

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

High-Resolution Observation of Polymer Crystals with a Transmission Electron Microscope

京都大学化学研究所 高分子制御合成研究領域 登阪雅聡

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ポリジメチルシロキサン(PDMS)の結晶構造解析に取り組んだ。PDMS はエラストマーやオイル、消泡剤としての食品添加など、幅広く使われている。この PDMS は低温で結晶化するが、その原子座標を決める構造解析は未だ行われていない。

昨年度の時点で、我々は透過型電子顕微鏡(TEM)中で PDMS を冷却することにより単結晶を得て、その制限視野電子線回折(SAED)パターン(図 1)から、4種類の結晶構造が存在することを明らかにした。この SAED パターンからは、結晶の  $ab$  面内における分子充填の情報が得られるが、 $c$  軸方向の情報は欠損している。そこで  $c$  軸方向の情報はバルク試料からの X 線回折(WAXD)パターン(図 2)より推定することで、エネルギー的に安定であり、かつ、回折パターンの特徴を再現できる構造モデルを Materials Studio を用いて探索した。その結果、確からしい構造を見つけるに至っている。

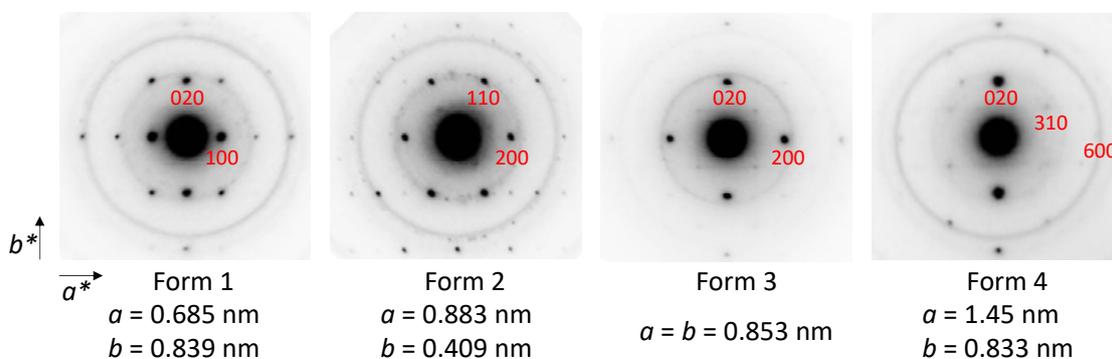


図 1 PDMS 単結晶の SAED パターン(既報)

今年度は、モデルの正確性を高めるため、さらに TEM 中で生成させた PDMS 単結晶の観察を進めた。その過程で、上に述べた4種類とは異なる ED パターンを示す、新しい結晶型が見つかった。この結晶型(Form 5)についても、構造モデルを探索している最中である。

発表論文 (研究終了後に投稿の予定)

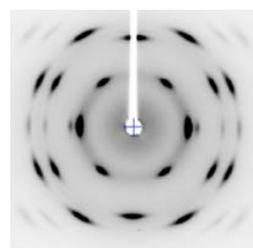


図 2 -100°C、延伸倍率 6 倍における架橋 PDMS の WAXD パターン

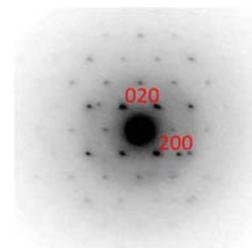


図 3 PDMS 単結晶の新しい SAED パターン