

代表的液晶性高分子である全芳香族ポリエステル、ベクトラは Head-tail 構造を持ち分子長軸方向に大きな極性を有する。我々はベクトラが主鎖だけでなくカルボニル基の極性の向きも揃えた二軸性極性ネマチック液晶を形成し、高い非線形光学効果を示すことを明らかにしてきた。特にこの高分子は可視域に吸収を持たないことから、新たな2次の非線形光学材料としても有望と考えられる。

以上のことはポリエステルに限らず、全芳香族ポリアミドでも本質的には起こりうると考えられる。しかし、全芳香族ポリアミドは融点が高く溶媒への溶解性が乏しいためサーモトロピック液晶発現は難しく、強酸などによるリオトロピック液晶による成型加工が行われている。一方、溶媒溶解性の向上や融点を下げたため、アミド結合の水素のアルキル置換が行われてきたが、残念ながらサーモトロピック液晶性を示さずアモルファス高分子が得られるにとどまっている。

以上の原因を調べるため、アミド結合の水素をメチル基に置換した N-methylbenzanilide のアミド結合の二面角に対するポテンシャルエネルギー変化の量子化学計算を行った。Benzanilide ではトランス体がシス体より 4.85kcal/mol 安定であるのに対し、アミド結合の水素をメチル基に置換すると、逆にシス体がトランス体より 2.99kcal/mol 安定になった。つまり、芳香族ポリアミドはアルキル基を導入することにより、ポリエステル系とは異なり主鎖の直線性を失うため液晶性を示さずアモルファス高分子となったと考えられる。しかし、さらなるモデル計算から、アルキル基に不斉炭素などを導入することで右図に示すようならせん構造の発現の可能性が示唆され、新たならせん高分子として期待される。

