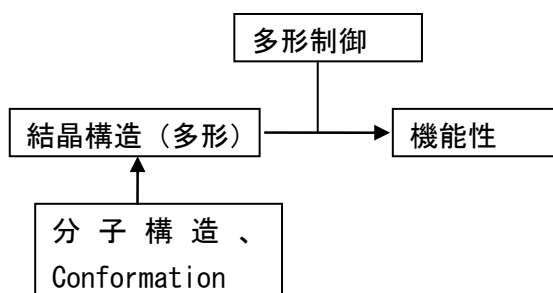


| | |
|----------|------|
| ディビジョン番号 | 16 |
| ディビジョン名 | 有機結晶 |

| | |
|-----|-------------|
| 大項目 | 1. 構造 |
| 中項目 | 1-2. 構造情報 |
| 小項目 | 1-2-2. 結晶多形 |

概要（200字以内）

多形構造はさまざまな結晶の機能性を決定する要因である。多形を選択的に得る（多形制御）ためには、温度、過飽和度、溶媒、添加物などの因子と多形の核発生、成長、転移挙動との相関ならびにこれらメカニズムを明らかにすることが重要である。分子構造や溶液中コンフォー

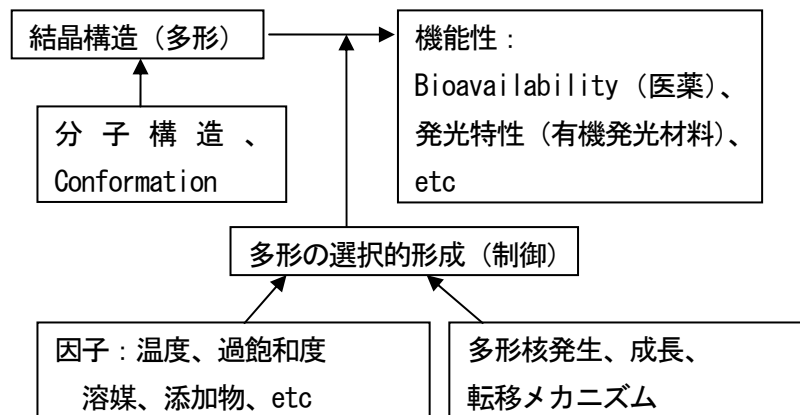


メーションと多形現象の関係も検討が始まっている。今後は分子シミュレーションと実験による検証が進めば、多形構造予測のみならず多形現象の予測が可能になるかもしれない。

現状と最前線

「結晶多形 (polymorph) とは同一化合物でありながら分子配列の異なるものと定義されている。結晶多形が現れる現象結晶多形現象と呼ぶ。溶媒和物、包接化合物もホスト構造に着目すれば多形現象としての取り扱いが可能である。多形は構造の違いによって、密度、融点、溶解度などの物理化学的性質が変化する。また、結晶のモルフォロジーや粒径分布を変化させ、医薬の bioavailability、有機発光材料の発光特性、非線形光学材料の光学特性などさまざまな結晶の機能性に影響を与える。このため、多形問題に関する注目は近年急速に高まり、多形構造と分子構造ならびに機能性との関係についてさまざまな研究が進められている。また、多形ではエネルギー（熱、光など）によって準安定形と安定形の間で転移が起こるが、その現象の機能性への応用などについて検討が行われている。一方で転移は貯蔵結晶の固結固化など種々の問題の原因ともなる。したがって、多形制御はその析出過程のみならず転移を利用した機能性結晶の生成や結晶品質管理においても重要な問題となっている。多形を選択的に得る（多形制御）ためには多形の析出挙動や転移挙動、さらにはそれらのメカニズムを明らかにする必要がある。多形結晶の析出過程は核発生、成長に加えて転移が同時に進行する場合が多い。このため、多形の析出制御を行うためにはこれら各素過程を分離して検討する必要がある。

さらに、多形の析出や転移は温度、過飽和度、溶媒、添加物など種々の因子によって影響を受ける。このため、これら各因子と多形の析出、転移挙動との相関性ならびにメカニズムについての系統的な検討を進めることが重要である。また、分子構造や溶液



中コンフォーメーションと多形現象との相関性に着目した研究も始まっている。最近の傾向として、ATR-FTIR や超音波スペクトル、NIR (近赤外分光法) 等種々の分析手法を導入した研究報告が増加している。晶析装置内の流動解析に CFD を用いる試みや分子シミュレーションによるモルフォロジー予測や多形構造予測に関係する研究の増加もみられる。しかしながら、これらの手法にはまだ実際の現象から遊離するケースが多い。多形現象の本質、すなわちメカニズムを知ることは材料開発技術としての知識の蓄積でもある。このためには、やはり実験による観察と事実の集積が大切であると考えられる。

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
 1. 分子構造と結晶構造ならびに機能性との相関性に関する研究についてのさらなる進展。
 2. 多形の析出制御については、溶媒、添加物など各操作因子と多形の析出挙動の相関性、溶液中コンフォーメーションの研究などから多形生成のメカニズムが徐々に明らかになってくる。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 1. 溶質間、溶質—溶媒間、結晶面—溶媒間などの相互作用に関する検討の進展
 2. 過飽和溶液の構造、多形構造の核発生過程と成長過程のシミュレーションなど分子論的観点からの研究が進展する。
 3. 究極的には多形構造予測の精度が上がる。
 4. 多形現象の予測（ここには速度過程が含まれている）への足がかりが得られる。

キーワード

多形制御 結晶構造 分子構造 機能性 転移