

領域番号	2903	領域略称名	ソフトクリスタル
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		
研究期間	平成29年度～令和3年度		
領域代表者名 (所属等)	加藤 昌子（北海道大学・大学院理学研究院・教授）		
領域代表者 からの報告	<p><u>(1) 研究領域の目的及び意義</u></p> <p>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指す。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ある。ソフトクリスタルにおける刺激応答性は、様々な弱い分子間相互作用が見事に調和した場合に発現する複雑な現象である。従って、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る。この学理を打ち立てることで、秩序性の高い従来型のハードな結晶と、応答性は高いが揺らぎも大きい液晶等のソフトマターの両者の長所を併せ持つ新しい機能性物質、ソフトクリスタルの新学術領域を創成することができる。しかしながら、ソフトクリスタルの作製は、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ある。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、および機能導出の研究者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することができる。これにより、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が確立され、これまでにない未踏機能材料開発への展開が期待できる。</p>		
	<p><u>(2) 研究の進展状況及び成果の概要</u></p> <p>高秩序で柔軟な応答系である「ソフトクリスタル」の新しい概念を世界に先駆けて発信するために、ヨーロッパ化学協会の主要雑誌にコンセプト論文を発表した。また、このソフトクリスタルのコンセプトを、領域全体会議（年2回）、共同研究促進会（3回）、物性解明研究グループ会議（3回）等の議論の場を通じて、物質創製、構造制御、物性解明、理論、機能導出、それぞれを専門とする領域内研究者が共有した。その結果、形態開拓、構造開拓、物性・機能開拓の3班にわたる分野連携型の多点的な共同研究ネットワークが構築され、共同研究（143件）を通じて学理深化と機能創出の研究を推進している。これにより、これまで未解明であった刺激応答性結晶の応答メカニズムやダイナミクスが解明されつつある。具体的な成果として、微弱な応力により可逆的な結晶相転移を示す「有機超弾性」に加えて、新たに、結晶性を保持したまま500%の大変形を示す「有機超塑性」や分子歪みなしで自在に変形する「有機強弾性」等を発見したことは特筆される。また、蒸気濃度に応じてリバーシブルな分子ドミノ型相転移を示す新たな発光性金錯体を見出した。これらソフトクリスタルの結晶相転移機構や結晶多形現象は、結晶力場計算により解明に成功している。その他、刺激応答性クロミック結晶の多様性の拡大やモデル化による相転移の原理解明等が達成された。さらに、ソフトクリスタル研究の中から予期せぬ展開も生まれている。例えば、機械的な外力で強制的に結晶構造を変化させることで、固体のままでの共有結合を形成する固体クロスカップリング反応を実現した。以上のように、ソ</p>		

	<p>フトクリスタルの学理の深化に向けて領域研究は順調に進展しているとともに、新たな機能導出への展開も始まっている（謝辞記載査読付国際学術誌論文 191 報）。</p>
--	--

<p>科学研究費補助金審査部会における所見</p>	<p>A（研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる）</p>
	<p>本研究領域は、秩序ある結晶構造をとる物質が、種々の力学的刺激や環境の変化に対してどのように応答するかという側面から研究し、これらをソフトクリスタルという概念のもと多様な物質の挙動を解明し、その原理を理解し、そこに潜在する学理を究明しようとするもので、その意義は極めて大きい。新たな概念の創出と確立を目的とした研究であることから、ソフトクリスタルとみなされる新しい現象・事例の発見・蓄積・分類・整理を進め、これらを本研究領域の研究成果として取りまとめ、どのように学理として展開していくかが重要であるが、本研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められ、今後のより一層の進展が期待される。</p> <p>これまでの研究で新たな現象を見出す、あるいは事象発現の理論的な解明なども進められており、順調に研究が展開されているように見受けられる。</p> <p>一方、従来の非晶質科学に分類される研究で興味深い現象を見出したとしても、ソフトクリスタルという新たな概念の確立を目指している本研究領域の目指す方向性と合致している内容かどうか慎重な判断が必要であり、それらの分類・整理を行うとともに学理として確立することが望まれる。</p>