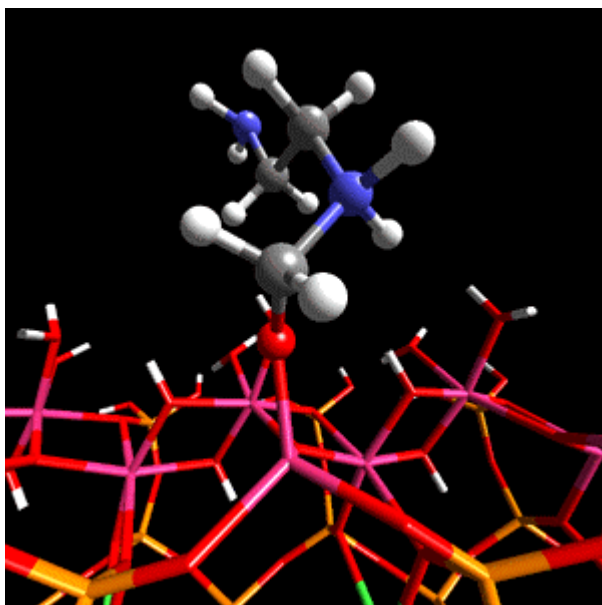


## In-situ 層間重合によるクレイ - ポリマーのナノコンポジット生成 密度汎関数法による研究

Queen Mary, University of London、the Universite Paris Sud は、Accelrys の密度汎関数法(DFT)コード CASTEP を使用して、自己触媒的な in situ 層間重合によるクレイ・ポリマーナノコンポジットの形成について研究を行いました。



モンモリロナイトの四面体層でアルミニウムに配位したメタナールが、エチレンジアミンによる求核攻撃に対し活性化されます。

クレイ・ポリマー・ナノコンポジットは、通常の方法よりも強い機械特性および熱特性を示すことによって、最近大きな注目を集めました。それらの強化された特性によって、エレクトロニクスや自動車、設備産業での応用分野が出てきています。

クレイ・ポリマー・ナノコンポジットの一つの製造方法は、in situ 層間重合です。このプロセスには必要なモノマーと粘土鉱物の機械的混合プロセスを含んでいます。モノマーは層間に進入し、層間剥離を促進します。いくつかの過程で重合が起こり、直線状あるいは架橋したポリマーマトリクスを生じさせます。剥離をさせるために長連鎖アルキルアンモニウムイオンを挿入する前膨潤過程によって、粘土鉱物を分散させる必要がしばしばあります。

「自己触媒 in situ 層間重合」と呼ばれる最近発見された製造方法は[1]、in situ 層間重合とよく似ています。しかしクレイの前処理を必要としない点が異なっています。

Journal of the American Chemical Society のなかで[2]、London Queen Mary 大学の Stephen Stackhouse と Peter Coveney、Paris Sud 大学の Eric Sandre は、クレイマトリクスの役割を決定することによりこの新しいプロセスのメカニズムの理論的見識を得るために、Accelrys の CASTEP をどのように使用したかを報告しています。

Products  
CASTEP

Company  
Queen Mary,  
University of  
London

Universite  
Paris Sud

研究者たちは、エチレンジアミンとメタナールを Na 処理モンモリロナイトの層間に挿入した例を最初に述べ、次にクレイ構造が触媒反応において果たす役割と、Na モンモリロナイト内でのプレステッド酸とルイス酸の起源について議論を行っています。次に、DFT を利用した背景理由を導くことになった、前に粘土鉱物で行った in silico 研究について議論しています。つまり周期的境界条件と平面波基底関数が併せて用いられたときに、この方法は特に結晶材料(例えばクレイやゼオライト)の研究に適しているという事実です。

Cerius<sup>2</sup> 4.2 の構造データベースに基づく周期的モデル系を構造最適化する方法として CASTEP を使用し、Convey と研究チームは、シリケート層内での等価置換サイトへの近接度が、水酸基のプレステッド酸性に著しい効果をもつと述べています。ヒドロキシ基は、置換サイトに接近する方がエネルギー論的に好ましいけれども、アルミニウムのマグネシウム置換サイトから遠いほど、よりプレステッド酸性になっています。シミュレーションはまた、モノマー触媒反応が鉱物の格子先端で生じていることを示しています。ここでは露出した Al<sup>3+</sup> イオンとヒドロキシ基が、それぞれルイス酸、プレステッド酸のサイトとして作用しています。

### 参考文献

- [1] Coveney, P. V., Griffin, J. L. W., Watkinson, M., Whiting, A., Boek, E. S., Mol. Sim., 2002
- [2] Stackhouse, S., Coveney, P. V., Sandre, E., J.Am.Chem.Soc., 2001, 123, 11764.

---

### アクセルリス株式会社

〒105-0003 東京都港区西新橋 3-3-1 西新橋 TS ビル  
Tel: +81 3 3578 3860 Fax: +81 3 3578 3872  
[www.accelrys.com/jp/](http://www.accelrys.com/jp/)

