

フジシール財団 研究助成事業
成果報告書

公益財団法人フジシール財団
理事長 岡 崎 裕 夫 殿

報告日 2026 年 7 月 9 日

研究課題	非共有結合性相互作用を活用した 初期形状記憶型パッケージフィルム材料の開発	助成金額
		100 万円
助成名	若手研究助成	
ふりがな	もりた まさと	研究助成申請年度
研究者氏名	盛田 雅人	2024 年度
所属機関	京都工芸繊維大学 分子化学系	研究期間
		2024 年 11 月～2026 年 3 月
役 職	助教	

下記の通り、研究成果を報告いたします。

記

1. 研究成果の概要

【背景と目的】

食品等の包装に使用するパッケージフィルムは、加工性やコスト的要因からポリエステル（PET）製もしくはポリエチレン（PE）製を使用するのが主流となっている。これらのフィルム製造工程では、まず原料樹脂をフィルム状に押出成形した後に縦・横方向の二軸延伸が行われる。最後に熱セット（熱結晶化）することで後加工工程での寸法安定性（収縮抑制等）を確保する。しかし熱セットを十分に行っても後加工時に原料樹脂のガラス転移温度以上に加熱してしまうとフィルムが変形してしまう。ガラス転移点以上になるとポリマー分子鎖が流動性を持つため、高温でのフィルム変形は避けられない現象となっている。この問題を解決するために過剰な熱セットにより結晶化度を上げすぎるとフィルムの柔軟性が失われてしまう原因となる。熱セット直後の形状（以下、初期形状と呼ぶ）を記憶しておくことができれば、後加工工程で変形してしまっても記憶している元の形状に復元することが可能となる。変形させた形状を記憶しておく形状記憶性フィルムは数多く報告されているが「初期形状」記憶性フィルムは殆ど研究が進められていない領域となっている。2022 年にハロゲン結合を使用した初期形状記憶性ポリマーが Guo らによって初めて報告された（*Nat. Commun.*, **2022**, *13*, 7436.）。これは極めて複雑な構造のポリマー（4 成分複合型）であり、さらに初期形状記憶性発現の鍵となっている要素及びそのメカニズムはいずれも明らかにはなっていない。そこで本研究では、初期形状記憶性フィルム材料の開発を目的とした研究を行う。

【分子設計】

本研究では、初期形状の記憶力として非共有結合性相互作用（ハロゲン結合、水素結合、CH/ π 相互作用など）を活用する。具体的には、酸素原子とヨウ素原子の間に

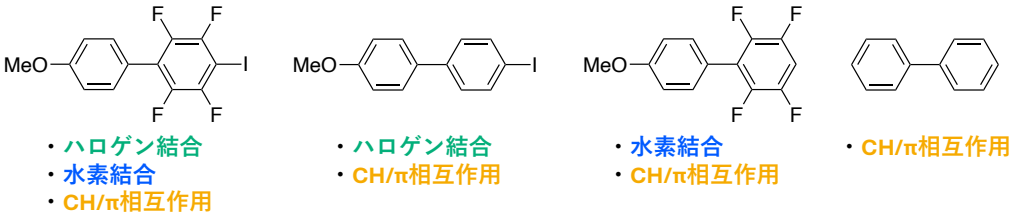


図 1. 本研究で用いた分子の構造と形成可能な分子間相互作用

働くハロゲン結合、フッ素原子と水素原子間に働く水素結合、芳香環同士の CH/ π 相互作用を利用する。これらの非共有結合性相互作用を利用することで熱処理直後の熱力学的な安定状態を記憶させることで、化合物に「初期形状」を記憶させる。基本的な分子骨格は、合成および結晶構造解析の容易なビフェニル骨格とした (図 1)。フッ素原子は、ハロゲン結合形成のための σ ホールを安定化するために導入している。

【結果と考察】

各サンプルは、鈴木・宮浦クロスカップリング反応により合成した。合成後はジクロロメタン/メタノール混合溶媒系を用いた再結晶を行うことで単結晶を作製した。得られた単結晶およびアモルファス粉末を用いて光学特性評価を行った (図 2)。結晶状態においては励起波長に依存した発光特性が観測された。280 nm の短波長光で励起した際には 370 nm 程度を発光極大とする紫外領域で発光し、360 nm で励起すると発光極大は 420 nm の可視光領域へと大きくレッドシフトした。アモルファスサンプルに対しても同様の測定を行ったが、励起波長に依存した発光特性は観測されなかった。これは結晶状態に特有のパッキング構造もしくは分子配座が影響していると考え、単結晶 X 線構造解析を実施した (図 3)。電子豊富なメトキシ基の置換した芳香環とフッ素置換した電子欠損芳香環の間に働く Arene-Fluoroarene 相互作用が見られた (図 3b)。この相互作用によって、2 分子間で二量体を形成していることがわかった。また、フッ素化した芳香環とメトキシ基の置換した芳香環のなす 2 面角は 50.9° であった (図 3c)。この 2 面角の大きさは水素原子とフッ素原子の反発に起因したものであると考えられる。結晶状態において励起波長に依存した発光特性が観測されたが、これは大きな 2 面角によって発光が LE (Locally excited) 性と CT (Charge transfer) 性を併せ持ったためであると考えられる。実際に、フッ素原子を導入していない誘導体については固体発光の励起波長依存性は確認されておらず、芳香環同士のねじれが波長依存性に寄与していることが確認された。

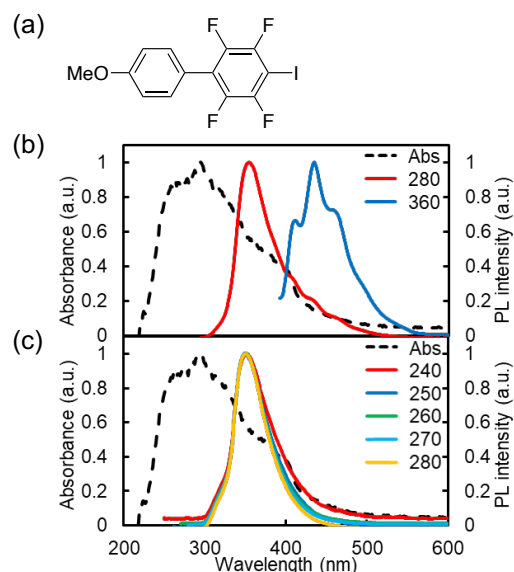


図 2. (a) 分子構造、(b) 結晶の発光スペクトル、(c) 粉末の発光スペクトル

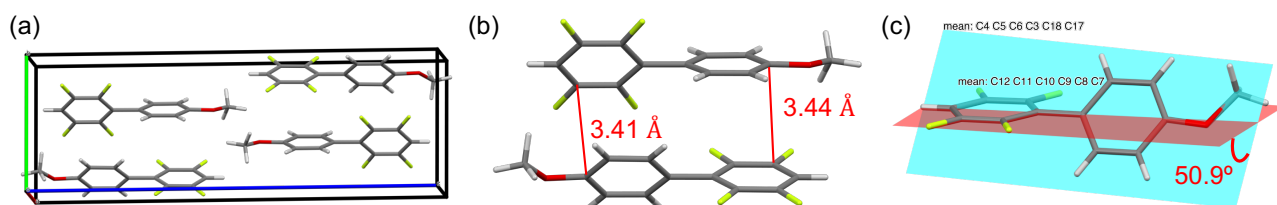


図 3. (a) 単位格子、(b) 分子間相互作用、(c) 芳香環のなす 2 面角

次に、初期構造記憶性の有無を確認するため示差走査熱量計 (DSC) を用いて相転移挙動を評価した (図 4)。粉末状サンプルについては、加熱・冷却サイクルを 3 サイクル行っても融解・固体化ピークのみで形状記憶性は確認されなかった。一方で、結晶状サンプルについては、冷却中に結晶化ピークが見られており、結晶-結晶転移が起きていることが確認された。また、この転移は 2 サイクル目以降も継続して再現されており、同一の凝集構造に戻ることが確認された。

また、ハロゲン結合と水素結合のいずれかが欠けると初期構造記憶性が発現しないことが確認された。これは融解後の等方相から結晶相へと戻る際にハロゲン結合と水素結合によって元の記憶した構造が誘起されることを示唆している。

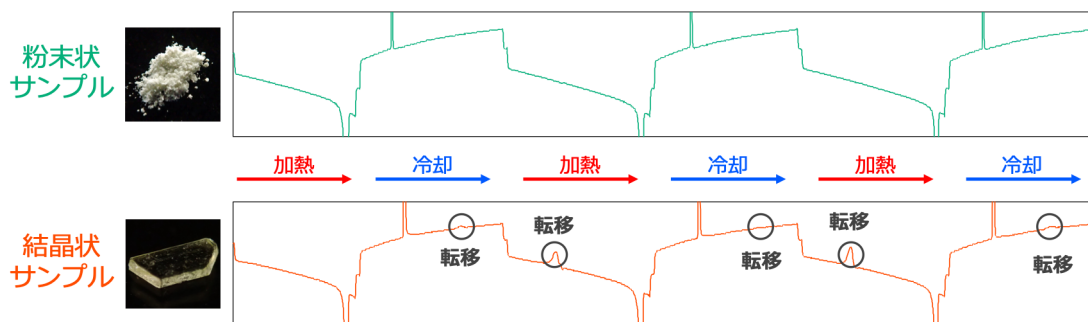


図 4. 粉末状および結晶状サンプルの相転移挙動

2. 研究成果のパッケージ産業への貢献の可能性

本研究では、ハロゲン結合、水素結合、CH/ π 相互作用などの非共有結合性相互作用を利用することで、分子集合体が特定の凝集構造を記憶し、加熱・冷却後にも同一の構造へ戻る可能性を示した。これは、従来のパッケージフィルム材料において課題となっている、後加工工程での熱変形や寸法安定性の低下に対して、新たな分子設計指針を与える成果である。

現在主流である PET や PE フィルムでは、熱セットによる結晶化度の制御によって寸法安定性が確保されているが、過度な結晶化は柔軟性や加工性の低下につながる。本研究で得られた知見は、共有結合による強固な架橋ではなく、可逆的な非共有結合性相互作用によって初期構造を保持・回復させるという点に特徴がある。そのため、将来的には、柔軟性や加工性を維持しながら、加熱後の変形抑制や形状回復性を付与した高機能パッケージフィルム材料の開発につながることが期待される。

現段階では、モデル分子の結晶状態における基礎的な相転移挙動の解明が中心であり、実際のパッケージフィルム材料への応用には、ポリマー中での相互作用制御、フィルム成形性、機械特性、耐久性などの検討が必要である。しかし、本研究により、非共有結合性相互作用を利用した「初期構造記憶」という新しい材料設計概念の有効性が示されたことは、次世代パッケージ材料の開発に向けた重要な基礎知見になると考えられる。

3. 学会発表、学会誌等への論文掲載、産業財産権出願などの実績（現時点で未発表・未掲載・未出願のため、上記「1. 研究成果の概要」、「2. 研究成果のパッケージ産業への貢献の可能性」の当財団ホームページ上の公開の延期を希望される場合、その旨 記載してください。）

【学術論文】

1. Riku Yoshino, Kazuki Kobayashi, Peiyuan Yang, Hiroki Fukumoto, Motohiro Yasui, Shigeyuki Yamada, Tsutomu Konno, Masato Morita*, “Engineering visible-to-ultraviolet emission switching of benzothiazole-based mechanoresponsive materials” *CrystEngComm*, **2025**, 27(32), 5398-5403.
2. Ryo Toshima, Yuto Eguchi, Ibuki Oshima, Riku Yoshino, Natsuki Tamano, Hiroki Fukumoto, Motohiro Yasui, Tsutomu Konno, Shigeyuki Yamada, Masato Morita*, “Co-crystallization of benzothiazole via halogen and hydrogen bonding: crystal structure and photoluminescence properties” *CrystEngComm*, **2025**, 27(47), 7649-7654.

【学会】

1. ○川崎陽希、盛田雅人「非共有結合性相互作用を活用した新規ビフェニル型発光分子の合成及びその物性評価」第 14 回 CSJ 化学フェスタ、ポスター発表、2024 年 10 月 22 日～2024 年 10 月 24 日
2. ○川崎陽希、福元博基、盛田雅人「含フッ素ビフェニル型紫外発光分子の合成及び光学特性評価」第 47 回 フッ素化学討論会、ポスター発表、2024 年 11 月 14 日～2024 年 11 月 15 日
3. ○玉野夏月、福元博基、盛田雅人「非共有結合性相互作用を活用したコンフォメーション固定とそれに伴う

光学特性の変化」、第 48 回 フッ素化学討論会、ポスター発表、2025 年 11 月 13 日～2025 年 11 月 14 日