



研究課題名 構造が制御された超分岐高分子を基盤とする次世代高分子材料の開発

京都大学・化学研究所・教授

やまご しげる
山子 茂

研究課題番号： 21H05027

研究者番号： 30222368

研究期間： 令和3年度～令和7年度 研究経費（期間全体の直接経費）： 147,100千円

キーワード： 超分岐ポリマー、 dendrimer、ラジカル重合、単分子ミセル、自己修復性材料

【研究の背景・目的】

合成高分子材料は現代社会の QOL 維持に必須な基盤材料であり、そのさらなる機能の向上が多くの用途で望まれている。一方、安価・安定で加工しやすい、といった合成高分子材料の本来の利点は、廃棄プラスチックごみ問題の起源として顕在化してきており、その解決も焦眉の課題である。本研究ではこの両方の課題の同時解決を可能とする物質として、構造の制御された超分岐ポリマー (HBP) に着目する。

HBP 合成においては、構造制御と実用性とはこれまでトレードオフの関係にあったことから、構造の制御された HBP を用いる材料開発は未開拓分野である。それに対し本研究では、研究代表者が最近開発した、制御ラジカル重合を用いる、実用性と構造制御とを兼ね備えた方法で得られる HBP を用いる。この方法はリビング性を持つことから、成長末端を様々な官能基へと変換できる。そこで、多数ある HBP 末端基の相互作用を利用することで、高機能性・修復性に優れた高分子材料の創製を目的とする。これは、従来の高分子材料創製が、線状ポリマーの分子鎖の絡み合いを利用している点と相補的な方法になると考えている。

【研究の方法】

1) HBP 合成の深化による新しい HBP 分子の創製、2) HBP の構造と物性・機能の解明、3) HBP の特徴を活かした材料開発、4) これらの結果のデータベース化と AI を用いた機械学習による HBP 合成・物性・機能インフォマティクスの構築、について検討する。これらを通じて、HBP を鍵物質とする次世代合成高分子材料創製を行う。以下にその具体的な方法を示す。

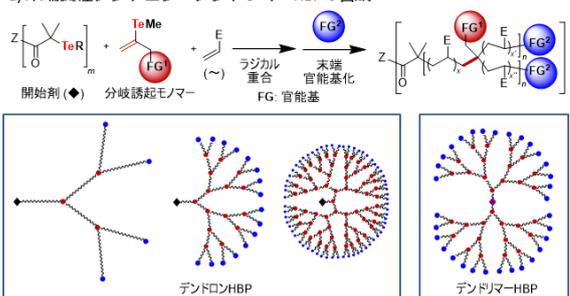
1) すでに開発した HBP 合成法において、新たな開始基を用いることによる構造の多様化と、分岐モノマーと重合条件の最適化による構造のさらなる制御、さらに、成長末端の変換による様々な末端官能基・機能基の導入について検討する (図 1a)

2) 合成した HBP に対し、希薄溶液における単分子としての構造について、HBP の分岐数、分岐密度、分子量の分岐構造の効果を、放射光小角 X 線散乱や光散乱測定を用いて解明する。このデータは、HBP の一次構造が生み出す特徴的な物性の起源を解明する基礎データとなる。さらに、HBP のバルク系における凝縮構造形成のダイナミクスについても同様な手法を用いた検討を行う。

3) HBP の一分子性を活かした機能開発、例えば、金属ナノ粒子合成や薬物輸送システムへの応用と共に、末端官能基の相互作用を利用した修復性材料や刺激応答性材料の開発を行う (図 1b)。

4) 実験結果に加え、シミュレーション結果も含む、

a) 末端変性 dendron・dendrimer-HBP の合成



b) 末端変性 dendron・dendrimer-HBP の機能開拓

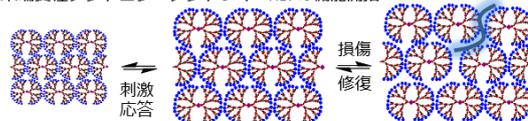


図 1. HBP の合成および機能開拓に関する研究概要

HBP の合成、構造、機能に関する統合的データベースの構築を行う。さらに得られたデータベース AI 学習により適切なモデル化を行うことで、HBP 合成の反応性や物性の予測ツールを作成する。

【期待される成果と意義】

構造が制御された末端官能基化 HBP における末端基の相互作用を利用する、高分子材料の創製の学理の基礎とデータベースとの構築が期待される。分岐構造に由来する機能の向上と、末端基の可逆的な相互作用による修復性材料の開発が期待される。特に、末端基相互作用を用いる新概念の提唱のみならず、本 HBP 合成法はスケールアップも容易であることから、社会実装を見据えた新研究領域の創出が期待される。これらを通じて、プラスチック材料の高機能化と長寿命化の基礎を築き、安全・安心な社会の実現とグリーン・イノベーションに寄与すると考えられる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ Yamago, S. "Practical Synthesis of Dendritic Hyperbranched Polymers by Reversible Deactivation Radical Polymerization", *Polym. J.* **2021**, *53*, 847-864.
- ・ Lu, Y.; Nemoto, T.; Tosaka, M.; Yamago, S. "Synthesis of structurally controlled hyperbranched polymers using a monomer having hierarchical reactivity", *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1863.

【ホームページ等】

<http://os.kuicr.kyoto-u.ac.jp/index.html>
yamago@scl.kyoto-u.ac.jp