



東北大学

東北大学

担当部署連絡先：研究推進部 研究推進課 基盤研究係
kenjyo@grp.tohoku.ac.jp

作成日：2020年2月14日
更新日：—

科研費
KAKENHI

分子集合体中のダイナミクスを利用した機能性材料の創製

研究者所属・職名：多元物質科学研究所・教授

ふりがな あくたがわ ともゆき

氏名： 芥川 智行

主な採択課題：

- [基盤研究\(A\)「分子回転とマクロ物性の融合」\(2011-2014\)](#)
- [新学術領域研究\(研究領域提案型\)「強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフトn造形システム」\(2014-2018\)](#)
- [基盤研究\(A\)「ダイナミックな分子集合体を舞台とした分子強物性」\(2019-2022\)](#)

分野：機能物性化学

キーワード：分子性結晶、水素結合、超分子化学、強誘電体、伝導体、分子モーター

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？（研究の背景・目的）

分子集合体の秩序は、高度に規則配列した単結晶から、柔粘性結晶、液晶、液体と多様性に富んでいる。優れた伝導体や磁性体を得るには単結晶が望ましいが、イオンや分子の揺らぎ・回転・拡散が存在するダイナミックな分子集合体に着目すると、新たな視点から分子集合体の分子物性化学が展開できる（図1）。本研究では、「イオン伝導体、強誘電体、強弾性体、分子ローター、分子センサー」など、ダイナミックな分子集合体を舞台とする物性化学における機能開拓を試みた。

●研究するにあたっての苦労や工夫（研究の手法）

独自のスタイルで「プロトン・イオン・分子の運動自由度と物性の融合」を目指した研究に約20年前から着手し、いち早く分子集合体中のダイナミクス制御の重要性に注目してきた。古くから、柔粘性結晶中の回転運動が知られていたが、そのダイナミクスを機能設計の観点から物性化学に導入する研究は、注目されていなかった。ダイナミックな分子集合体を機能創製の観点から俯瞰する事で、今日までに、幾つかの重要な知見を得るに至った。

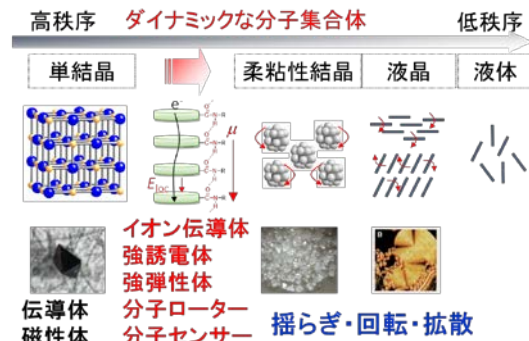


図1 分子集合体の多様性とダイナミクス

分子集合体中のダイナミクスを利用した機能性材料の創製

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

分子ダイナミクスと物性融合の観点から、柔らかい分子集合体中の分子間水素結合に着目し、多様な液晶性の有機強誘電体を創製した。ベンゼン、ピレン、ポルフィリン、ヘリセンなど多様な n 電子系を有するダイナミックな分子集合体を開発した。多重機能性材料の観点から、液晶相に加えて、発光性オルガノゲルやナノファイバーなどの興味深い分子集合体を創製し、強誘電性－発光特性－電流スイッチング機能が共存する多重機能性材料を開発した。さらに、分子集合体構造と強誘電体パラメータの制御の視点から、分子間水素結合が二次元的に連結したラメラ構造を有するヘリセン誘導体を開発した（図2）。その優れた電場－分極ヒステリシスから、不揮発メモリ材料の性能因子である残留分極値と抗電場を著しく増加させた。

また、温度、圧力、ガス吸着などの外部刺激に応答して蛍光特性が変化する発光クロミック材料を開発した。励起状態分子内プロトン移動（ESIPT）型の発光性有機分子に着目し、固体状態でピリジン・アニリン・キナリン・チアゾールなどの有機塩基や生体分子であるヒスタミンやアミノ酸を、その発光色調を水色～濃青～緑へと変化させる事でセンシングが可能な分子を設計した（図3）。これは、分子コンフォメーションおよび水素結合様式の変化が互いに連動して蛍光クロミズムが実現するダイナミック現象であり、固体中の分子ダイナミクスが、分子センシングにも利用できる事を示した。

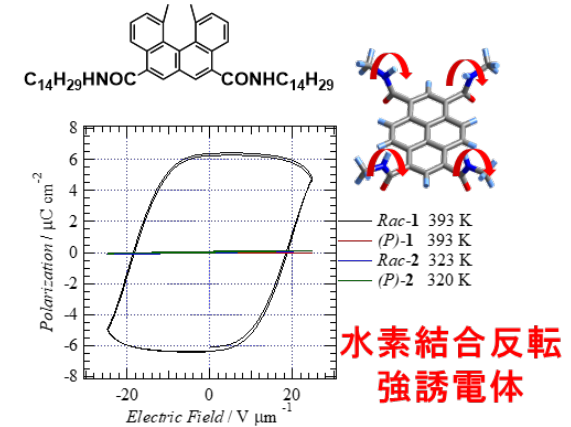


図2 二次元強誘電相を形成するヘリセン誘導体の電場－分極ヒステリシス曲線（左）と多重機能性ピレン誘導体の水素結合反転。

今後の展望

●今後の展望・期待される効果

イオン伝導体、強誘電体、強弾性体、分子ローター、分子センサーなどは、ダイナミックな分子集合体を舞台とする物性化学は、これまでに報告の無いダイナミックな機能性を発現させる。外部エネルギーにより、結合－解離状態が制御可能な分子間水素結合は、タンパク質の高次構造の形成や生体内の優れた機能発現に重要な役割を果たしている。分子モーター、イオンポンプ、多重認識センサーなど、生体類似機能を有する複雑でダイナミックな分子集合体を実現するは、次世代の分子物性化学と機能性材料化学を飛躍的に発展させると期待できる。

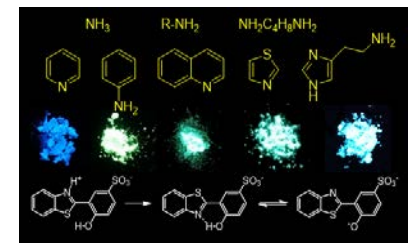


図3 蛍光変化を用いた次世代分子センシング材料