

透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察

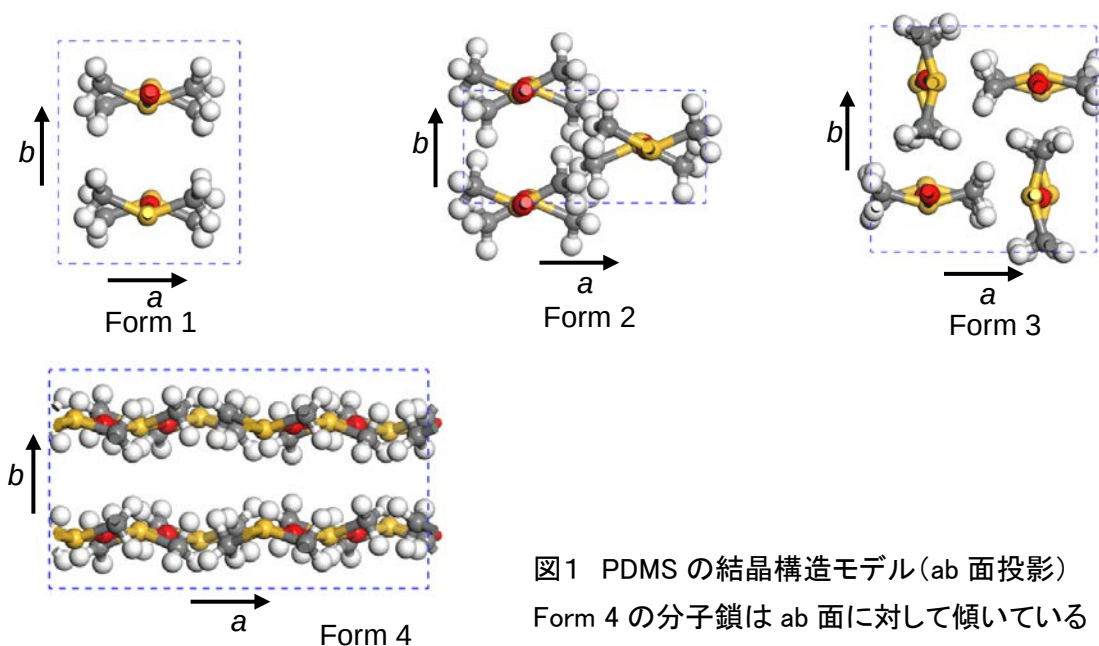
High-Resolution Observation of Polymer Crystals with a Transmission Electron Microscope

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

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、ポリジメチルシロキサン(PDMS)の結晶構造解析に取り組んだ。PDMS はエラストマーやオイル、消泡剤としての食品添加など、幅広く使われている。この PDMS は低温で結晶化するが、その原子座標を決める構造解析は未だ行われていない。

我々は昨年度までに、透過型電子顕微鏡(TEM)中で PDMS を冷却することにより単結晶を得て、その制限視野電子線回折(SAED)パターンから、5種類の結晶構造が存在することを明らかにしていた。この SAED パターンからは、結晶の *ab* 面内における分子充填の情報が得られるが、*c* 軸方向の情報は欠損している。そこで *c* 軸方向の情報はバルク試料からの X 線回折(WAXD)パターンより推定することで、エネルギー的に安定であり、かつ、回折パターンの特徴を再現できる構造モデルを Materials Studio を用いて探索した。その結果、最初に見つけた4種類について確からしい構造を提案した(図1)。また、架橋した PDMS(いわゆるシリコーンゴム)を延伸して冷却結晶化させると、WAXD パターンが延伸倍率に応じて変化するという特異な現象についても、これら4種類の結晶が混在すると考えることで説明することができた。



発表論文 (謝辞あり)

M. Tosaka, K. Tashiro, *Polymer*, **2018**, 153, 507-520.