

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

High-Resolution Observation of Polymer Crystals with a Transmission Electron Microscope

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

今回は、所属研究室で開発された技術によりワンポットで合成される、多分岐高分子の分子モデリングを行った。従来の技術において、モノマーと多官能分岐剤により合成された多分岐ポリマーは、構造の分布が非常に広がるという問題があった。しかし当研究室の技術では、重合して高分子内部に取り込まれた後に活性となる分岐剤を用いることにより、構造の分布が狭い多分岐高分子を合成する事が出来る[1]。

この技術で合成された多分岐高分子が三次元的にどのような構造になっているかを明らかにするため、Materials Studio を用いて構造モデルの構築とダイナミックシミュレーションを行った。最初は粗視化シミュレーションにより、同一の総モノマー数(500個)で分岐数の異なる3種類の構造を比較した。この場合は3種類とも回転半径 R_g が同じという結果が得られた。これは予想と異なる結果であり、粗視化モデルに分子鎖の剛直性が反映されていないためだと考えられた。

そこで、実際の分子構造(今回はポリメチルアクリレート: PMA)をそのまま用いたダイナミックシミュレーションを実施した。分岐点間のモノマー数は3~68であるが、この範囲において分岐点間の部分鎖は非常に剛直に振る舞っていた。この剛直性を検証するため、モノマー数を3~500まで変えた直鎖状の PMA についてもダイナミックシミュレーションを行い、鎖長と R_g の関係を調べた。その結果、Fig. 1 に示すように、モノマー数 150 程度まで両者の間に比例関係が示された。この比例関係は、分子鎖が剛直に振る舞っていることを示すため、分岐高分子に見られた振る舞いは信頼できると考えられた。最終的に Fig. 2 に示すように、分岐高分子における分岐の程度 (generation) が増すにつれて R_g が小さくなるという結果が得られた。

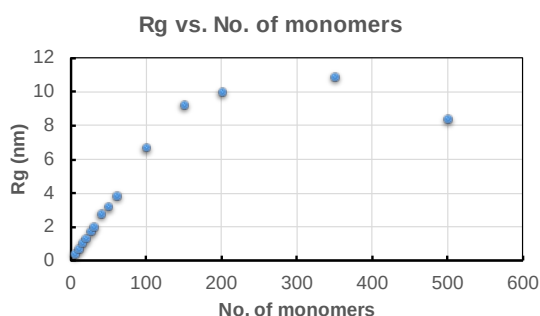


Fig. 1. モノマー数と R_g の関係

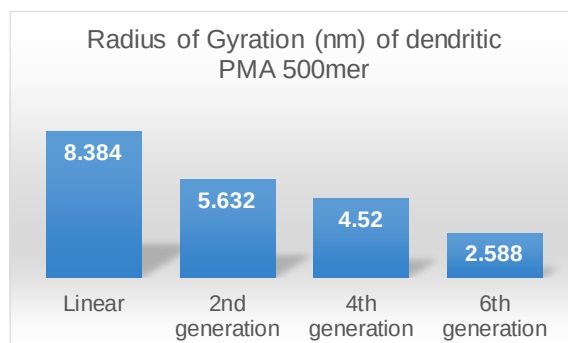


Fig. 2. 分岐の程度と R_g の関係

参考文献

[1] Lu, Y.; Nemoto, T.; Tosaka, M.; Yamago, S. *Nature Commun.* **2017**, 8, 1863.