

フッ化脂肪酸の動的分子挙動と液体物性

分子科学専攻 分子構造学

DS-11901 山本 俊

脂肪酸は融液中で大部分が対称に水素結合したダイマーとして存在し、そのダイマーが指組構造的に会合してクラスターを形成する。そのクラスターの存在が液体物性を決定していると考えられている。フッ化脂肪酸はフッ化炭素鎖同士の分子間力が弱く、分子間の摩擦が小さいため、分子間の運動性が通常の脂肪酸よりも大きく、粘性も小さくなり、通常の脂肪酸と液体物性が異なることが期待される。そこで、本研究では半分フッ素化した(SF-)脂肪酸と全フッ素化した(PF-)脂肪酸の分子挙動や物性を調べ、対応する通常の脂肪酸と比較し、融液中および溶液中の分子挙動と物性に対するフッ素含有の効果調べることを目的とした。そのために、「半分フッ素化したオレイン酸、エライジン酸、ステアリン酸の動的分子挙動と液体物性」、「ヘキサン酸、SF-ヘキサン酸、PF-ヘキサン酸の動的分子挙動と液体物性」という 2 つのテーマで研究を行った。

本学位論文の構成は以下の通りである。

I 章で本研究の序論を述べる。

II 章では、実験及び測定の方法を説明する。

III 章では、一つ目のテーマとして炭素数 18 の脂肪酸(オレイン酸、エライジン酸、ステアリン酸)と、それらに対応する SF-脂肪酸の種々液体物性を比較し、フッ素化の効果を検討した。その結果、 ^1H NMR Chemical Shift、IR、ラマン散乱測定から SF-脂肪酸は通常の脂肪酸と同等の水素結合性を持ち、融液中ではダイマーが SF-脂肪酸の運動の基本単位であることが明らかになった。また、DSC 測定、NMR による自己拡散係数、スピン格子緩和時間(T_1)測定から、SF-脂肪酸は通常の脂肪酸よりも分子間の引力的相互作用は小さいが、分子間の並進運動性や分子内回転運動性が低くなることが明らかになった。

IV 章では二つ目のテーマとして、炭素数 6 のヘキサン酸を対象として、その SF-脂肪酸と PF-脂肪酸の種々液体物性を対応する通常の脂肪酸と比較し、フッ素化の効果を検討した。その結果、NMR による自己拡散係数から PF-ヘキサン酸は SF-ヘキサン酸よりも分子量が大きいにもかかわらず、分子間の並進運動性が高くなることが明らかになった。その違いが何に由来するのかを調べるために DSC、IR、ラマン散乱測定を行い、PF-脂肪酸は通常の脂肪酸や SF-脂肪酸と水素結合の様式が異なっていることを明らかにした。この結果をさらに考察するために、密度汎関数計算や分子動力学計算からも脂肪酸の液体構造についてフッ素化の効果調べた。

V 章では本研究の総括を述べる。