PVA) などのポリマーに SWCNT を吸着させることにより作成することができる。実験的に SWCNT が PVA に吸着することが確認されているが、その吸着機構の詳細な解析は行われていない。本研究では吸着機構を明らかにすることを目的とする。

前回、分子の簡易モデルとして SWCNT を coronene、PVA を 3-pentanol で代用し、ニュートラル状態での分子間相互作用による吸着、電子移動による静電引力による吸着の観点から検討した。その結果、電子移動は考えづらく、図 1 (a) の配座でニュートラル状態での分子間相互作用によって吸着が起こる可能性が高いと結論づけた。

今回、より現実に近いモデルとしてアームチェア型、ジグザグ型の SWCNT モデルを用い、coronene と同様の傾向が現れるか検討していく。図 2 に今回使用した会合状態の例を示す。

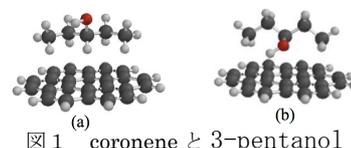


図 1 coronene と 3-pentanol

〈計算〉 まず Spartan' 04 を用いて分子モデルを作成した。Gaussian09 を用いて B3LYP/6-31G(d) レベルで構造最適化、振動数計算、エネルギー計算を行った。会合状態を Spartan' 04 の Merck Molecular Force Field (MMFF) を用いて構造最適化を行い、その会合状態での分子間相互作用の補正エネルギーの計算を行った。

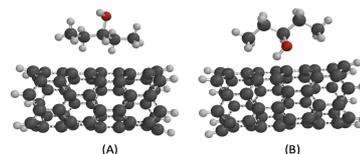


図 2 ジグザグ型 SWCNT と 3-pentanol

補正エネルギーは以下の式で表わす。

$$V = V_{el} + V_{disp} + V_{rep} [1]$$

V_{el} は静電エネルギー、 V_{disp} は分散エネルギー、 V_{rep} は反発エネルギーである。

〈結果〉 まず、SWCNT と 3-pentanol のニュートラル状態での相互作用エネルギーを算出した。その結果、coronene を用いた場合、最もエネルギー的に有利だった図 1 の (a) の配座で 1.44eV の安定化エネルギーであったのに対し、SWCNT を用いた場合では $0.04\text{eV} \sim 0.31\text{eV}$ 程度の安定化エネルギーであった。これは coronene の場合、エッジからの寄与が安定化に影響し、SWCNT ではその影響が乏しいためだと考えられる。一方、配座は coronene の場合と同様に SWCNT に対して OH 基が外側を向いた図 2 (A) の配座がエネルギー的により安定である事がわかった。

次に、イオン対での分子間相互作用を調べたところ、coronene では最大で 3.45eV 、SWCNT では最大で 2.74eV の相互作用エネルギーであった。しかしながら、coronene と比べ SWCNT は大きな電子親和力を持っている事がわかり、電子移動の可能性は否定できない。

詳細な結果は当日発表する。

〈参考文献〉 [1] Mihir Roychoudhury, Shailendra Kumar Thakur, Pankaj Kumar Gaurav: Journal of Molecular Liquids. 161, 55-62 (2011)