

超分子ポリマーの精密合成 Precision Synthesis of Supramolecular Polymers

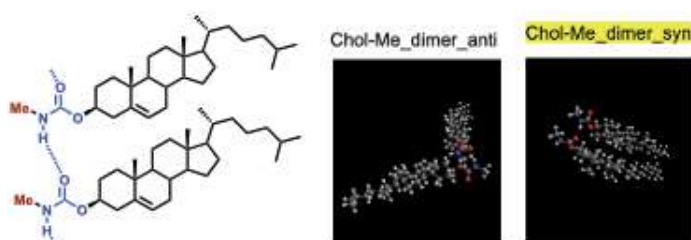
京都大学 大学院工学研究科 高分子化学専攻 杉安和憲

研究成果概要

高分子は、モノマー分子が共有結合によって連結された重合体である。これに対して、モノマー分子が非共有結合によって連結された分子集合体を超分子ポリマーと呼ぶ。超分子ポリマーは、非共有結合の可逆性を特徴としてリサイクル性や自己修復性を有する新しいポリマー材料として期待されている。しかし、超分子ポリマーは溶液中で構築されることが多く、超分子ポリマーを用いた固体材料の構築は未開拓の領域である。本研究では、超分子ポリマー材料の分子設計へ向けた分子構造とその集合構造の調査を行なった。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、量子化学計算(ソフトウェア: Gaussian・Gauss View)を行った。2つの計算結果について概要を報告する。

1. 分子集合体構造の推定

設計したモノマー分子の構造の例を図 1 に示す。コレステロールを主骨格に用いたモノマー分子を設計し、その二量体構造を計算した。コレステロールには、分子間を連結する水素結合部位と



としてウレタン結合を導入している。分子の積み重なる方向を2種類(*anti* と *syn*) 検討した(図 1)。量子化学計算(B3LYP/6-31G(d,p))と赤外領域を利用した振動円二色性スペクトルを比較した結果、*syn* 方向で二量体を形成していることが示唆された。

2. 分子の回転障壁の計算

上述した分子の誘導体として、メチル基を修飾した芳香環を持つ 2 つの分子を設計した。メチル基の立体障害によって固体中でのウレタン結合の効果を調節する役割を期待した。芳香環とウレタン部位の回転障壁が約 7 kcal/mol であり、メチル基の数によりその障壁が異なることが分かった(図 2)。今後、得られた知見をもとに超分子ポリマーの固体材料研究を進めていく。

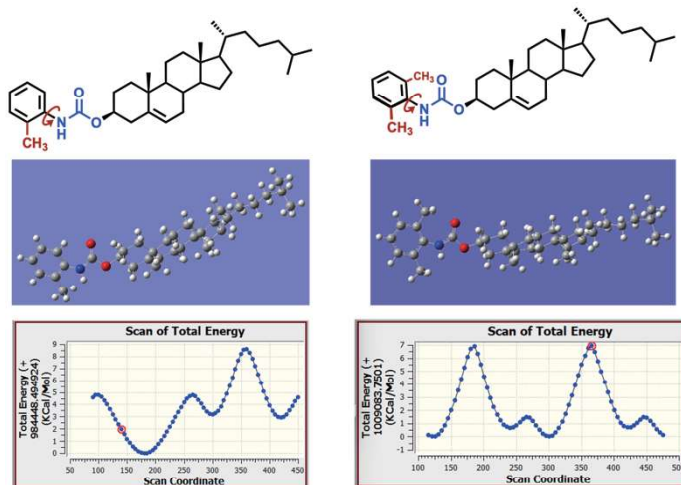


図 2. 芳香環とウレタン部位の回転障壁の計算