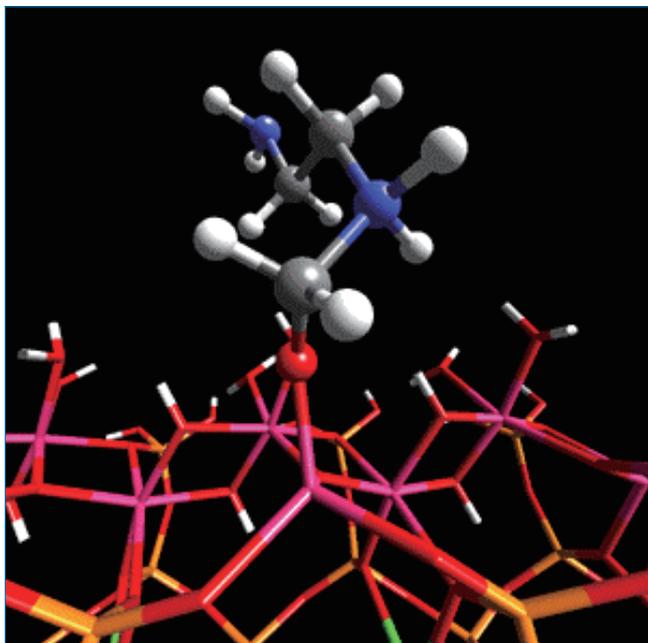


In-situ層間重合によるクレイ - ポリマーの ナノコンポジット生成密度汎関数法による研究

Queen Mary, University of London, the Universite Paris Sud は、BIOVIA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、通常材料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ります。

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、BIOVIAのCASTEPをどのように使用したかを報告しています。

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ン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

Organization

Queen Mary, University of London

Universite Paris Sud

Products

BIOVIA Materials Studio CASTEP

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。

Cerius²4.2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、水酸基のプレン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、よりプレン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Al³⁺イオンとヒドロキシ基が、それぞれルイス酸、プレン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.