

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	ポリベンゾイミダゾールの物理化学的性質の理論的研究
Title(English)	Theoretical Study of Physical Chemical Properties of Polybenzimidazoles
著者(和文)	白田圭
Author(English)	Shirata Kei
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9754号, 授与年月日:2015年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:川内 進,高田 十志和,野島 修一,古屋 秀峰,佐藤 満
Citation(English)	Degree:., Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9754号, Conferred date:2015/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名	白田 圭		
論文審査 審査員		氏名	職名		氏名	職名
	主査	川内 進	准教授	審査員	古屋 秀峰	准教授
	審査員	高田 十志和	教授		佐藤 満	准教授
野島 修一		教授				

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Theoretical Study of Physical Chemical Properties of Polybenzimidazoles (ポリベンゾイミダゾールの物理化学的性質の理論的研究)」と題し、英文により書かれ、以下の6章により構成されている。

第1章「General Introduction (序論)」では、ポリベンゾイミダゾールの基礎的性質を述べ、本研究で取り上げるリン酸をプロトン伝導体とした燃料電池用電解質膜に求められている解決すべき問題点を述べている。

第2章「Computational Fundamentals (計算手法の基礎)」では、本研究で用いた計算手法について、その基礎となる分子軌道法および密度汎関数法を解説している。

第3章「Effect of Benzimidazole Configuration in Polybenzimidazole Chain on Interaction with Phosphoric Acid (ポリベンゾイミダゾール鎖中のベンゾイミダゾールのコンフィギュレーションのリン酸との相互作用への効果)」では、ベンゾイミダゾール二量体の三種類のコンフィギュレーションとして、2,2'-ビベンゾイミダゾール、2,5'-ビベンゾイミダゾール、5,5'-ビベンゾイミダゾールを取り上げ、リン酸一分子ないし二分子との相互作用エネルギーを量子化学計算により求めている。その結果、2,2'-ビベンゾイミダゾールが最も大きな相互作用エネルギーを示すことを明らかにしている。そして、2,2'-ビベンゾイミダゾール構造をポリベンゾイミダゾール鎖中に組み込むことにより、リン酸をプロトン伝導体とした電解質膜の大きな問題点の一つであるリン酸の漏えい抑制の可能性を述べている。

第4章「Effect of Benzimidazole Configuration in Polybenzimidazole Chain on Acid Dissociation Constants (ポリベンゾイミダゾール鎖中のベンゾイミダゾールのコンフィギュレーションの酸解離定数への効果)」では、ベンゾイミダゾール二量体の三種類のコンフィギュレーション、すなわち2,2'-ビベンゾイミダゾール、2,5'-ビベンゾイミダゾール、5,5'-ビベンゾイミダゾールにつき、それらの $pK_a$ を量子化学計算により求めている。その結果、2,2'-ビベンゾイミダゾールが最も小さな $pK_a$ を示すことを明らかにしている。リン酸をプロトン伝導体とした電解質膜の問題点の一つであるプロトン伝導度の低下を引き起こすリン酸とポリベンゾイミダゾール間の塩の形成が、2,2'-ビベンゾイミダゾール構造をポリベンゾイミダゾール鎖中に組み込むことで抑制される可能性を述べている。

第5章「Hyperpolarizability of Aromatic Head-Tail Polymers (頭-尾型全芳香族高分子の分子超分極率)」では、頭-尾型全芳香族高分子であるポリ(2,5-ベンゾイミダゾール)、ポリ(4-フタルイミド)、ポリ(4-ヒドロキシ安息香酸)、ポリ(4-アミノ安息香酸)について、分子超分極率の重合度依存性を量子化学計算により調べている。いずれの場合も、重合度の増加に伴って分子超分極率は比例して大きくなり、基準としたパラニトロアニリンより大きな値を示すことが見出されている。中でもポリ(4-ヒドロキシ安息香酸)とポリ(4-アミノ安息香酸)は重合度に伴う増加率が高いことが示されている。通常のドナー-アクセプター型共役系高分子では共役鎖長の増加に伴って分子超分極率は大きくなるものの、吸収波長の長波長化を伴うという欠点が知られているが、これらの高分子では長波長化は伴わないという大きな利点が述べられている。

第6章「General Conclusions (総括)」では、本研究の結果を総括するとともに、今後の展望について述べている。

これを要するに、本論文はポリベンゾイミダゾールの物理化学的性質を量子化学的に明らかにすることを通じて、燃料電池用電解質膜への応用上の問題点を解決する有望な構造の提案と非線形光学材料としての応用の可能性を提案した研究であり、工学上ならびに工業上貢献するところが大きい。よって本論文は博士(工学)の学位論文として十分な価値があるものと認められる。