

京都大学大学院 工学研究科 附属桂インテックセンター
元素ブロック高分子材料の創出

プロジェクト代表: 中條 善樹 (高分子化学専攻)

本研究プロジェクトの目的と主要構成員

無機元素と機能性有機分子を巧みに組み合わせた元素ブロックは、その高分子化によって優れた光学・電子特性や高い電荷輸送能など興味深い性質を数多く有するようになる。さらに、これら元素ブロック高分子を用いて、モルフォロジーや自己集合的に形成される凝集状態を制御した高次化により、特異な電子的性質の発現も期待できる。本研究では、ヘテロ元素を基盤とすることで、新規材料の創出とともに、元素ブロック高分子の合成と機能評価、他班との連携による機能の予測や材料の素子化、情報のフィードバックによる機能の進化という研究サイクルの確立を行う。

氏名	所属部局・職	電話番号	E-mail
中條善樹	大学院工学研究科・教授	2604	chujo@chujo.synchem.kyoto-u.ac.jp
田中一生	大学院工学研究科・准教授	2608	kazuo123@chujo.synchem.kyoto-u.ac.jp
権 正行	大学院工学研究科・助教	2610	masa.g@chujo.synchem.kyoto-u.ac.jp

平成28年度の研究活動及び主な成果

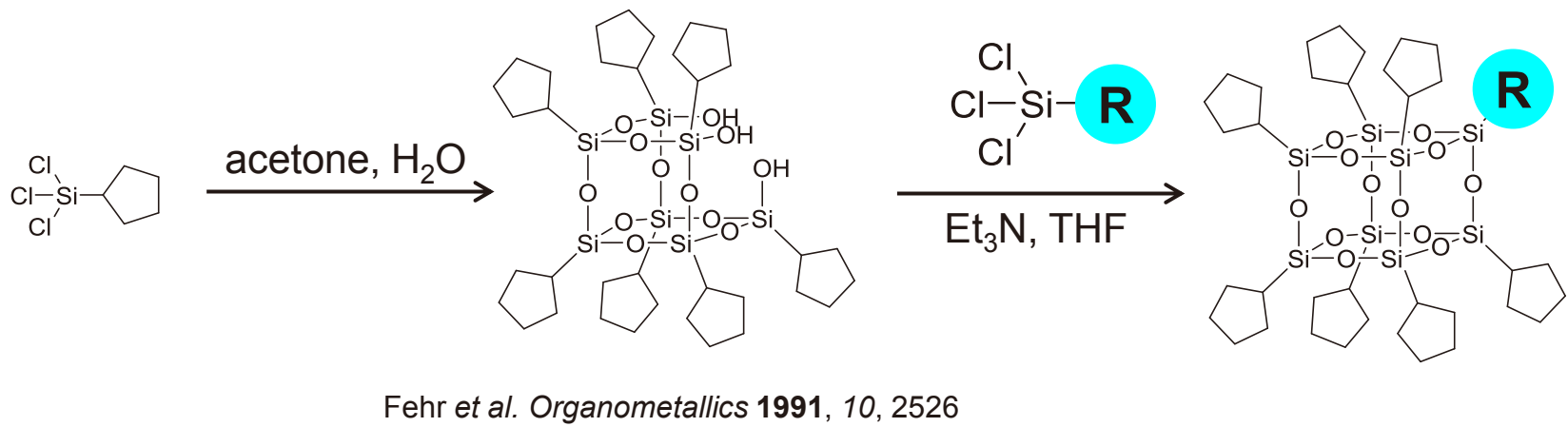
低屈折率POSSフィラーの分子設計

低屈折率材料: 反射防止膜・有機EL表面コーティング

- 低屈折率化のための要件
- 分極率の低い元素・置換基・骨格
 - 排除体積大→低密度
 - フッ素・多孔質シリカ・空孔

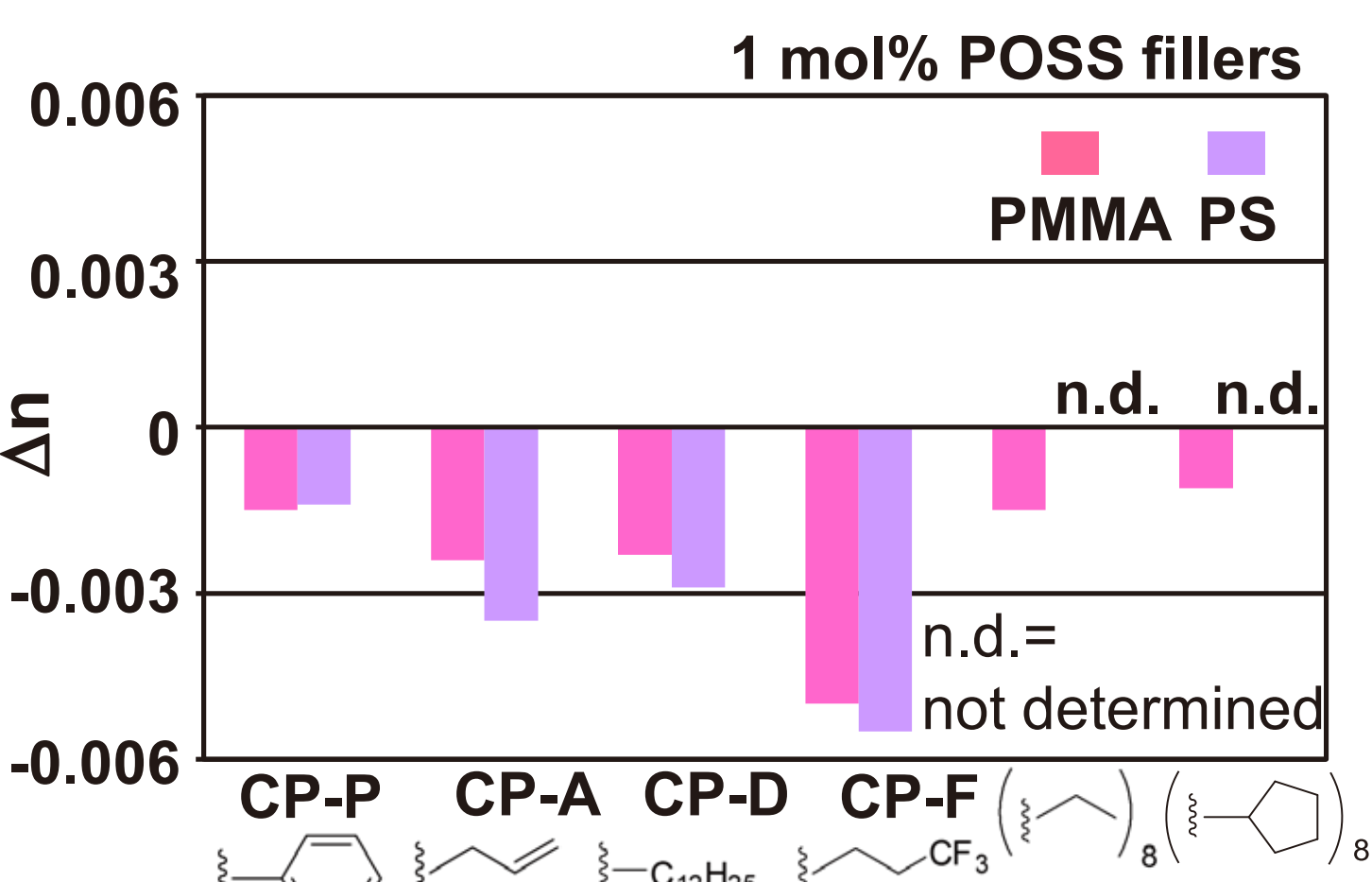
問題: 材料の機械的特性の低下
→低屈折率化&機械的特性向上を両立

フィラー合成



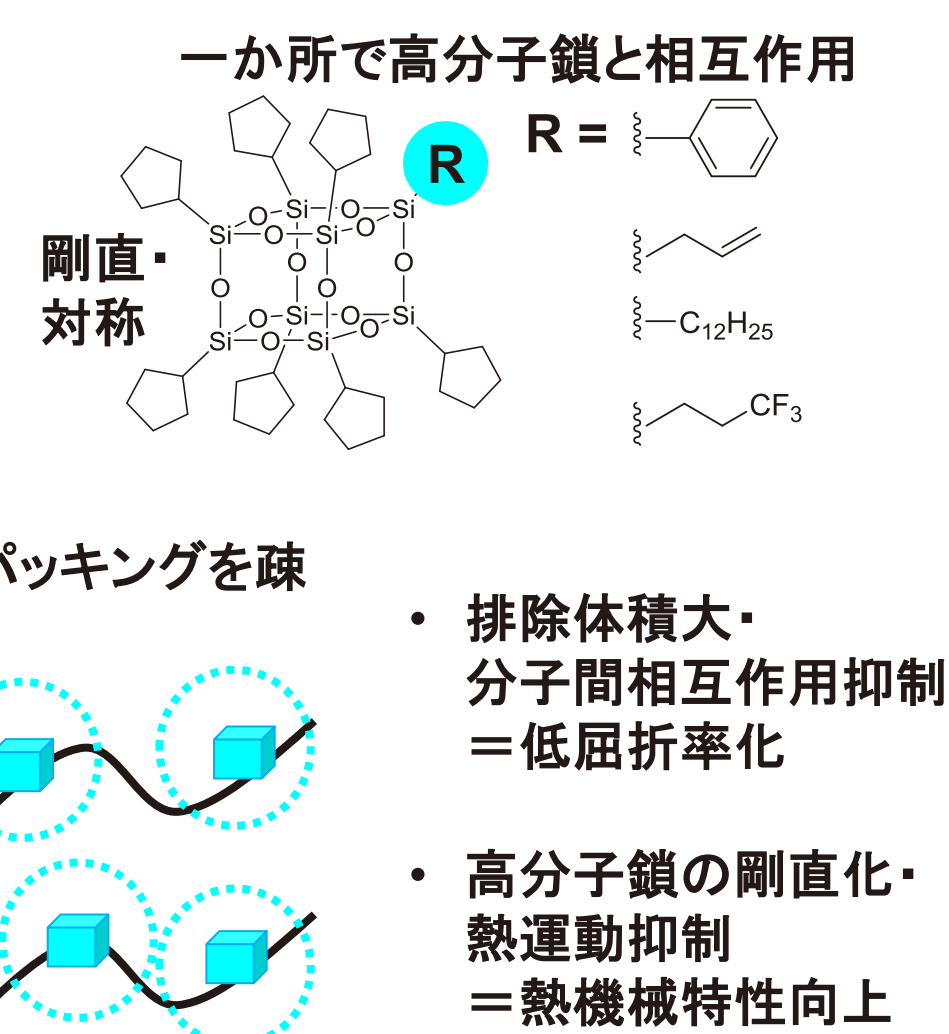
Fehr et al. Organometallics 1991, 10, 2526

屈折率測定

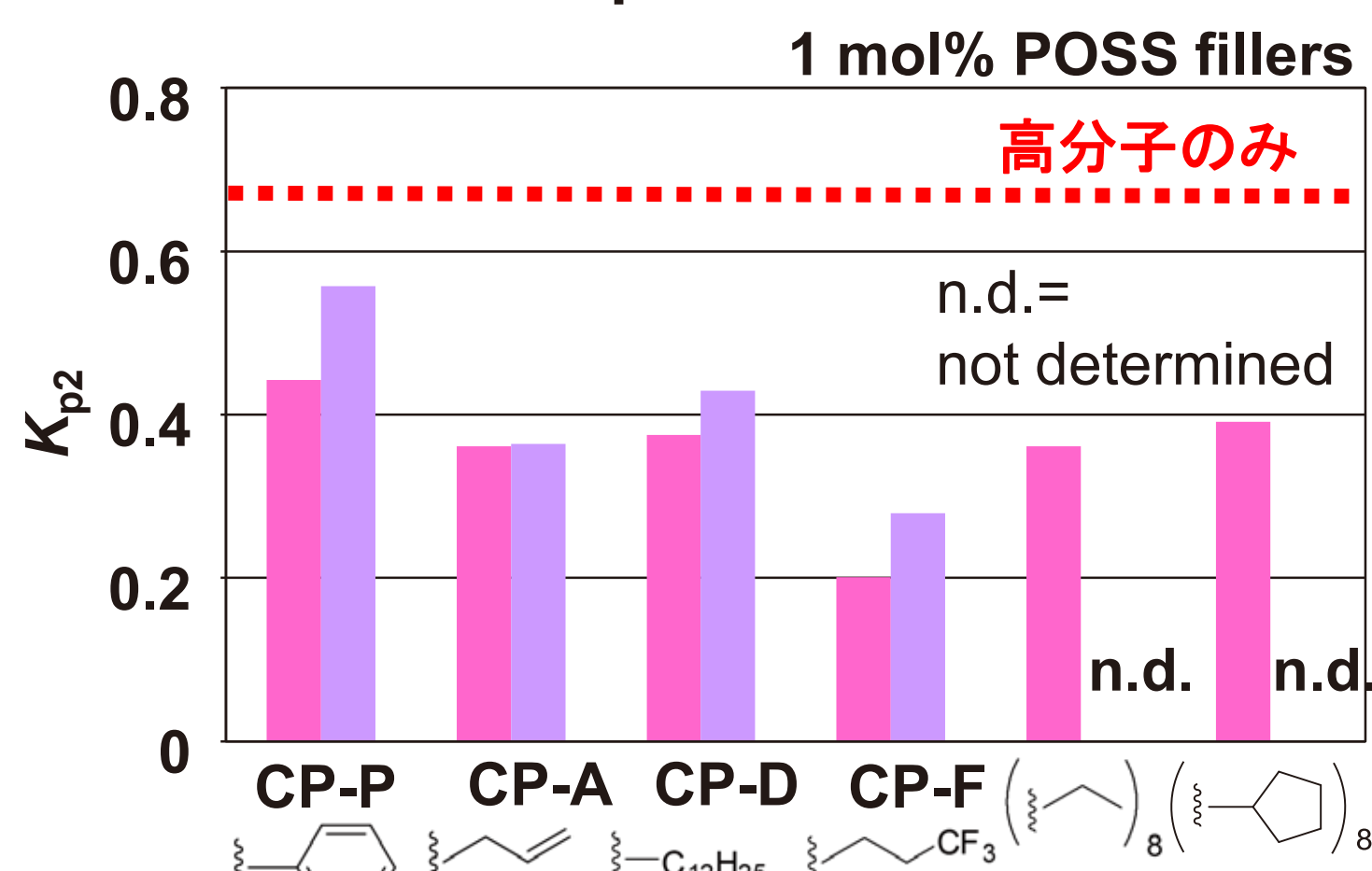


POSSフィラー=低屈折率化に効果大

分子設計

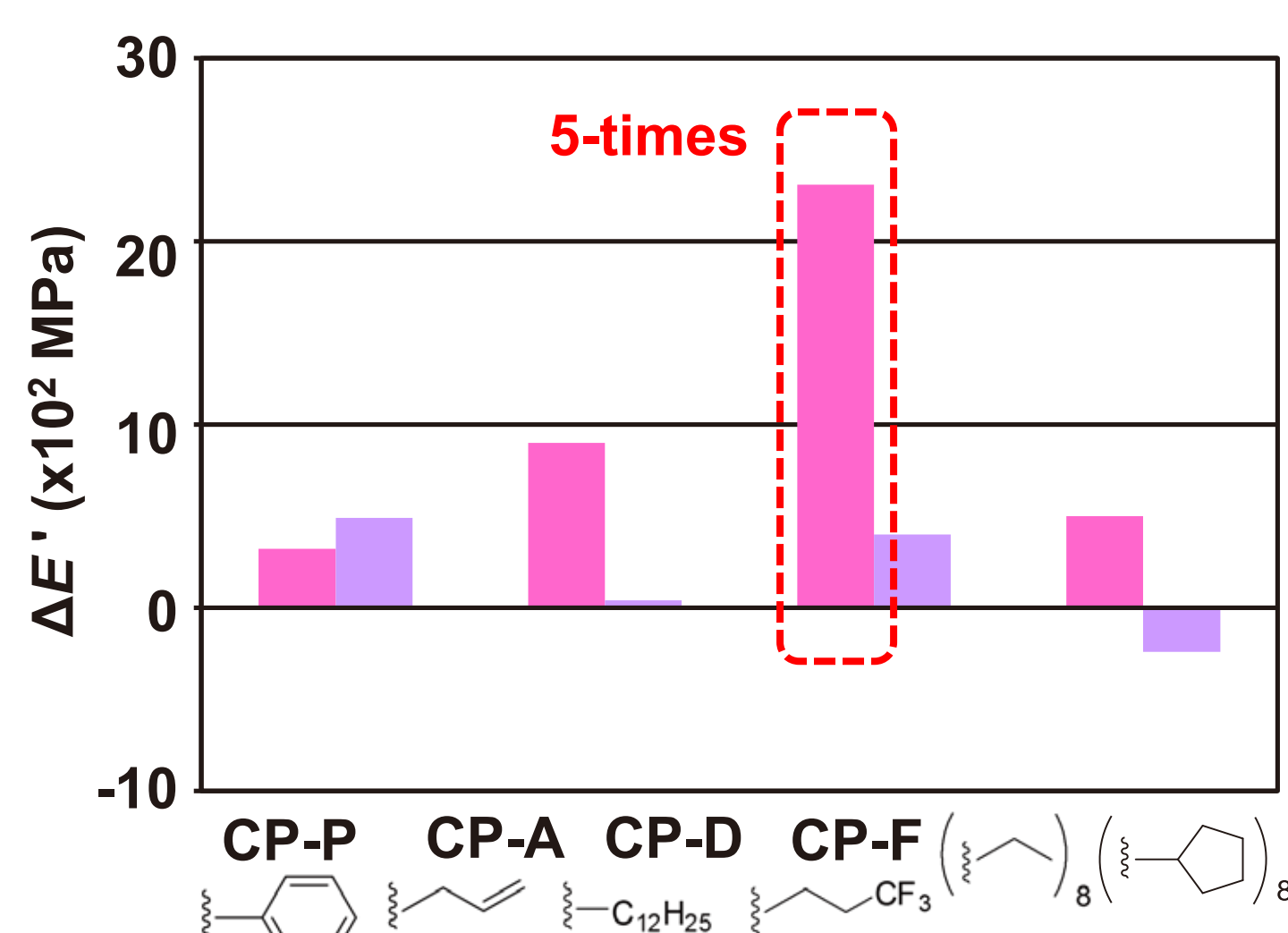
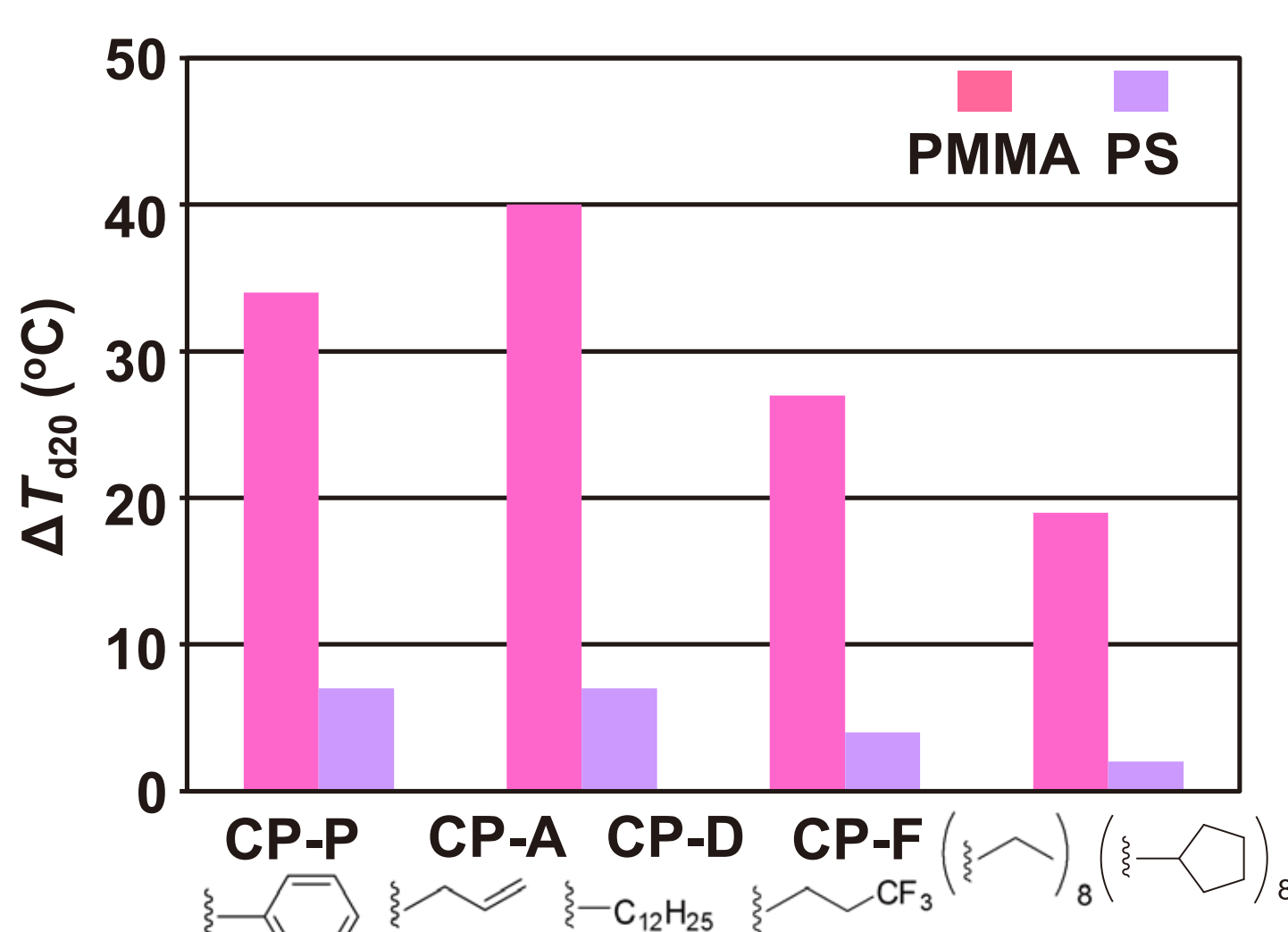


K_{p2}の算出



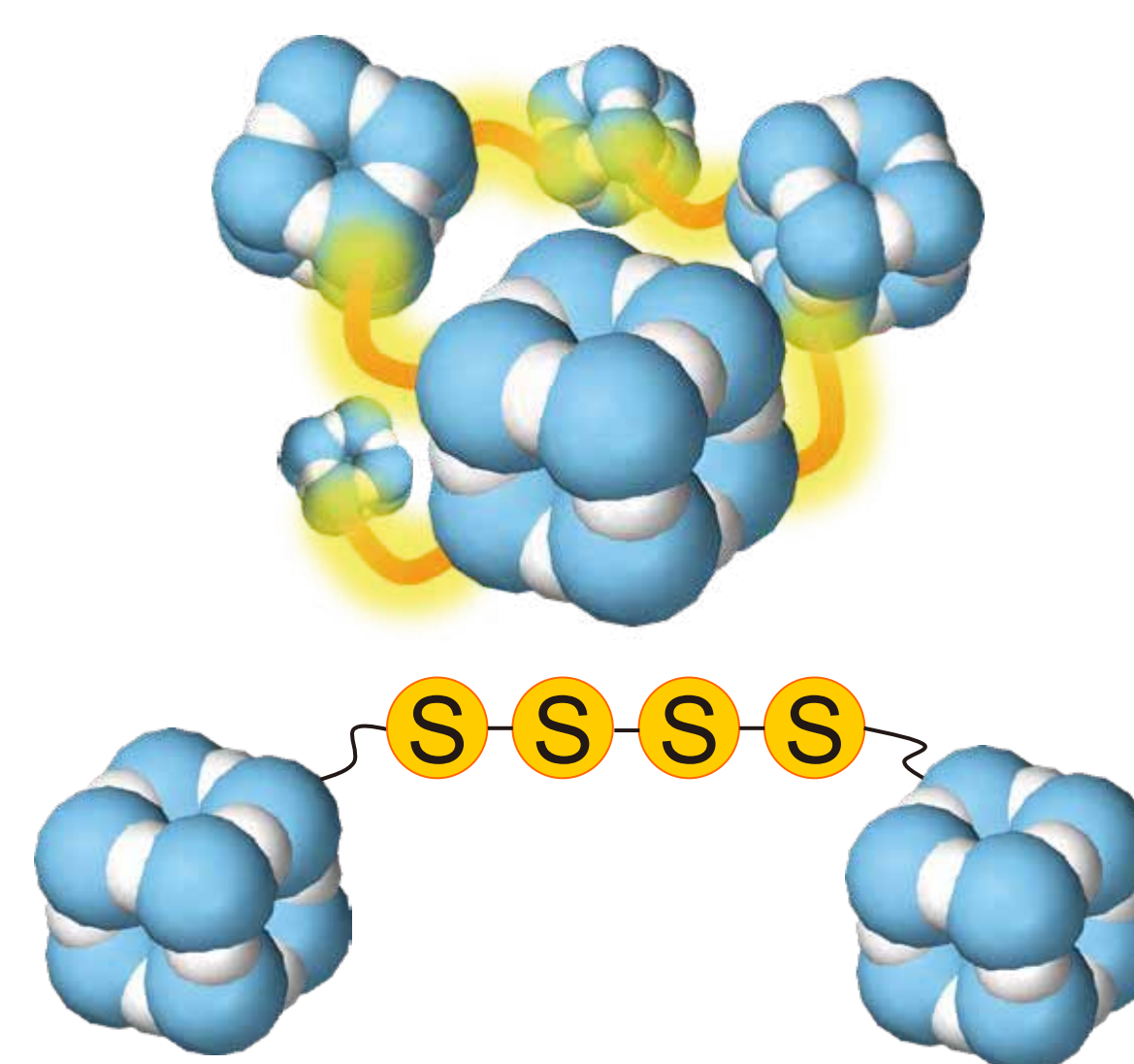
POSSの低屈折率化=パッキングの減少

熱・機械的特性評価



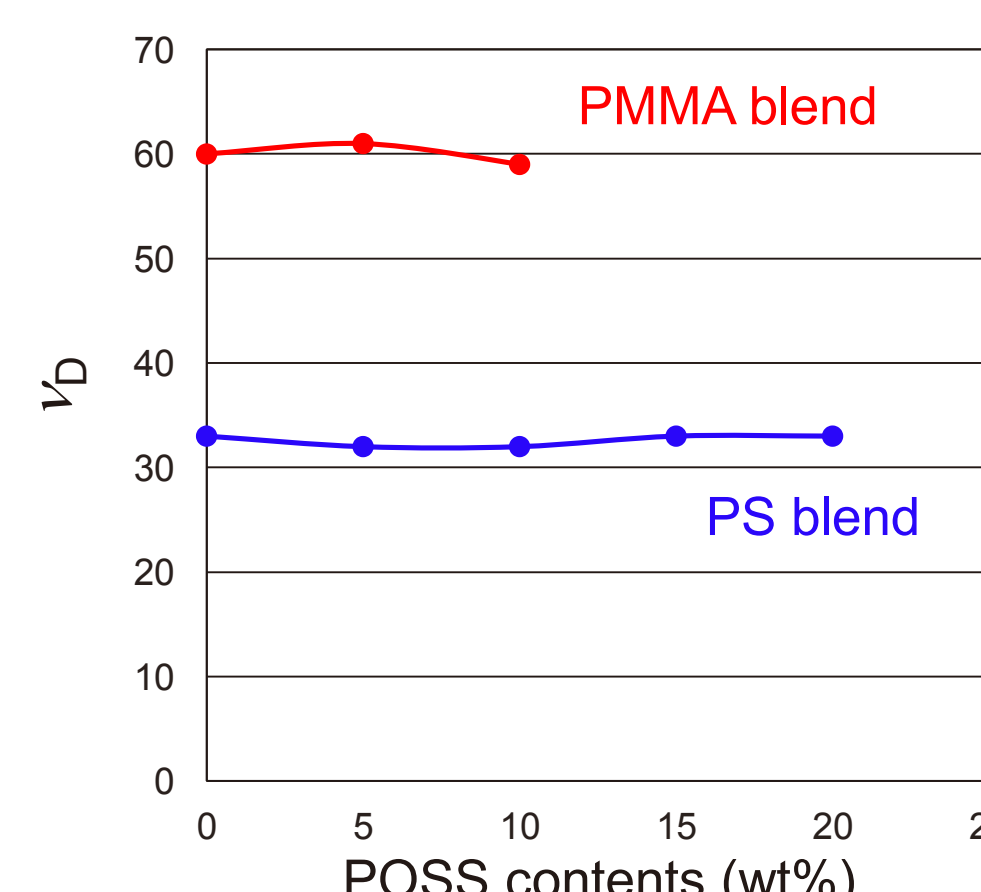
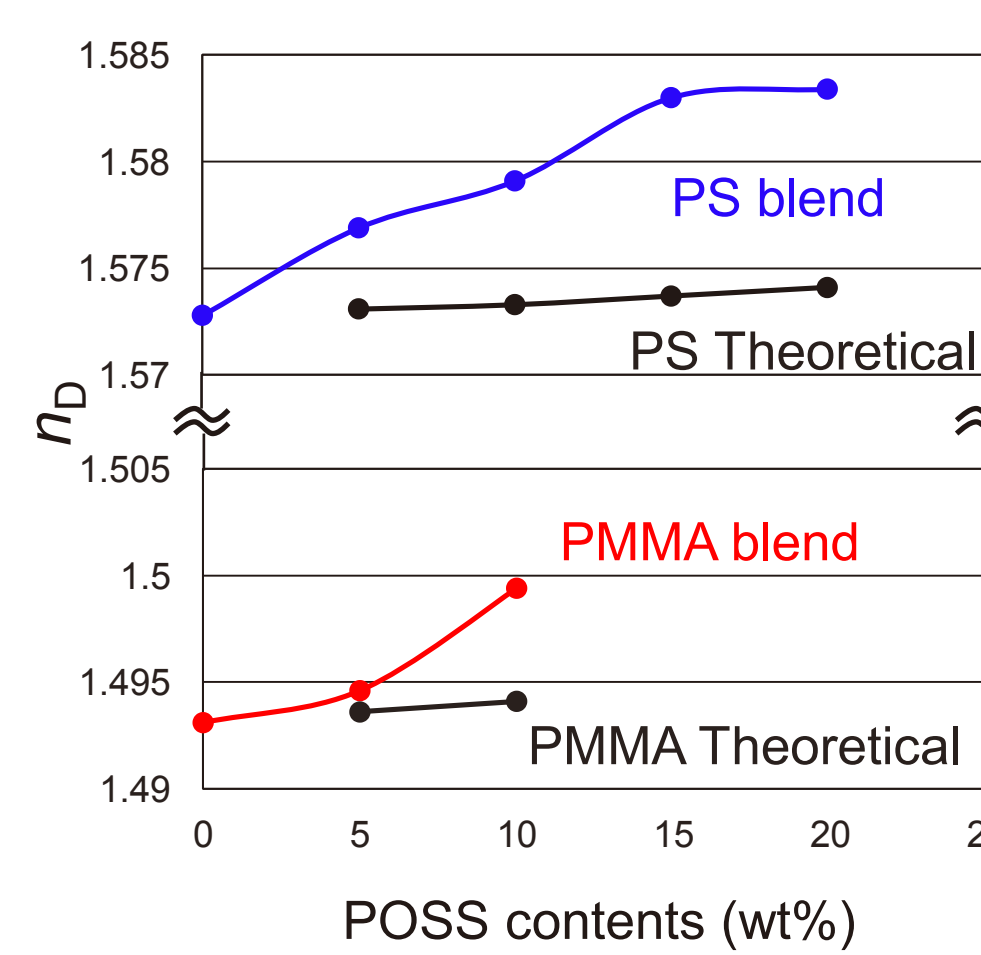
高屈折率化POSSネットワークの分子設計

分子設計



硫黄含有POSSネットワーク

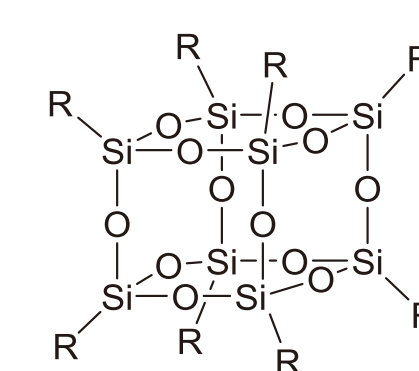
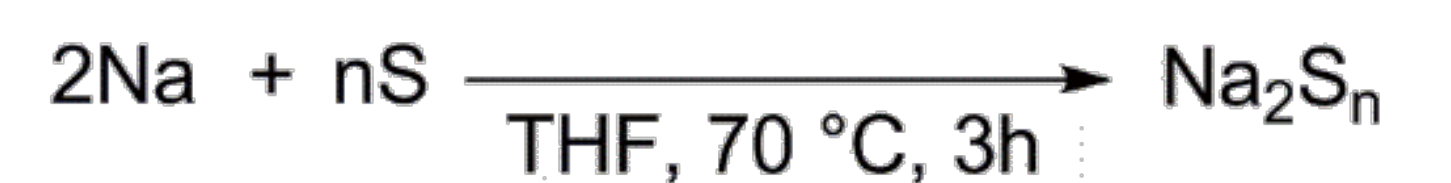
局所密度向上による高屈折率化
ネットワークによる耐熱性向上



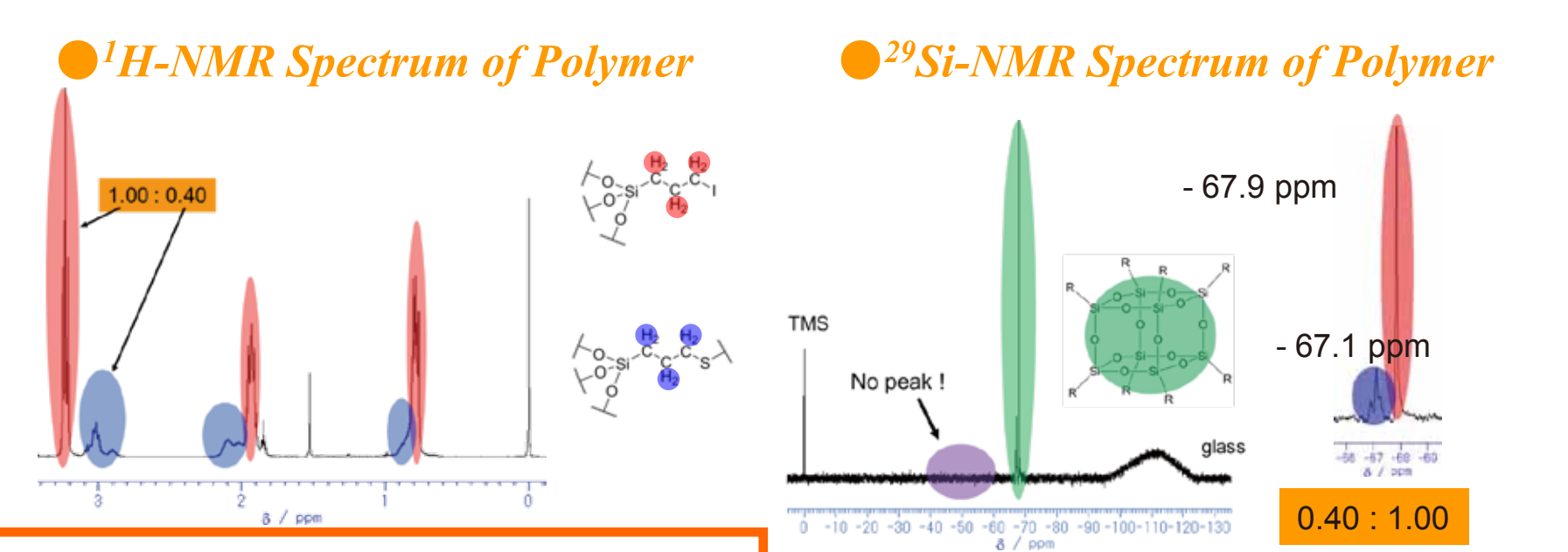
Elemental Sulfur



Sulfur S
•High atomic refraction
•Low atomic dispersion
→ High refractive index
High Abbe number



Network Polymer
r.t., 0.5h



Reaction rate : 29%
2.3 vertex are combined with sulfur.
No decomposition of POSS

Lorentz - Lorenz's formula

$$n = \sqrt{\frac{1+2\phi}{1-\phi}} \quad \frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{N_A}{3\epsilon_0} \cdot \frac{\rho}{M} \cdot \alpha = \frac{R}{V_{int}} = \phi$$

$$K_p = \frac{V_{VDW}}{V_{int}} \quad K_p: \text{packing coefficient} \quad R: \text{molecular refraction}$$

$$V_{VDW}: \text{van der Waals volume} \quad N_A: \text{Avogadro constant}$$

$$V_{int}: \text{intrinsic volume} \quad \rho: \text{density}$$

$$M: \text{molecular weight} \quad \alpha: \text{polarizability}$$

Lorentz - Lorenz's formula for mixture

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = x_1 \frac{n_1^2-1}{n_1^2+2} + x_2 \frac{n_2^2-1}{n_2^2+2} = x_1 \frac{K_{p1}R_1}{V_{VDW,1}} + x_2 \frac{K_{p2}R_2}{V_{VDW,2}}$$

x_n: molar fraction

Abbe Number: v_D

$$v_D = \frac{n_D - 1}{n_F - n_C}$$

n_D: refractive index at 468.1 nm
n_C: refractive index at 656.3 nm
n_F: refractive index at 589.3 nm

アッベ数は維持
高屈折率化・耐熱性向上