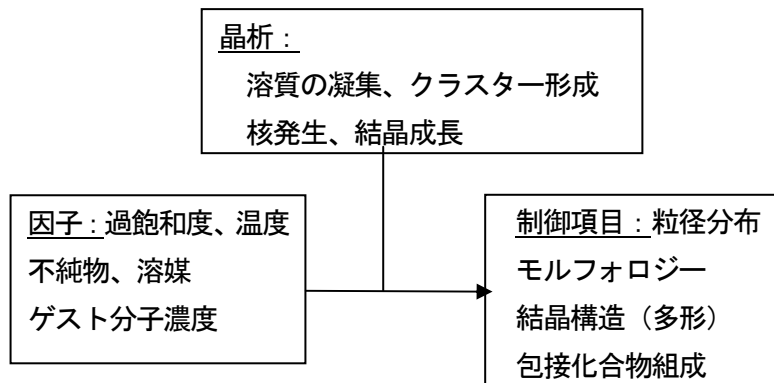


ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-4. 結晶化
小項目	1-4-2. 晶析

<p>概要（200字以内）</p>	
<p>過飽和度や温度、溶媒などの晶析因子により結晶の粒径分布、モルフォロジーあるいは純度などが大きく変化する。また、近年注目されている多形の構造や包接化合物組成も晶析条件によって制御される。溶質の凝集、核発生、成長からなる晶析過程はさまざまな分子間相互作用を含む速度過程である。今後晶析をさらに進展させるためには溶液構造から固液界面、結晶構造に渡る現象のメカニズムを明らかにしていくことが必要であろう。</p>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>因子：過飽和度、温度 不純物、溶媒 ゲスト分子濃度</p> </div> <p style="text-align: center;">↓</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <p>制御項目：粒径分布 モルフォロジー 結晶構造（多形） 包接化合物組成</p> </div>
<p>現状と最前線</p>	
<p>晶析は結晶材料の分離、開発のための基盤技術として重要な役割を担っている。結晶の析出現象は過飽和溶液中からの溶質の凝集とクラスターの形成、核発生、ならびに結晶成長過程よりなっている。これら過程は、溶液構造から核発生、界面での物質移動、結晶成長、結晶構造にかかわるさまざまな現象を含んでいる。これら個々の現象そのものが学問的にもきわめて重要な領域になっている。一方で、晶析操作そのものは結晶生産の技術として古くから用いられてきた。近年は製品性能への要求の高度化にともない結晶の純度、粒径分布、モルフォロジー、凝集などの問題が工業的に重要となり、これに関連して、粒径分布の制御、結晶中への不純物の混入メカニズム、モルフォロジー変化などに関する基礎的、応用的研究が多く行われてきた。特に最近の傾向としては多形が注目されている。これは医薬、発光材料、光学電子材料などさまざまな機能性素材において多形が関わっているためである。ナノ粒子形成やマイクロエマルジョンからの晶析、あるいはゾルゲル法に関する研究も増加する傾向にある。その他、比較的少数ではあるが、包接化合物や光学異性体の晶析あるいは光学分割などについても研究も行われている。包接化合物の晶析過程のメカニズムについての研究は世界的にも数少ないものであろう。</p>	

研究手法に関す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）等のオンライン分析を晶析制御に利用した研究などが増加している。また、モルフォロジー変化や多形の予



測に関する分子モデリングやシミュレーションを用いた報告がここ数年来顕著になっている。晶析装置内の流動解析にCFD（Computational Fluid Dynamics）を用いる試みも多くなされるようになってきている。しかし、晶析は複雑な過程であるため、シミュレーションではまだ実験結果からの遊離が多く認められる。今後晶析をさらに進展させるためには溶液構造から固液界面、結晶構造までのさまざまな現象の事実にもとずいて、これらのメカニズムを明らかにしていくことが重要であろう。

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
 1. 粒径制御、モルフォロジー制御、多形制御など生産技術と関連した研究の進展。
 2. 核発生、成長、不純物の混入問題などの基礎現象のメカニズム解明と分子モデリング、シミュレーションの進展。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 1. CFDによる晶析装置内の流動解析や核発生、成長、粒径分布の分子モデリング、シミュレーションが進む。
 2. 不純物の混入問題、モルフォロジー、多形核発生などのメカニズム解明ならびにこれらに関する分子モデリング、シミュレーションのある程度の進展。

キーワード

核発生、 成長、 粒径分布、モルフォロジー、 多形

（執筆者： 北村光孝 ）