

新たな分子配向制御方法論を考案

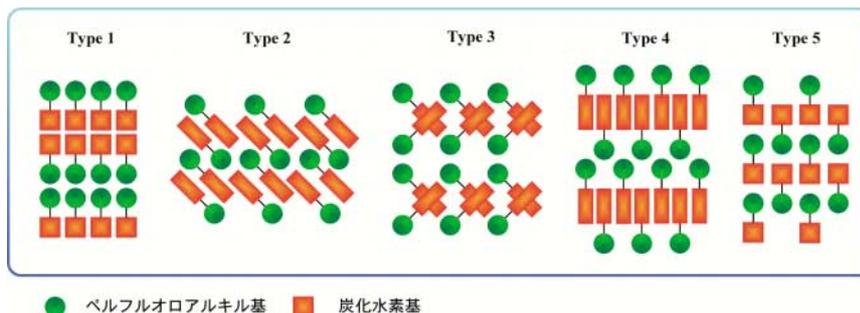
共有結合で構築された分子の世界では、その建築技法にあたる合成化学の長足の進歩により、構造式が描けるものは全て合成が可能と言われるまでになった。他方、非共有結合については、Van der Waals力のような弱いものから、水素結合、配位結合、イオン性結合といった強いものまで、分子間に働く基本的な力として良く理解されているが、これら非共有結合からなる分子集合体の構造予測は極端に難しい。さらに分子集合の規則や制御となると現在の科学の段階ではほど遠い。この分子集合体の構築や構造予測に関する科学は、超分子科学と呼ばれナノテクノロジーの本質的な問題として、近年特に注目を集めている。当研究部門分子構造制御研究グループでは、材料設計の新しい方法論を求めて、このチャレンジな研究課題に取り組んでいる。

当研究グループは、分子のハイブリッド化による結晶中での分子配向を制御する方法論を新たに考案した。分子レベルでの結晶構造の制御は、クリスタルエンジニアリング（結晶工学）と呼ばれ、これまで主に水素結合などの強い分子間相互作用が利用されてきた。今回ここに紹介する分子表面特性の異なる二つの分子を繋ぎ合わせたハイブリッド化合物を利用する方法は、我々が世界に先駆けて提

案する全く新規なものである。その基本的なアイデアは、分子表面特性が大きく違う二つ（または、それ以上）の分子（A, B）を連結基（X）で繋いだ構造のハイブリッド分子（A-X-B）が結晶化する時に、お互いの分子表面を認識し合い、同じ表面特性の分子部分同士が層を構成するように集合状態をとることを利用するものである。

我々は、この方法論をフッ素系ハイブリッド化合物によって例証した。すなわち、Aの部分にペルフルオロアルキル基（ R_F ）を、Bの部分に炭化水素基（ R_H ）をXに酸素（O）を用いた R_F-O-R_H なるハイブリッド化合物を多数合成し、その結晶構造をX線構造解析と呼ばれる方法で調べた。その結果、フッ素系ハイブリッド化合物の結晶構造は、5つのパッキングモチーフに分類され（図）、フッ素系化合物のトポロジーと関係づけることができた。さらには、タイプ2のパッキングを用いて反応場を構築し、光固相重合反応を分子設計通りに行い、金属光沢を有するポリマー結晶の合成に成功した（写真）。導電性などの物性については現在検討中である。

今後は新たな物性を持つ材料の開発を目的として、新しいナノテクノロジーの方法論であるクリスタルエンジニアリング技術を確立する。



図（上） フッ素系ハイブリッド化合物における5つのタイプの結晶構造
写真（左） フッ素系ハイブリッド化合物の光固相重合によるポリマー結晶



おの たいぞう
小野泰蔵
t.ono@aist.go.jp
基礎素材研究部門

関連情報
● 小野泰蔵：日経先端技術，No.20, 1 (2002).