

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	林 正太郎
研究機関名	高知工科大学
所属部署名	理工学群
役職名	准教授
研究課題名	柔軟性分子性結晶の創出とその機能解析
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

分子結晶は結晶中における分子の間で働く引力と斥力が拮抗し、全体として熱力学的に安定した超分子集合系からなる。これにより、機械応力に対しては斥力に基づく構造崩壊が起こるため、典型的な脆性材料といえる。一方、我々は柔軟性分子結晶という塑性や弾性変形が可能な分子結晶の実現を分子・高次構造設計の観点から目指した。さらに、その計測や応用に目を向けた新現象発現と利用方法の開拓をも目指している。以下に 2022 年度の主だった取り組みについて示す。(1: 弾性結晶の創製と変形—構造相関の解析) 弾性的振る舞いを示す分子結晶として棒状 π 共役系分子とその短軸に対する置換基修飾といった分子設計戦略に基づき、発光性分子結晶創成が期待できるアクリロニトリル系構造に注目した。1,4-ジメトキシテレフタルアルデヒドに対し、4-ブロモフェニルアセトニトリルの縮合によって得られた π 共役系分子を結晶化させることで、発光性結晶を得た。これをジグに固定し応力負荷をかけると変形し、開放すると元に戻る弾性変形を示した。ここで、曲げ変形歪みを-1~-3%程度までジグで与えた結晶に対して X 線構造回折を行ったところ、変形によって結晶表面の構造が変化することが確かめられた。これは、結晶変形が結晶構造変形に基づいていることを示している (BCSJ 2022)。

(2: 柔軟性分子結晶創出に向けたアントラセン分子の探索) 高い π 平面性をもつアントラセン分子は結晶化を行うための適度な溶解性や合成による化学構造制御性に優れる。アントラセンに対する置換基の付与方法に加え、様々なアントラセン誘導体がどのような電荷分布に基づいて結晶構造を決定しているのかを理解することができた。この分子系における設計と結晶構造形成をまとめることで、アントラセン構造の設計に基づいた柔軟性分子結晶の自在な創生が実現できる (ChemPlusChem 2022)。