

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	1-1-8. 分子集合体

概要（200字以内）	
<p>分子間力で有機分子が自己集合化して構築する分子集合体の中にあつて、分子性結晶の研究が主流であるのは当然であるが、近年、複合的な機能発現、操作性のある分子集合体を目指し、集合化の階層性を高める、集合体の中の乱れ、動きを積極的に利用する研究が活発に展開されている。また、溶液中で形成されるミセル、ベシクルなどの柔軟性のある構造体を対象とし、構造体全体の形態変化、アロステリック効果などを研究する分野が注目され始めた。</p>	<p>図 (Table of contents) 図はこの場所に添付した後、外枠は消して下さい。</p>
現状と最前線	
<p>1. 分子性結晶</p> <p>集合体としての電子構造に着目した分子性導体、分子磁性、誘電性、光学特性などが、研究されている。最近、有機物で初の低温で負性磁気抵抗を示す磁性・導電性共存系が報告された。複数の物性が協同的に発現する現象として注目される。また、X線結晶構造解析の進歩に伴い、乱れ、動きがある結晶の構造解析が可能になり、数々の重要な知見が得られつつある。結晶内のジアリルエテン型分子のペダル運動解析、水分子の出入りに伴う水素結合の改変とオリゴヌクレオチドの配列の変調などが、詳細に研究された。水素結合に関しては、水素結合内でのプロトンの移動と連動したπ-共役系の極性反転が、誘電性を引起す現象についても中性子線回折を用いた。</p> <p>研究でその詳細が解明された。一方、ホスト-ゲストからなる包接体結晶におけるゲスト包接の選択性の向上や、不斉認識についても大きな進展があった。</p>	
<p>2. 2次元結晶</p> <p>基板との相互作用を利用した規則的分子配列を持つ2次元結晶の研究が活発に行なわれており、操作型プローブ顕微鏡による分子配列の観察では目覚ましい成果が挙げられている。</p> <p>ドメインの移動の観察。分子の回転運動の観察など分子集団内でのダイナミクスについての知見が得られつつある。</p>	

3. 柔軟な構造体

分子性結晶は構造、物性・機能性の相関が厳密に行なえるところに最大の長所がある。その成果を踏まえて、より柔軟な分子集合体を対象とする研究動向が現れてきた。両親媒性分子が水中で形成するミセル、ベシクル、螺旋状構造体、ネットワーク構造体などが挙げられる。これらの構造体全体の形態変化、ダイナミクスを研究する分野が発展を遂げつつある。特に、膜前駆体を添加するとベシクル内で膜分子に変換し、ベシクルそのものの数が増える自己増殖性、自発的に走行する油滴、自発的に巻き直し運動をする螺旋状構造体など、今までの自己集合体の概念を打ち破る分子構造体が誕生しつつあることに注目したい。

分子集合体の構築としては、すぐれた協同性、認識能、操作性を目指すために、階層性のある構造体の設計に関心が集まるであろう。そのためにX線回折法を初めとして、電子線回折、操作型プローブ顕微鏡など多彩な計測機器を用いた構造解析法が発達するであろう。特に、分子集合体の物性研究としては、単に無機物質の物性・機能性を分子集合体でも実現することを目指すのではなく、分子集合体ならではの機能開拓を目指す時代に差し掛かったといえる。その際、階層間の界面を介した情報伝達の仕組みをどのように設計するかが重要なヒントとなり、分子集合体における情報の創出、伝播、作動といった流れを組み込んだ集合体が、現実のものになっていくであろう。このような構造やダイナミクスの階層性を持つ分子集合体は、物性・機能性に新たな環境応答性、可塑性（履歴性）を担わせることを可能にする。こうした動的分子集導体の構造いかに解明するかは、挑戦的課題となろう。

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
階層性のある分子集合体の構築指針
情報の発信、伝播、作動の流れを持った分子集合体の構築
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
可塑性をもつ分子ネットワーク回路
人工細胞の構築
自発的に運動する分子集合体

キーワード

分子性結晶、二次元結晶、階層性、X線回折法、協同効果

(執筆者： 菅原 正)