

電場下ナノスケール制御による超分子ポリマーマテリアルの設計

Controlling supramolecular polymerization under an electric-field for materials design

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 渡邊雄一郎

研究成果概要

高分子は、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、低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マテリアルの構築は未開拓の領域である。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利用し、分子設計に向けて量子化学計算 (Gaussian・GaussView) により行った。固体マテリアルの研究を遂行する過程で、ガラス化するコレステロール誘導体を発見した。この誘導体はメチル基の修飾位置によりガラス化の挙動が異なる。そこで、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 8 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。引き続き超分子ポリマーマテリアルの設計に向けて計算を駆使していく。

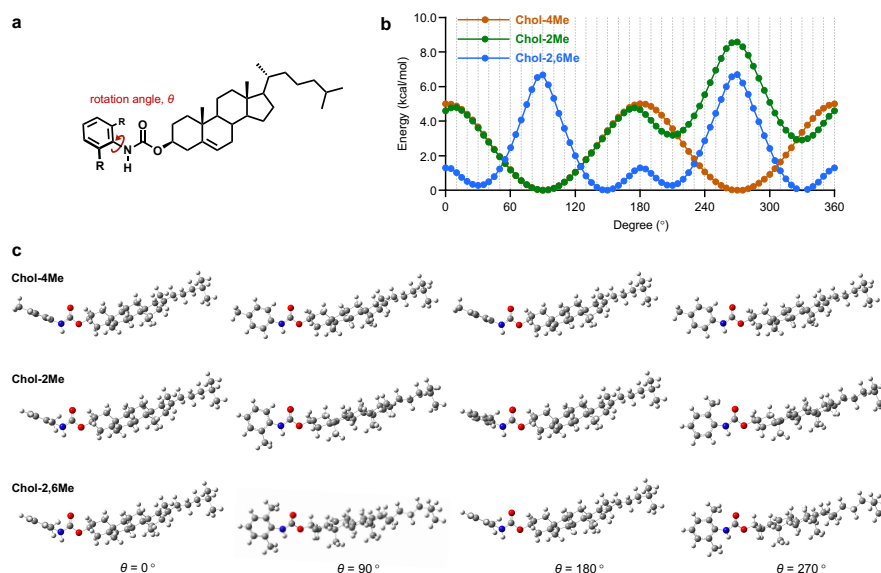


Figure 1. The chemical structure of cholesterol derivatives (Chol-4Me, Chol-2Me, and Chol-2,6Me) and their rotational barriers of the single bond connecting the phenyl and urethane groups.

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.