

## 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、共有結合により分子が連結した重合体である。一方、低分子が非共有結合によって集合した系は超分子ポリマーと呼ばれる。超分子ポリマーは、非共有結合の可逆性に基づくリサイクル性や自己修復性を有する新規ポリマー材料として注目されている。しかしながら、その多くは溶液中で構築されており、固体マテリアルとしての体系的な設計指針は未開拓である。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用い、量子化学計算(Gaussian、Gauss View)に基づく分子設計を行い、固体超分子マテリアルの創出を目指した。その過程で、ガラス化挙動を示すコレステロール誘導体を見出した。本誘導体は、メチル基の修飾位置によりガラス化挙動が変化することが確認された。

そこで、メチル基による立体障害が固体中におけるウレタン結合の相互作用を調節すると仮説を立て、回転障壁の評価を行った。その結果、芳香環とウレタン部位の回転障壁は約8 kcal/molであり、メチル基の数および配置に依存して変化することが明らかとなった。以上より、本系では分子内回転の制御を通じて固体状態の相互作用を調整できる可能性が示唆された。今後は計算化学を基盤として、固体超分子ポリマーマテリアルの合理的設計を進める。

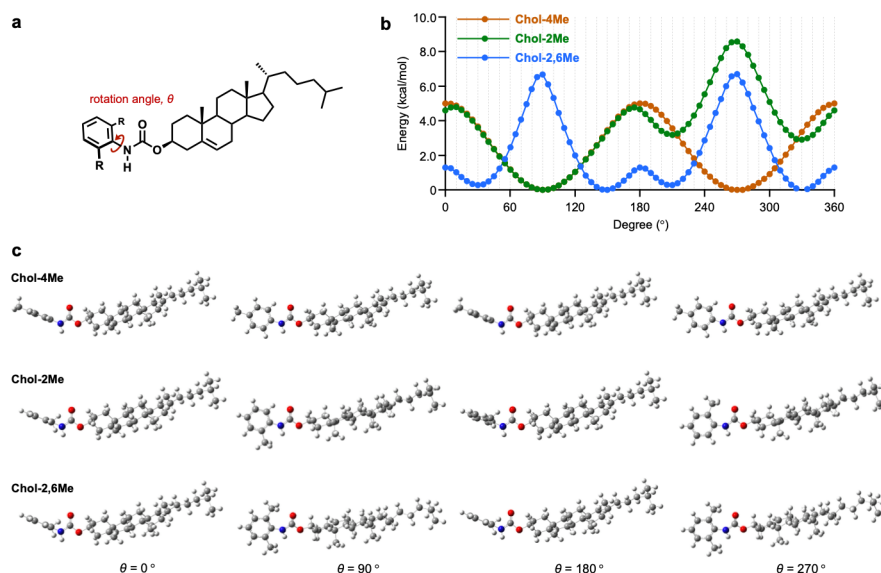


Figure 1. The chemical structure of cholesterol derivatives (Chol-4Me, Chol-2Me, and Chol-2,6Me) and their rotational barriers of the single bond connecting the phenyl and urethane groups.

発表論文(謝辞あり)

Cholesterol-Based Molecular Glasses: Attempts to Control Their Thermal Stability and Mechanical Properties, *ACS Materials Letters* **2026** DOI: 10.1021/acsmaterialslett.5c01560.