

混合溶媒を用いた水素結合性高分子の UCST/LCST 相分離スイッチングの解明

(北大院理¹・北大院総化²) ○佐田 和己^{1,2}・鷹栖 光希²・稲葉 奈月²・松岡 慶太郎^{1,2}・堤 拓朗^{1,2}

Elucidation of UCST/LCST phase separation switching of hydrogen bonding polymers in binary mixed solvents (¹*Faculty of Science, and* ²*Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University*) ○Kazuki Sada^{1,2}, Koki Takasu², Natsuki Inaba², Keitaro Matsuoka^{1,2}, Takuro Tsutsumi^{1,2}

In this presentation, we demonstrate the switching of UCST/LCST phase separations of poly(hydroxyethyl methacrylate) (PHEMA) in binary solvent mixtures of alcohols and less-polar organic solvents by varying the mixing ratios. The phase diagram revealed that UCST-type phase separation occurred at higher mixing ratios, while LCST-type separation occurred at lower. These phenomena arise from the formation and dissociation of hydrogen bonds between the hydroxyl groups of PHEMA and the alcohol in the solvent mixtures, as well as the cosolvent effect. We further investigated molecular dynamics simulations of PHEMA in the solvent mixtures to analyze the interactions between them.

Keywords : *thermo-responsive polymers, lower critical solution temperature, upper critical solution temperature, mixed solvent, co-solvency*

PHEMA (ポリ(メタクリル酸 2-ヒドロキシエチル)) は水酸基をもつ非イオン性親水性高分子として、広く研究されてきた。われわれはこの高分子が低極性溶媒とアルコールとの混合溶媒中で下限臨界共溶温度(LCST)型相分離を示すことを報告している[1]。本発表ではアルコールを水素結合性良溶媒とし、様々な溶媒との混合における PHEMA の相分離挙動を報告する。溶媒の組み合わせと混合比率に依存した UCST/LCST 相分離のスイッチングに注視し、実験と MD シミュレーションの結果からこの現象の解明を目指す。

混合溶媒を用いて PHEMA 溶液を調製し、その混合比率を変化させ、-60~100 °C の温度領域において、相分離を網羅的に検討した。アルコールと低極性溶媒の混合系では、アルコールの混合比率が大きい場合、UCST 型相分離が生じ、低極性溶媒の混合比率が大きい場合、LCST 型

相分離が生じた。混合比率による相分離の方向性の逆転である。中間の混合比率では完全溶解領域が存在し、共溶媒効果が確認された。PHEMA の水酸基と溶媒のアルコールの水素結合の形成と解離により生じたものと考えられる。

1) Inaba, N. *et al.*, *Mol. Syst. Des. Eng.*, **2023**, 8, 79; *Polym. Chem.* **2024**, 15, 2354,

