

構造制御された高分子の解析  
Analysis of structure-controlled polymers

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

分岐誘導性モノマーであるエボマーを用いた可逆的失活ラジカル重合 (RDRP) に基づく高分岐ポリマー (HBP) の生成過程を確率論的シミュレーションにより検討した。独自のシミュレーションプログラムにより、重合過程における分散度 ( $D$ ) の変化を再現することに成功した。シミュレーションの結果、観測された  $D$  ( $= 1.5 \sim 2$ ) は、望ましくない副反応ではなく、分岐数の分布によるものであることがわかった。さらに、分岐構造はうまく制御されており、大部分の HBP は理想的な構造に近いことがわかった (図 1)。また、個々の分子に注目すると、分子量によって分岐密度がわずかに変化することもシミュレーションから示唆された。この傾向は、フェニル基を持つエボマーで HBP を合成し、サイズ排除クロマトグラフィーで複数の検出器からのシグナル強度を分析することで実験的に確認された。

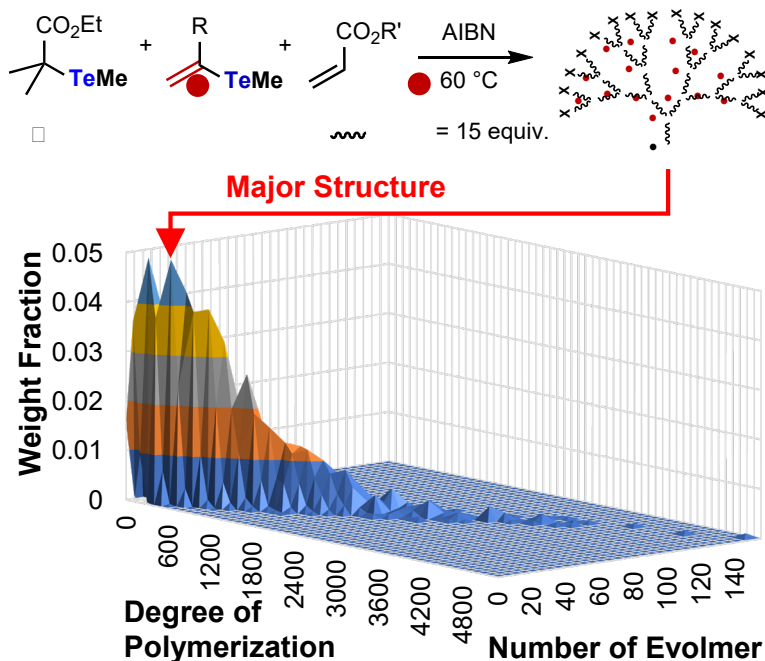


Fig. 1. Weight distribution of simulated structure of HBP.

発表論文 (謝辞なし)

[1] Tosaka, M.; Takeuchi, H.; Kibune, M.; Tong, T.; Zhu, N.; Yamago, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202305127.