

分子動力学シミュレーションによる外部刺激応答性らせん高分子の構造解明

(北里大院理¹・金沢大院自然科学²・北里大理³・KISTEC⁴) ○石井 佐和¹・西村 達也²・前田 勝浩²・渡辺 豪^{3,4}

Molecular dynamics simulation study of external stimuli-responsive helical polymers (¹Graduate School of Science, Kitasato University, ²Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University, ³School of Science, Kitasato University, ⁴Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology) ○Sawa Ishii,¹ Tatsuya Nishimura,² Katsuhiro Maeda,² Go Watanabe^{3,4}

The poly(diphenylacetylene) derivatives bearing optically active substituents through an amide linkage form a precise helical structure. Therefore, they are expected for applications to various functional materials such as chiral discrimination materials and circularly polarized luminescent materials. It has been reported that these polymers showed different solution colors in response to external stimuli while the detailed structure of the polymers has not been understood. In the present study, we performed molecular dynamics simulations of the stimuli-responsive helical polymers in solutions with different temperatures or solvents and investigated their structures in equilibrium. As a result, it was confirmed that the stable helical structure of the polymer was different depending on the temperature or solvents. The conformation in the main chain and the hydrogen bonding in the side chains of the helical structure at each condition showed good agreement with experiments.

Keywords : *Molecular dynamics simulation; Helical polymer; External stimuli-responsive materials*

側鎖にアミド結合を介して光学活性基が導入された対称置換型のポリ(ジフェニルアセチレン)誘導体は、重合によって精密ならせん構造を形成するため、不斉識別材料や円偏光発光材料など様々な機能性材料への応用が期待されている¹⁾。最近、外部刺激によりらせん構造が変化して溶液色に違いが見られるポリマーが報告されているが、詳細な構造変化までは明らかとなっていない。そこで本研究では、この外部刺激応答性らせんポリマーを対象として、温度や溶媒が異なる溶液中で分子動力学シミュレーションを行い、各系の平衡状態におけるポリマーの安定構造について調べた。その結果、特定の温度下、あるいは溶媒中において、ポリマーが有するらせん構造が各々異なることが確認された。また、各条件において安定であったらせん構造では、主鎖のコンフォメーションや側鎖における水素結合状態が実験結果をよく再現することも分かった。

1) K. Maeda *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 7668-7682.