

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

鈴木 大介

信州大学 学術研究院繊維学系  
准教授

力学的安定性と選択的分解性を兼備した循環型高分子微粒子材料の創成

主たる共同研究者:

内橋 貴之 (名古屋大学 大学院理学研究科 教授)

呉羽 拓真 (弘前大学 大学院理工学研究科 助教)

中藪 和子 (東京工業大学 物質理工学院 准教授)

藤本 和士 (関西大学 化学生命工学部 准教授)

## 研究成果の概要

本研究では、高い力学安定性を維持した上で、特定の条件下で、単一微粒子まで意図的に分解できる微粒子材料の開発を目的としている。モデルとなる強靱なポリメチルアクリレート(pMA)微粒子フィルムを活用し、放射光 X 線散乱や独自開発した一軸伸長装置複合型高速 AFM によるナノ構造評価に加え、分子スケールでの議論が可能な計算化学を用い、本年度は、単一微粒子まで分解可能な微粒子フィルムの強靱化メカニズムの解明に取り組んだ。特に、放射光 X 線散乱解析から定量した pMA 微粒子フィルムの粒子界面間の相互貫入深度(pMA 鎖の絡まり合い割合)は、pMA 鎖の架橋度に大きく依存し、力学安定性(例:破断エネルギー)と高い相関を示した。この静的構造評価に加え、その場 X 線散乱測定からフィルム変形下での微粒子構造変化を追跡し、架橋度が高いほど微粒子の変形が抑制されることがわかった。更に、全原子 MD シミュレーションにより pMA 微粒子を再現することに成功し、相互貫入に必要な pMA 鎖の運動性(ゆらぎ)が高架橋度で抑制されることを確かめ、直観的に、かつ分子スケールで散乱結果を支持した(現在、論文提出・査読対応中)。即ち、微粒子材料の静的・動的・階層的な構造をナノからミクロスケールで評価する手法を確立し、力学安定性の制御指針を得ることができた。

また、新規ロタキサン架橋剤の開発を通じた微粒子フィルムの最大強靱化を進める中で、強靱化が可能な化学種の拡張性を確認することができた。更に、微粒子フィルムの強靱化の鍵を握るロタキサン環分子の自由エネルギー計算手法を確立するなど、チーム内における有機的な連携を通じ、想定以上の進捗が見られている。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Sasaki, Y. Nishizawa, Y. Watanabe, T. Kureha, T. Uenishi, K. Nakazono, K. Takata, T. Suzuki, D. Nanoparticle-based Tough Polymers with Crack-propagation Resistance, *Langmuir*, **39**, 9262-9272, (2023).  
\*Selected as supplementary cover.  
DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c01226
- 2) Nishizawa, Y. Yokoi, H. Uchihashi, T. Suzuki, D. Single Microgel Degradation Governed by Heterogeneous Nanostructures, *Soft Matter*, **19**, 5068-5075, (2023).  
\*Selected as front cover.  
DOI: 10.1039/D3SM00216K
- 3) Fujimoto, K. Ishikawa, H. Tang, Z. Okazaki, S. All-atom Molecular Dynamics Study of the Impact Fracture of Glassy Polymers. III: Compressive Fracture of PC and PMMA, *Polymer*, **283**, 126276 (2023).  
DOI: 10.1039/D3SM00216K
- 4) Suzuki, D. Nanogel/Microgel Science and Beyond, *Langmuir*, **39**, 7525-7529 (2023).  
\*Perspective, \*Selected as supplementary cover.  
DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c00560