

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

らせん高分子は天然にも広くみられるキララ分子であり、その機能解明のため、精密らせん高分子の合成法開拓は重要な課題である。ポリイソシアニドは連鎖重合による制御合成が可能な高分子であり、その多くがらせん構造をとることから、その合成とキララ配座制御に関する研究が行われてきた。特にジイソシアニド類の環化重合によって得られる高分子は、より剛直ならせん構造として配座の固定が容易であるが、その報告は限られていた。これは重合素反応である分子内環化は環員数が大きいほど進行しにくいいためといえる。一方で最近、分子内の重合基同士が柔軟なアルキル基を含む構造で結合されたジイソシアニドモノマーの環化重合が進行することを実験によって見出した。モノマー構造の柔軟性に起因し、形成した環や高分子全体も動的な性質を有することが考えられる。一方で実験的にその動的性質を詳細に確かめることは分子の大きさ故に困難であった。そこで、高分子の配座変換のプロセスおよびその妥当性について Gaussian を用いた経路探索をおこなった。その結果、5 量体までのオリゴマーにおいてはかなり自由度の高い配座変換が可能であることが示唆され、今後の動的制御高分子としての可能性が示された。