

原子・分子の自在配列と特性・機能
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

松本 和弘

産業技術総合研究所 材料・化学領域
主任研究員

自在配列合成で拓く精密構造制御無機高分子の新展開

§ 1. 研究成果の概要

本研究は、シロキサン化合物の配列構造を自在に制御して合成することのできるワンポット配列制御合成法を基盤として、多種多様な配列構造を有するシロキサン化合物を自在に合成し、その配列構造が物性に与える影響を体系化するとともに、機械学習を取り入れた物性予測技術を開発することを目的としている。これまでのワンポット配列制御合成法では、ヒドロシランをモノマーに用いることでシロキサン結合を1つずつ伸長させていた。この手法により着実なシロキサン伸長が可能であることは実証済みであるが、10 量体を超えるような長鎖のシロキサン化合物の配列制御合成では、収率や反応時間を含めた効率性に改善の余地が残されていた。そこで 2021 年度は、一度に複数のシロキサンユニットを導入することができ、なおかつワンポット配列制御合成法にそのまま適用可能なシロキサンビルディングブロックの開発を行なった。その結果、反応性の異なる2種類の官能基を分子内に適切に配置したシロキサン化合物が、ワンポット配列制御合成法にそのまま適用可能なビルディングブロックとして機能することを見出した。このビルディングブロックの基本デザインに基づくことで、直鎖状だけでなく、分岐状や環状のシロキサンビルディングブロックを合成することも可能であった。本ビルディングブロック法を用いることにより、分子量や置換基組成は全く同じでありながら、置換基の配列構造のみが異なる 20 量体以上の配列異性体を作り分け、良好な収率で単離できることを見出した。合成した配列制御シロキサン化合物について、熱分析を実施したところ、ケイ素原子上の置換基が単純なメチル基とフェニル基の組み合わせであったとしても、その配列構造が熱物性に影響を及ぼすことを明らかにした。