

キララらせん高分子の側鎖設計にもとづく新規機能開拓

Development of New Functional Material based on Helically Chiral Polymer Bearing Designed Side Chains

京都大学大学院 工学研究科 合成・生物化学専攻 有機設計学講座 良永 裕佳子

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、Gaussian 16 を用いて、合成らせん高分子の安定配座を評価することを目的とする。特に本研究の対象は、剛直な芳香族系主鎖骨格を有するらせん高分子の、側鎖構造に依存する最安定配座である。このらせん高分子は、共有結合で繋がれた芳香族分子が少しずつ捻じれた形で互いに相互作用することにより、ロッド状の主鎖方向と平行にらせん構造を形成しているものと考えられている。また主鎖の様々な位置に置換基を導入することによって、芳香族ユニットの捻じれ度合いが変化することによって高分子全体の配座変化が起こると考えられ、それに応じた光学特性の変化が起こると考えられる。この想定配座の妥当性を確かめるため、高分子の構造として12量体までの分子の構造最適化を Gaussian 16 により行い、計算結果として得られた高分子構造がおおよそ想定通りのものであることを明らかにした。またその励起状態計算によりキララ光学特性を計算化学的に見積もり、その値を実験値と比較することによっても想定配座の妥当性を確かめた。また低分子モデル骨格で同様の計算をおこない、高分子での結果と比較することによって、実験結果として得られているキララ光学特性が高分子構造由来であることを確かめた。現在は主鎖骨格のみでの計算による解析をおこなっているが、様々な位置に側鎖を有する場合に高分子構造およびその光学特性がどのように変化するかについても今後計算をおこなっていく予定である。