

新しい分光法のポリイミド特性解析への応用

(東工大・物質応用) 安藤 慎治

連絡先: 〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1-E4-5

Tel: 03-5734-2137, E-mail: sando@polymer.titech.ac.jp

[要 旨]

われわれは「出口イメージの明確な高機能性スーパー・エンブラ開発のための基盤技術」確立を目指し、ポリイミドに対してこれまで ① **光機能性** (光透過性, 高/低屈折率・複屈折制御, 屈折率の波長分散, 複屈折の逆波長分散, 熱光学係数制御, 蛍光・燐光発光性), ② **熱機能性** (高熱伝導, 熱伝導異方性, 体積熱膨張率制御), ③ **電子機能性** (低誘電率, 光電導性, 暗電流の温度依存性) を付与する技術開発を行ってきた. その過程において, **高分子の精密な構造・物性計測とその予測が鍵**となるが, 既存の高分子分光・計算機科学の手法では, 十分な構造・物性情報が得られないことも多い. そこで, 個々の材料開発スキームにおける特性解析の必要に応じて, 新たな高分子分光の手法を開発してきた. 本講演では, 光・熱・電子用途の機能性ポリイミドに焦点を当てて, われわれが開発あるいは応用してきた**高分子の構造・物性の特性解析・計算手法**について概説する. 講演にて紹介させていただくトピックを以下に掲げる.

- I. 遠赤外光吸収スペクトルと DFT 計算によるポリイミドの局所コンホメーション解析 [1]
- II. 超高圧下 (～8 万気圧) におけるポリイミドの広角 X 線回折・光吸収/蛍光スペクトル [2]
- III. 近赤外光干渉スペクトル解析によるポリイミド薄膜の体積膨張率測定と制御 [3]
- IV. 温度可変広角 X 線回折法によるポリイミド結晶粉末の 3 次元体積膨張挙動 [4]
- V. 偏光多角入射分解赤外分光法(p-MAIRS)によるポリイミド薄膜の 3 次元配向評価 [5]
- VI. 面外/面内 温度波熱分析法によるポリイミドハイブリッド膜の異方的熱伝導性評価 [6]
- VII. 時間依存密度汎関数(TD-DFT)計算によるポリイミドの物性予測 (屈折率, 複屈折, 屈折率と複屈折の波長分散, 真空紫外・紫外可視・中赤外・遠赤外域の光吸収スペクトル) [7]

[文 献] [1] *Polymer*, **86**, 83-90 (2016). [2] *Macromolecules*, **47**(12), 3951-3958 (2014). *Macromolecules*, **45**(11), 4764-4771 (2012). *Macromolecules*, **44**(2), 349-359 (2011). *Macromolecules*, **43**(5), 2115-2117 (2010). *J. Phys. Chem. B*, **113**(26), 8835-8846 (2009). [3] *Macromol. Chem. Phys.* **2017**, 1700354 (2017), *Eur. Polym. J.*, **64**, 206-214 (2015), *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **26**(3), 327-332 (2013), *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **25**, 385-388 (2012). [4] *Macromolecules*, **50**, 2112-2123 (2017). [5] *Macromol. Chem. Phys.*, **2017**, 1700370 (2017). [6] *Polymer*, **123**, 39-48 (2017), *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **5**, 4374-4382 (2013). [7] *Polymer*, **86**, 83-90 (2016), *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **19**, 351-360 (2006), *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **16**, 263-266 (2003), *Jpn. J. Appl. Phys.* **41**, L105-L108 (2002), *Synthetic Metals*, **129**, 207-213 (2002), *J. Photopolym. Sci. Technol.*, **15**, 559-568 (2002).

Application of Novel Spectroscopic Methods for Characterizing the Structures and Physical Properties of Polyimides

Shinji ANDO (School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology, Ookayama 2-12-1-E4-5, Meguro-ku Tokyo 152-8552 Japan)

Tel: +81-3-5734-2889, Fax: +81-3-5734-2889, E-mail: sando@polymer.titech.ac.jp