

コントラスト変調中性子散乱法による 多成分系超分子材料の構造・ダイナミクス解析

東大院新領域
眞弓皓一

Structure and Dynamics of Supramolecular Systems
Investigated by Contrast Variation Neutron Scattering
Department of Advanced Materials Science, The University of Tokyo
K. Mayumi

環状分子を軸分子が貫通した超分子であるロタキサンは、環状分子が軸分子上をスライド・回転することができ、この分子内運動自由度を利用した分子マシンの開発に対して2016年ノーベル化学賞が授与された。ロタキサンの応用は分子レベルのデバイスにとどまらず、近年ではロタキサン構造を高分子材料に導入することで、優れた力学物性を示す高強度材料が開発されている。本講演では、部分重水素化したロタキサンのコントラスト変調中性子小角散乱測定および中性子準弾性散乱測定によって、ロタキサンの環状分子および軸高分子の分子構造およびダイナミクスを計測した結果について紹介する。コントラスト変調中性子小角散乱法を用いることで、環状分子と軸高分子から構成されるトポロジカル超分子の構造、および環状分子の軸高分子上における分散状態が初めて観察された [1, 2]。また、軸分子が h 体、d 体の 2 種類のロタキサン溶液に対して中性子準弾性散乱測定を行い、ロタキサン中の環状分子および軸分子モノマーの拡散係数を定量した。次に、ロタキサン溶液の全原子分子動力学 (MD) シミュレーションを行い、中性子準弾性散乱の測定結果を合わせることで、軸分子上における環状分子のスライド運動の拡散係数を定量することに世界で初めて成功した [3]。

[1] Mayumi, K., Endo, H., Osaka, N., Yokoyama, H., Nagao, M., Shibayama, M., Ito, K., *Macromolecules*, 42, 6327–6329 (2009).

[2] Mayumi, K., Ito, K., *Polymer*, 51, 959–967 (2010).

[3] Yasuda, Y., Hidaka, Y., Mayumi, K., Yamada, T., Fujimoto, K., Okazaki, S., Yokoyama, H., Ito, K., *J. Am. Chem. Soc.*, 141, 9655–9663 (2019).