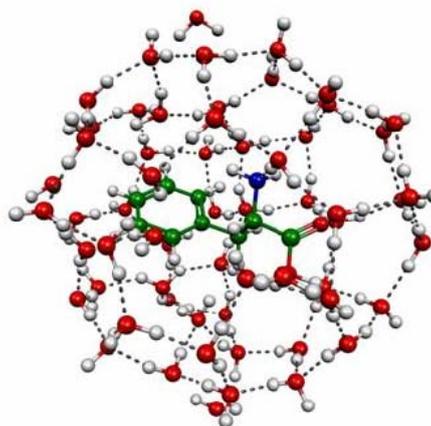


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-1. 高分解能分光
小項目	1-1-8. 水素結合の分光

#### 概要（200字以内）

水素結合構造の分子レベルでの理解がクラスターの赤外分光を中心として進展しており、凝集相における分光研究との連携が現実のものとなりつつある。新奇な水素結合の性質解明が分光研究により進んでいる。生体関連分子における水素結合の精密分光は生命機能の分子論的理解を拓き始めている。界面、ゼオライトなどの特異環境下における水素結合の観測が非線形分光法を利用して行われている。



#### 現状と最前線

水素結合は地球環境を支える水の特異な性質を決定づけ、様々な生命現象や分子機能の発現において最も重要な役割を担う分子間相互作用でもある。その重要性ゆえ、水素結合は現在においても年に4000報を超える研究論文が報告される最先端分野であり続けている。

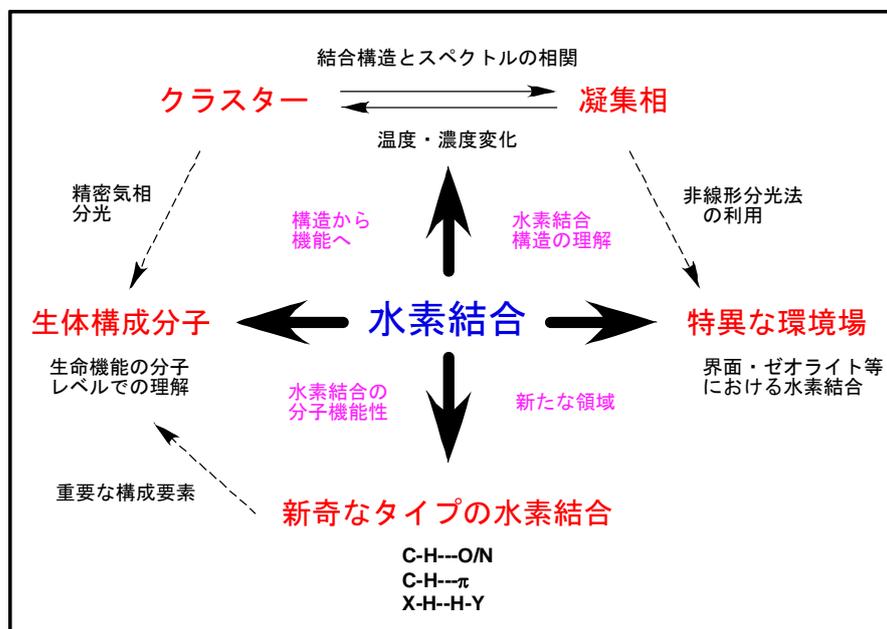
水素結合形成の顕著なマーカーは水素結合に関わる X-H(X=O,N)基の特性振動シフトであるため、赤外分光を中心とした分光学的研究が極めて多数行われている。近年、分子クラスターに赤外分光法が適用されたことにより、5-6分子程度までの系における水素結合構造がほぼ確立された。最近はより大きなサイズにおける水素結合構造発展様式の探求が始まっている。水クラスターなどを中心とした水素結合構造の精密決定には回転スペクトル研究の寄与も大きい。クラスターと液体の局所構造との関連は多くの興味を集めている。様々に濃度・温度を変化させた凝集相の赤外スペクトル観測には、倍音領域を含めて膨大な蓄積があり、その帰属をクラスターにおけるスペクトルとの比較により統一的に解釈することが提案され始めている。

最近の水素結合研究の重要な課題は新奇な水素結合の探求である。微弱な水素結合の分光研究が多く行われ、C-H...X(X=O,N)型水素結合の存在を確立すると共に、C-H伸縮振動の高波数シフトなど典型的な水素結合とは大きく異なる挙動を明らかにした。二水素結合と呼ばれる X-H...H-Y(X=O,N, Y=Li, B, Si) 型の水素結合も、X線構造解析での発見を受けて、赤外分光

等で性質の解明が行われている。普遍的なファンデルワールス力との境界に位置する C-H/ $\pi$ 相互作用は、その存在や性質を巡って様々な分光的研究の対象となっている。

自然界における水素結合の重要な役割のひとつは多様な生体機能の発現であり、その機構を個々の分子レベルで明らかにするために生体関連分子の精密分光が極めて重要なテーマとして近年浮上している。これは、DNA 二重鎖やタンパク質の機能をそれぞれを構成する核酸塩基分子やアミノ酸分子と分子間相互作用に要素還元することにより、従来の現象論的な説明を越えて生命現象の物理化学的理解を図るものである。中でも核酸塩基二量体による DNA のモデル化は非常に多くの研究がなされている。また、生体内における DNA やタンパク質の水和は、その重要性が示唆されているが、未だにほとんど明らかになっていない。核酸塩基分子やアミノ酸の水和クラスターの構造解析によりその端緒を開くことが試みられている。

界面やゼオライト中など特異な環境下における水素結合の研究も多くの分光学的研究がなされている。特に非線形分光法の発展により、従来測定が困難であった様々な系に対して分光計測が可能となり、特異な環境下における水素結合の解析が進んでいる。



#### 将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題  
新奇的な水素結合の性質の解明。  
100分子程度までの系における水素結合発展形式の解明。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題  
凝集相における水素結合構造の分子的描像の確立。  
生体系における水素結合の構造・役割を分子レベルで解明。

#### キーワード

水素結合、クラスター、赤外分光、生体機能、界面

(執筆者： 藤井 朱鳥 )