

2023 年度年次報告書  
分解・劣化・安定化の精密材料科学  
2021 年度採択研究代表者

出口 茂

海洋研究開発機構生命理工学センター  
センター長

パロポリエステル:圧力による精密分解制御

主たる共同研究者:

古賀 毅 (京都大学 大学院工学研究科 教授)  
谷口 育雄 (京都工芸繊維大学 繊維学系 教授)

## 研究成果の概要

高圧力下でのバロポリエステルの分解挙動の解明、添加剤による汎用高分子への圧力可塑性の付与、理論・計算科学に基づくバロプラスチックの合理的分子設計の3項目に関する研究開発を実施した。

「1. 高圧力下でのバロポリエステルの分解挙動の解明」では、生分解性バロプラスチック (poly(trimethylene carbonate)-*b*-poly(L-lactide)、PTMC-*b*-PLLA) のフィラメントを試料として、アルカリ加水分解の進行に伴う重量減少を指標とした反応の定量化を試みた。反応温度 50°C で NaOH 濃度を 0.25–2.50 M の間で変化させた実験で、いずれの条件でも 40 MPa への加圧による加水分解の加速を確認した。さらに水晶振動子マイクロバランス (QCM) を用いたバロプラスチック薄膜の加圧下での分解の経時測定に向けた高圧セルを開発した。

「2. 添加剤による汎用高分子への圧力可塑性の付与」では、側鎖メチル基を導入したポリカプロラクトン誘導体と PLLA からなるバロポリエステルが、加圧下で深海の水温と同程度の 2°C で流動することを見出した。高圧セルを用いた SAXS 測定でも圧力誘起相転移を確認した。さらにバロポリエステル/PLLA ブレンドの加圧下での微細構造変化の検討に着手した。加えて、バロプラスチックサイザーの概念を一般化するために、ポリスチレン (PS) に poly(2-ethylhexyl acrylate) と PS からなるバロプラスチックを添加し、流動温度を最大 100°C 低下させることに成功した。

「3. 理論・計算科学に基づくバロプラスチックの合理的分子設計」では、「空孔を考慮する方法」で構築した圧縮性自己無撞着場理論を多成分系へ拡張し、バロプラスチックに対する加圧媒体ガスの種類の効果、ホモポリマーとの混合系の相分離挙動を検討した。また、動的理論への拡張を行い、圧力およびせん断流印加による構造変化過程の計算を可能とした。さらに、全原子分子動力学シミュレーションによる空孔の可視化と相互作用パラメータの評価を行った。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Deguchi, S., Degaki, H., Taniguchi, I. & Koga, T. Deep-Sea-Inspired Chemistry: A Hitchhiker's Guide to the Bottom of the Ocean for Chemists. *Langmuir* **39** (23), 7987–7994 (2023)  
DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c00516  
(Highlighted on Supplementary Cover)
- 2) Degaki, H., Taniguchi, I., Deguchi, S. & Koga, T. Critical Role of Lattice Vacancies in Pressure-Induced Phase Transitions of Baroplastic Diblock Copolymers, *Soft Matter*, **20** (18), 3718–3731 (2024)  
DOI: 10.1039/d4sm00098f