

ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-1. 結晶分類
小項目	1-1-7. 分子性結晶

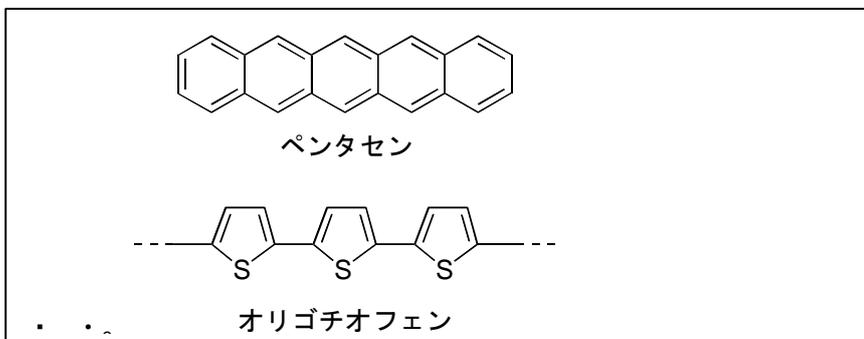
概要（200字以内）

分子性結晶は、狭義にはファンデルワールス力により形成された結晶を指す。パッキング構造の理論的な研究や、分子素子関連研究の研究対象にもなっている。また、静電相互作用や水素結合などの強い相互作用が働くものも、広義の分子性結晶として扱われる。相互作用を利用した特異なパッキング構造や、それに起因した、興味深い物性が研究対象となっている。



現状と最前線

分子性結晶は、狭義には分子間にファンデルワールス力のみが働く結晶を指す。他の相互作用の寄与がない分、分子構造と結晶構造との相関の解釈が容易であるため、結晶構造についての理論的研究の対象として多く取り上げられている。



研究のためには、結晶構造の精密測定が必要であるが、そのために単結晶X線回折法に加え、粉末X線回折法が近年急速に重要性を増している。

結晶構造を予測できれば、材料設計にきわめて有効であるが、その厳密な予測は、現在蓄積された知識と豊富なコンピューターリソースを持ってしても未だ困難な場合が多い。今後の発展が待たれている。興味深い物性を示す分子性結晶としては、ペンタレンやオリゴチオフェンなど（有機半導体としての性質を示す）がある。

一方、水素結合や静電相互作用などの相互作用を持つものも、広義の分子性結晶として扱われる。このような結晶には、光機能性や導電性、誘電や表面機能など興味深い物性を示すものが多く、広範な分野において研究対象となっている。それら物性の基礎となるものは分子構造と並びパッキング構造であるが、それをどのようにして制御するかが大きな興味となっている。分子構造制御の手段は、クリスタルエンジニアリングと呼ばれ、種々の分子間相互作用が用いられ一定の成果が上げられている。ただし、未開拓の分野も多く残されており、今後ますますの発展が期待されている。

引用文献：「有機機能材料」（荒木孝二、明石満、高原淳、工藤一秋）、東京化学同人；「材料有機化学」（伊与田正彦）、朝倉書店

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

分子性結晶の研究には単結晶X線回折法が従来広く用いられてきたが、最近それに加え粉末X線回折法が台頭してきている。同法は大きな可能性を秘めているにもかかわらずそれを生かし切れていないことから、5年程度の間広く普及されることが望まれる。また、クリスタルエンジニアリングについて、さらに多くの例が求められると同時に、過去の知見を包括的に処理するデータベースやソフトウェアの開発の整備が必要だろう。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

今後さらなるコンピューターの発展が期待されることから、複雑な計算時間の劇的な短縮が期待できる。それをを用いることで、結晶構造予測はかなりの進歩を遂げていることだろう。同時に、分子間相互作用の理論的解明も進んでいることから、狭義・広義ともに、目的とする結晶構造を有する分子性結晶を得るための指針というものがかなりの程度確立されていることが予想され、また望まれる。

キーワード

ファンデルワールス力、結晶構造予測、結晶構造解析、構造－物性相関

(執筆者： 林 直人)