

有機粘土へのフェノール吸着で形成される秩序構造の分子シミュレーションによる解明

(工学院大¹) ○宮川 雅矢¹・廣澤 史也¹・高羽 洋充¹

Formation of ordered structure by intercalation of phenol in organoclay investigated by molecular simulation (¹*School of Advanced Engineering, Kogakuin University*) ○Masaya Miyagawa,¹ Fumiya Hirose,¹ Hiromitsu Takaba¹

In the present study, we investigated structural changes in methylviologen-modified montmorillonite (Mont-MV) by molecular dynamics simulation. In Mont-MV, the MV cations are oriented horizontally. By initial stage of intercalation of phenol, the phenol is interacted with siloxane surface of Mont while the interlayer structure does not change significantly. As more phenol molecules are intercalated, however, both the MV cations and phenol molecules get tilted. This morphology sufficiently rationalizes charge-transfer complex observed experimentally. Therefore, it is concluded that the MV cation plays as pillar and the formation of the complex is the secondarily derived function.

Keywords : Montmorillonite, Molecular dynamics simulation, Organoclay, Methylviologen, Intercalation

モンモリロナイトの層間カチオンをメチルビオロゲンに交換すると、複合体 (Mont-MV) はフェノール類を吸着するだけでなく呈色反応を示す。¹⁾これはフェノールと MV が電荷移動錯体を形成するためと考えられているが、このような機能の発現メカニズムにおいて層および層間カチオンが果たす役割を解明することは容易ではない。我々は最近、分子動力学 (MD) 法を用いて有機粘土およびアントラセン吸着時の層間構造を報告した。²⁾本研究ではフェノール吸着にともなう Mont-MV の構造変化の解明を目的とした。Mont の力場には interface を、³⁾それ以外には pcff を用いた。

Mont-MV のスナップショットを Fig. 1(a)に示す。基本面間隔は 12.4 Å と実験値をよく再現し、MV は Mont 層に対して平行に配向している。フェノールを各層間に 6 分子含む複合体のスナップショットを Fig. 1(b)に示す。フェノールの OH 基は面外に飛び出し Mont 層のシロキサン表面と相互作用しているが、フェノール・MV どちらも大きな配向変化は見られない。しかし、フェノールを 24 分子含む複合体ではどちらも粘土層に対して傾き、互いにおおよそ平行で錯形成に十分な構造を形成している。すなわち、Mont-MV へのフェノール吸着では、層との相互作用が重要であり、MV との錯形成は副次的な機能であることがわかる。

1) T. Okada, M. Ogawa, Chem. Lett. **2002**, 31, 812. 2) M. Miyagawa, F. Hirose, H. Higuchi, H. Takaba, ACS Omega **2021**, 6, 19314. 3) H. Heinz et al., Langmuir 2013, 20, 1754.

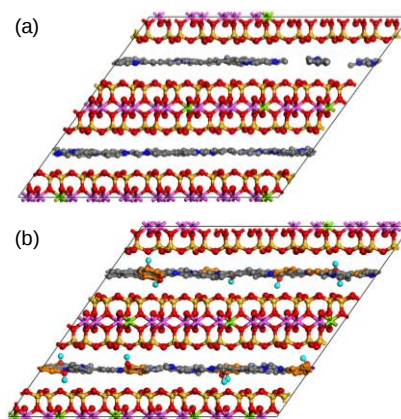


Fig. 1. Snapshots of (a) Mont-MV and (b) Mont-MV containing 6 phenols.