

原子・分子の自在配列と特性・機能
2021 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

松本 和弘

産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター
研究チーム長

自在配列合成で拓く精密構造制御無機高分子の新展開

研究成果の概要

本研究の特徴であるシロキサン化合物のあらゆる配列構造を自在に合成できるという点を活かし、2022年度は主として、シロキサン化合物の配列物性相関研究を実施するための基盤となるシロキサン化合物ライブラリの整備を集中的に実施した。独自技術であるワンポット配列制御合成法と2021年度に開発したシロキサンのビルディングブロック法、加えて信頼性の高いシロキサン結合形成法であるシラノールとヒドロシランの脱水素縮合法を適切に組み合わせることで各種配列制御シロキサン化合物を合成した。この際、配列物性相関研究を行う予定であることから、諸物性に影響を及ぼすことが予想される末端基や連続するジフェニルシリルユニットなどに注目し、共通する部分構造を有するシロキサン化合物や分子量・組成が同じでモノマー配列構造のみが異なる配列異性体・構造異性体を中心に系統的な合成を行った。市販されているシリコーン(ポリシロキサン)材料のケイ素原子上の置換基はほとんどがメチル基とフェニル基であることから、ヒドリドや水酸基、アルコキシ基といった反応性基を有さずメチル基とフェニル基のみからなる直鎖状のシロキサン化合物だけでも、5量体から26量体の70種以上を合成し、シロキサン化合物ライブラリの整備を進めた。また、いくつかのシロキサン化合物の単結晶 X 線構造解析を行い、ジフェニルシリルユニットが連続するドメインではシロキサン主鎖が同一面内でジグザク配置となるコンフォメーションが共通して見られることを見出した。今後も本シロキサン化合物ライブラリを順次拡充していくとともに、収集されたシロキサン化合物の諸物性を評価することで配列物性相関データベースを構築する予定である。