

ラジカル共重合におけるモノマー反応性比のデータベース構築

Database construction of monomer reactivity ratios in radical copolymerization

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

最も重要な工業的ポリマー重合法の一つであるラジカル重合において、2 つ(またはそれ以上)のモノマー1 と 2 (Fig. 1a) の共重合は、ポリマー材料の性質を最適化するために広く用いられる方法である。モノマー反応性比 ($r_1 = k_{11}/k_{12}$ および $r_2 = k_{22}/k_{21}$) は、ラジカル共重合に世って得られるポリマー構造と特性を決定するパラメータである (Fig. 1b)。共重合体や共重合に関する情報は、既に多くの文献に蓄積されているが、適切なグラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) を備え自由に利用できるデータベースは存在しなかった。そこで我々は、2 種類のモノマーのみを用いたラジカル共重合について、GUI 機能を備えた共重合データベース、CoPolDB を構築した。

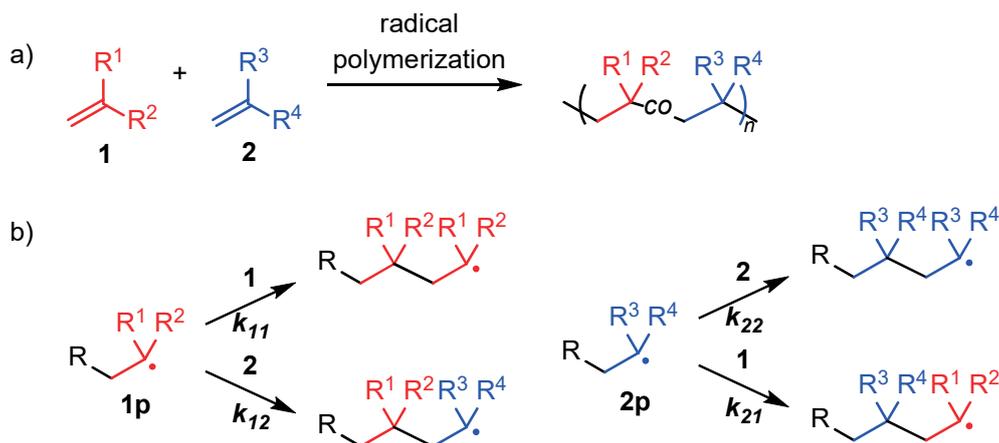


Fig. 1. Copolymerization: (a) the general reaction scheme and (b) the four propagation pathways involving the copolymerization.

CoPolDB には Polymer Handbook に掲載された 864 のモノマー、1954 のコポリマー、および 2991 の共重合反応が登録されている。ユーザーは簡単な操作でデータの並び替えや検索が出来る。CoPolDB はウェブページ上で公開されており、自由に使う事が出来る (URL <https://copoldb.jp/>)。今のところユーザーがデータを追加する機能は無いが、将来的には実装していく構想である。

発表論文 (謝辞なし)

[1] Takahashi, K.; Mamitsuka, H.; Tosaka, M.; Zhu, N.; Yamago, S. *Polym. Chem.* **2024**, *15*, 965-971.