

【新学術領域研究（研究領域提案型）】  
理工系



研究領域名 ソフトクリスタル：高秩序で柔軟な応答系の学理と光機能

北海道大学・大学院理学研究院・教授 **かとう まさこ**  
**加藤 昌子**

研究課題番号：17H06366 研究者番号：80214401

【本領域の目的】

本研究領域では、蒸気にさらず、擦る、回すなどの極めて弱いマクロな刺激に応答して、発光や光学特性などの「目に見える」性質が変化する新奇物質群、「ソフトクリスタル」の学理の確立と、これに基づく全く新しい機能性素材の開拓を目的とします。「ソフトクリスタル」は、規則正しい結晶構造・周期構造を持つ安定な構造体でありながら、特定の弱い刺激で容易に構造変換や相転移を起こすことが特徴です（図1）。高秩序で柔軟な応答系である「ソフトクリスタル」の形成条件や相転移現象の解明は、分子科学技術における最も挑戦的課題の一つとも言え、この学理を打ち立てることで、従来型の結晶やソフトマターを超えた機能性材料を提供しうる新領域を創成できると考えます。

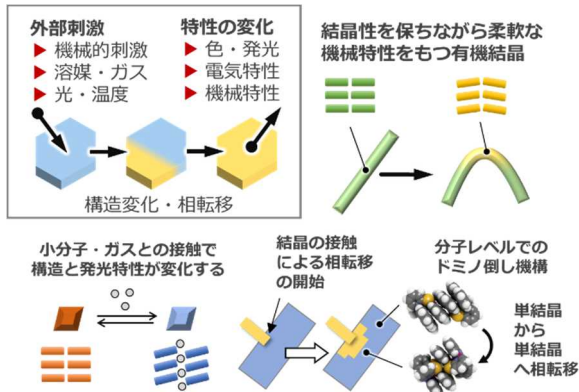


図1. ソフトクリスタルの特長と例

【本領域の内容】

上記の目的を効果的に達成するために、次の三つの研究項目を立てて研究を推進します。

- ・研究項目 A01 ソフトクリスタルの形態開拓
- ・研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓
- ・研究項目 A03 ソフトクリスタルの物性・機能開拓

研究項目 A01 では、金属間 d-d 相互作用や有機分子間相互作用、水素結合等を巧みに織り込むことにより、構成分子の形態を制御して様々な刺激に応答するソフトクリスタルの創製を行います。A02 では、空隙を含めたソフトクリスタルの生成機構を理解するとともに、それらの構造開拓を中心に研究を推進します。A03 では、精密な測定手段を用いてソフトクリスタルの物性解明を行います。また、様々な機能性材料との複合化や、関連する応用研究分野との融合により、ソフトクリスタルの新たな機能開拓にも挑戦します。項目を超えた共同研究を通してソフトクリスタルの学理確立と機能導出に取り組みます。

【期待される成果と意義】

近年、マクロで弱い刺激に鋭敏に応答して、発光や光学特性が変化する物質群が相次いで見いだされていますが、それらはセレンディピティやスクリーニングに頼っているのが現状です。複雑な相互作用を有する分子性結晶の形成条件や相転移現象の解明には様々な要因を総合的に考慮する必要があります。本領域において、物質創製、構造制御、物性解明、理論的アプローチ、機能導出の研究が連携してスパイラルアップすることにより、ソフトクリスタルの学理を世界に先駆けて確立できると考えられます。従来複雑と考えられてきた物質／現象の学理解明や設計原理の確立により、未踏機能材料開発への展開が期待できます。また、柔軟かつ高秩序な物質系というソフトクリスタルの長を生かせば、これまでにない低刺激応答性材料や機能性材料の開発も期待できます（図2）。

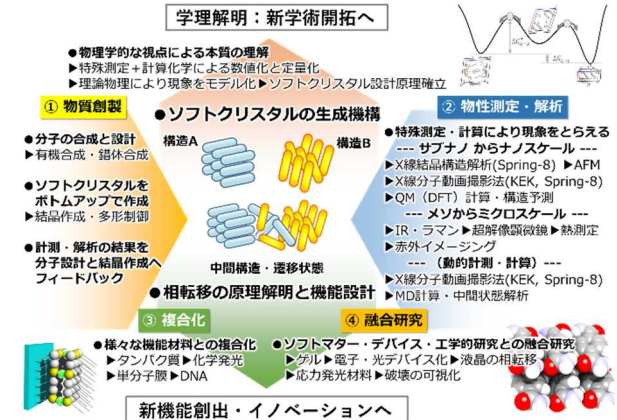


図2. 研究基本戦略と期待される成果のまとめ

【キーワード】

ソフトクリスタル：マクロな弱い刺激によって、ミクロな構造が結晶性を保ったまま容易に変化し、その変化が発光現象や光学特性などの目に見える物性として捉えられるような物質群。

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度  
1,012,200 千円



**Title of Project : Soft Crystals: Science and Photofunctions of Flexible Response Systems with High Order**

Masako Kato  
 (Hokkaido University, Faculty of Science, Professor)

Research Project Number : 17H06366

Researcher Number : 80214401

**[Purpose of the Research Project]**

This project aims to establish a new science concerning “Soft Crystals”, which responds to macroscopic gentle stimuli (e.g. vapor exposure, rubbing, and rotation) that exhibit visually remarkable changes such as luminescence and optical properties. This project also aims to develop novel functional materials on the basis of the scientific achievements. “Soft Crystals” are regulated solids with stable and highly ordered structures. However, they are characteristic of facile structural transformations and phase transitions in response to weak but particular stimuli (Fig. 1). One of scientifically most important challenges is to clarify the phenomena of the formation and phase-transition of “Soft Crystals”. Through the scientific research, we aim to create a new area, which can provide new materials beyond the conventional hard crystals and/or soft matters.

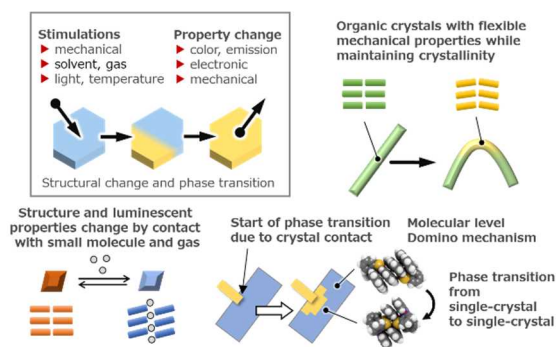


Fig. 1. Soft Crystals: features and examples of flexible new materials with high order.

**[Contents of the Research Project]**

In this research area, the following three research items are promoted cooperatively to establish a new fusion area with the concept of Soft Crystals.

- Research Item A01: Development of Soft Crystals through molecular design & synthesis
- Research Item A02: Development of Soft Crystals with novel structure & morphology
- Research Item A03: Development of Soft Crystals with superior physical properties & functions

For all three items, several experimental and theoretical research groups will collaborate closely with each other for effective studies. Intensive studies will also be performed collaboratively over these research items.

**[Expected Research Achievements and Scientific Significance]**

Recently, there are successive reports concerning new crystals which exhibit sensitive changes in luminescence and/or optical properties in response to gentle stimuli. However, those discoveries owe the serendipity or screening because those phenomena are influenced by many complicated factors. It would be essential to understand various factors that govern the formation and phase-transition phenomena of molecular crystals constructed by various intermolecular interactions. Through close collaborations concerning material creation, structural control, physical measurements, theoretical studies, and functionalization, we will achieve the establishment of a new scientific arena, Soft Crystals for the first time to the world. The deep understanding of such complex systems will lead the development of novel materials such as sophisticated responsive materials or those with special functions (Fig.2).

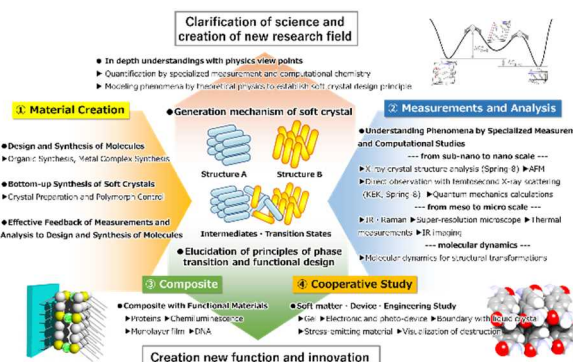


Fig. 2. Research strategy and expected achievements for Soft Crystals.

**[Key Words]**

Soft Crystals: Crystalline materials with flexibility and high order, which exhibit visual changes such as luminescence and optical properties in response to gentle stimuli.

**[Term of Project]** FY2017-2021

**[Budget Allocation]** 1,012,200 Thousand Yen