

有機分子・バイオエレクトロニクス分科会
創発によるビルドアップ型ナノ物質創製
- 非平衡科学に基づく材料開発を目指して -
阪大産研 松本卓也

「創発」は、物質科学のみならず、生命科学、情報科学、人文科学など幅広い領域で用いられる言葉であるが、本シンポジウムでは、ビルドアップ型の巨大かつ複雑な構造を有するナノ物質・材料の創製をめざす研究において、物質の自己組織化に関する新たな未踏の段階を目指す言葉として位置づけた。

これまでの自己組織化研究には二つの流れがある。主に化学の領域では、分子構造の高度化により、平衡系における高次構造と高次機能の発現を目指す研究がおこなわれてきた（レーンの定義に基づく方向）。その極限的な例として、生命におけるタンパク質があるが、分子としてのタンパク質を扱うかぎり、分子サイズをはるかに越えたナノスケールの階層構造を生み出す仕組みを見出すことはできない。一方、物理の領域における自己組織化研究では、非平衡開放系の散逸構造が導く階層形成が主な主題であった（プリゴジンの定義に基づく方向）。その自然界における象徴の一つは雪の結晶であるが、理論やモデル実験の対象は、単純な分子、粒子、あるいは粘性を持つ連続体であり、粒子の内部構造と階層的秩序の関係はほとんど意識されてこなかった。

「創発」とは部分の単純な総和にとどまらない性質が全体として現れる現象であり、上記の二つの流れを統合あるいは融合する概念に他ならない。つまり、巨大かつ複雑なナノ構造や階層を有する物質・材料を創製するには、従来の隣接分子間相互作用に基づく自己集積や準平衡状態における結晶成長を超えて、外的シーケンス制御、散逸過程、確率共鳴など非平衡科学の成果を取り入れた、創発的なビルドアップ型プロセスが必要である。本シンポジウムでは、複雑系物理、分子動力学計算、金属酸化物、炭素物質、有機金属錯体、高分子に渡る広範な分野を「創発」の概念のもとに横断し、新しい物質開発の潮流を紹介した。

講演では、まず川合（阪大産研）が「イントロダクトリートーク」として、金属酸化物ナノ構造体、超分子構造体、ナノデバイスなどの例を取り上げ、異分野を横断する共通概念としての「創発」について説明を行った。次に山口（産総研）が「創発による自己組織化的デザイン」と題して、平衡系の「自己集合」と非平衡開放系の「散逸構造」という二つの秩序構造形成原理の相補的な役割について議論を行い、ナノチューブなどの事例について紹介した。さらに甲斐（九大院工）は「自己組織化と階層性」と題して、自己組織化とは非線形成長による揺らぎの巨視化現象であり、その特性長や特性時間よりも大きな領域と小さな領域の分離が階層形成であることを説明した。

上記の物理的理解に関する講演に続いて、種々の材料に関する先端的な研究成果が紹介された。まず、米谷（産総研）は「液晶の自己組織化が創る3次元ナノ構造：分子シミュレーションによるアプローチ」と題して、3次元超構造を有する液晶相に関する計算結果を示した。相分離と階層化の関係は非常に興味深く、高次構造の形成プロセスを考える上で示唆に富んでいる。次に川合（阪大産研）は「金属ナノワイヤーにおける創発的自己組織化」と題して、動的な非平衡プロセスである気-液-固相反応法をとりあげた。多くの複雑なプロセスを含む系であるが、興味深い周期構造など非線形成長の典型と見られる現象を紹介した。さらに、中西（物材機構）は「フラーレン自己組織化材料：ナノ・マイクロ・バルクスケール」と題して、分子間相互作用を巧みに利用すれば、多様な構造体・モルフォロジーを形成できることを示した。分子レベルの構造制御が、溶媒和をとという現象を通して、球、ファイバー、ディスク、コーン、スパイラル、フラワ

一、フレークなど、はるかに大きなスケールの構造制御にまで増幅されるので、創発の視点から極めて興味深い。

シンポジウム後半では、分子系の創発的構造形成に関する講演が行われた。君塚（九大院工）は「金属錯体の自己組織化とナノ界面特性」と題して、溶媒蒸発過程と連動した一次元錯体鎖の形成や水 - 有機界面における光還元を利用した金ナノワイヤーの成長を紹介した。界面における動的な分子集合プロセスの設計により、ナノ構造を構築できることが示された。藤田（東大院工）は「一義的中空ナノ構造の創発的自己集合」と題して、折れ曲がった二座配位子をもつ金属錯体が数十個集合して、一気に球状のカプセルが出来ることを紹介した。巨大な構造であるにも関わらず、一度出来上がると安定であり、共同効果による安定化が重要であることを指摘した。最後に相田（東大院工）は「電気伝導性を有する超分子ナノ構造体のデザイン」と題して、不斉炭素を導入した一方巻き有機ナノチューブを紹介した。この一方巻き構造はナノチューブ全体に及んでおり、隣接分子間の相互作用を超えた、「全体の整合」の効果が重要であることを指摘した。

シンポジウムでは常時100名前後の出席者を得て、活発な議論が行われた。