

問題 1. グラファイト酸化物

グラファイト酸化物 (Graphite oxide、以下GOと記す) は、グラファイトを強い酸化剤で処理することによって得られる化合物である。GO内の炭素の層状のハニカム構造(図 1 a)は、酸素原子を含む数種類の官能基で修飾されている。GOの正味の分子式は CO_xH_y で表される。ここで、 x と y は酸化の方法によって変わる。特異な電氣的性質を持った最も有名な二次元の炭素ナノマテリアルであるグラフェンの有望な前駆体として、近年GOがますます注目を集めている。GOの剥離によって、原子レベルの薄さを持つグラフェン酸化物のシートが作られる(図 1 b)。この生成物を還元することによってグラフェンを得る。

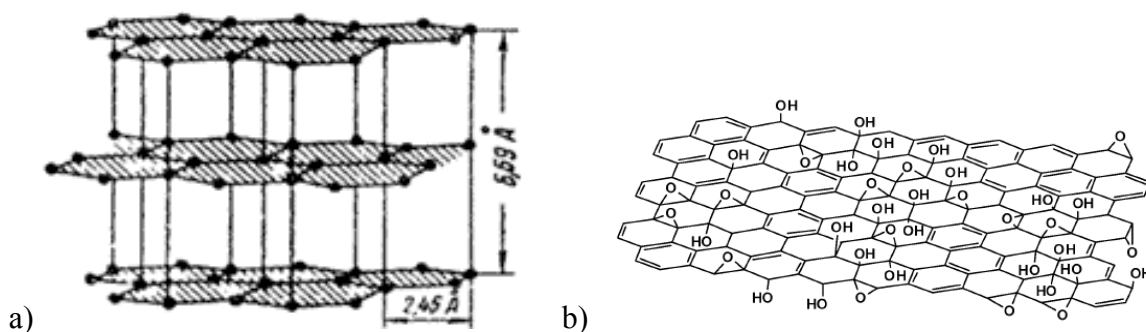


図 1. a) グラファイトの結晶格子。GOはグラファイトが持つ層状構造を保っているが、層間距離はおよそ二倍(～12 Å、グラファイトは図中にあるように 6.69 Å)となる。また、GO中の一部の炭素原子は酸化されている。b) GOの結晶格子中の一枚のシート。いくつかの酸素原子を含む官能基が示されている。絶対的・相対的な官能基の数は合成方法によって異なる。

- GOがグラフェンの前駆体として好まれる理由を、グラファイトと比較して二つ挙げよ。また、GOをグラフェンの前駆体として用いる際の最も深刻な問題点を考えよ。
- 最も単純なGOシートのモデル (Hoffman モデル) を図 2 a に示す。このモデルでは、グラファイトの酸化によって、官能基として(-O-)のみが作られると仮定している。GOの正味の分子式を CO_x として、25%の炭素原子が sp^2 混成を保っている時の x の値を計算せよ。また、Hoffman モデルにおける x の最大値を求めよ。

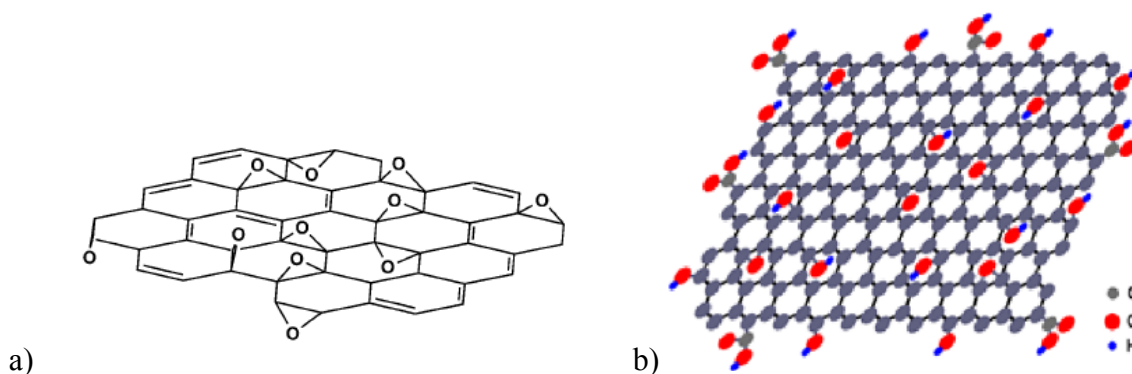


図2. GOシートの (a) Hoffman モデル (b) Lerf-Klinowski モデル

3. 現在よく用いられている GO シートのモデル (Lerf-Klinowski モデル) を図 2 b に示す。図中に示されている四種類の官能基の名称を答えよ。

4. GO の全ての層が Lerf-Klinowski モデルでの予想通りであると考え(図 2 b)。その GO の正味の分子式が $\text{CH}_{0.22}\text{O}_{0.46}$ であったとき、酸化されていない炭素原子の量 (%) を見積もれ。上限と下限を求めること。(六角形を形成している炭素原子のみを考えること。)

5. GO は、層間に水を吸収する。これが、GO の最も重要な性質の一つである。吸収は、水分子と官能基との間に形成される水素結合によって起こる(図 3)。GO の正味の分子式が $\text{CH}_{0.22}\text{O}_{0.46}$ であったとき、一つの炭素原子あたりに吸収される水分子の数の最大値を求めよ。また、この時得られる GO 水和物の正味の分子式を記せ。Lerf-Klinowski モデルを用いること。

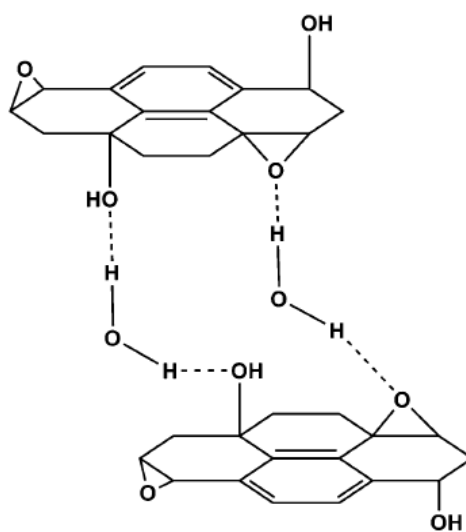


図3. GO上の酸素を含む官能基と水分子との間に形成される水素結合ネットワーク