

分子結晶における精密柔軟性制御

代表研究者 楠本 壮太郎
神奈川大学 工学部 物質生命化学科 特別助教

共同研究者 小出 芳弘
神奈川大学 工学部 物質生命化学科 教授

研究要旨

結晶性材料における「柔らかさ」の精密自在制御は、電子デバイスのフレキシブル化が進んでいる昨今、結晶工学分野において重要な研究課題である。しかしながら、柔軟性を自在制御することは、未だ困難であり、その理由として、分子配列が結晶格子内の溶媒の存在や用いる置換基によって劇的に集積構造が変化してしまうため、精密制御に必要な系統的な相互作用強度の変調が難しいからである。これらを解決するには、分子配列を保持したまま、分子間相互作用や結合の強度を変化させることが望ましい。本研究では、長鎖アルキルによる自己集合性の利用し、系統的に分子間相互作用および結合強度を変調させることで、分子結晶における柔軟性制御を目的とした。テトラクロロ無水フタル酸またはテトラフルオロ無水フタル酸に C12 のアルキル長鎖を修飾した化合物 (C12-Cl、C12-F) を設計及び合成し、再結晶することにより針状結晶を得た。どちらも応力により曲がることの出来る弾性結晶であった。興味深いことに、より弱いハロゲン間相互作用である F...F 相互作用を有する C12-F の場合、C12-Cl と比較して、複合弾性率は約 20 倍、硬度は 3 倍柔らかくなっており、相互作用を変調することで柔軟性を制御できる可能性を見出した。また C12-F は非常に柔らかく、報告されている分子結晶の中で最も低い硬度を有していた。結果として本研究では、柔軟性を制御できる可能性を見出しただけでなく、極めて柔軟な分子結晶創製に関する設計指針を提供した。