

ディビジョン番号	7
ディビジョン名	天然物化学・生命科学

大項目	1. 理工系天然物化学
中項目	1-11. その他
小項目	1-11-1. 構造有機化学

概要	<p>分子構造とその機能の関係を探る構造有機化学は天然物や生命化学の分野だけでなく、機能性物質の領域で大きな発展を遂げてきた。特に、有機EL素子や有機磁性体、有機伝導体などの電子デバイスを指向した研究開発だけでなく、超分子化学を基盤とした分子機械や分子センサー、光集光アンテナ、光電変換系の開発も盛んになっている。今後はこれらの有機機能性材料の実用化へ向けた応用研究と共に、分子構造と機能の関係を解き明かす基礎研究が盛んになると考えられる。</p>
	<p style="text-align: center;">構造有機化学</p> <p style="text-align: center;"> 分子構造 ↔ 分子物性 </p> <p style="text-align: center;"> { <ul style="list-style-type: none"> ○構造活性相関 ○有機機能物質化学 ○超分子化学 ○ソフトマテリアル化学 } </p>
現状と最前線	<p>構造有機化学は有機化合物の構造と物性の両面から研究が展開されてきた。特に分子構造と分子物性の相関を研究することに主眼を置いた研究が初期には多かった。歴史的に見て、芳香族化合物やその他のπ共役電子系化合物が主に研究されてきた。現在では構造有機化学の領域でもナノテクノロジーが注目されるようになり、基礎研究から材料としての応用を指向した研究まで多岐にわたっている。特に現在、構造活性相関（構造生物学、定量的構造活性相関）、有機機能物質化学（有機磁性体、有機超伝導体、電荷分離系の構築、分子ワイヤー、分子スイッチ、 dendrimer）、超分子化学（フラレン集合体、カーボンナノチューブ、分子カプセル、カテナン、ロタキサン、分子クレフト、クラウンエーテル、自己集合超分子）、ソフトマテリアル（有機ゲル、有機液晶、ベシクル、自己組織化膜）、などが注目されている。</p> <p>構造活性相関：構造生物学の進歩により、特定の生理活性発現に関わる天然有機化合物とタンパク質の相互作用の構造有機化学的理解が進んできたことにより、タンパク質の構造情報を基にタンパク質の機能を制御する新たな低分子を開発することができるようになってきた。</p> <p>有機機能物質化学：特異な機能をもつ化合物を開発する研究領域であり、近年この領域に非常に多くの研究者が注目している。その理由として、室温以上でも強磁性を示す分子強磁性体の発見や、フラレンにアルカリ金属をドーピングした $\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$ が飛躍的な超伝導転位温度 T_c (33K) の上昇をもたらしたこと、さらに天然の光合成中心の電荷分離状態の寿命に匹敵する電荷分離</p>

系の開発の成功など、多くの注目すべき発見が次々と報告されていることが上げられる。また、チオフェンを96単位連結したオリゴチオフェンやポルフィリンを連結した平面状分子であるポルフィリンテープなどがナノサイズの分子電線の候補として注目されている。さらに、ポルフィリンのメゾ位同士を1024個も連結したポルフィリン多量体も作られており、その長さは0.8マイクロメートルにまで及ぶ。これらの巨大な有機分子は光エネルギー伝達能をもっていることから、今後の応用が楽しみである。

超分子化学：非共有結合を基盤にした分子集合体を取り扱うこの分野も非常に多くの研究が行われている。ペダーセンのクラウンエーテルの発見に端を発し、この研究領域は大きな発展を遂げてきた。近年ではその対象がより複雑な系や巨大分子に向かっている。また化学結合でなく機械的に二分子以上が絡み合ったトポロジカル分子が注目されている。環状の分子の中を軸状の分子が通るロタキサンは環状の分子の運動を外部刺激で制御することにより、分子スイッチとしての働きをするので、その応用面を含めて興味もたれている。複数の環状化合物が互いにその内部を貫通しているカテナンと呼ばれる分子においても、一成分が一定方向に回転する分子モーターが開発され、注目を集めている。

ソフトマテリアル：有機ゲルや液晶がこの領域の研究対象として盛んに研究されている。中でも多様な刺激（化学反応、光、酸化還元）に応答するゲルが開発され、ゲルの磁性、光学特性の変化を制御することで分子スイッチ材料としての利用の可能性が広がってきている。

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

構造有機化学の一部は複雑系の化学へとシフトしていくと考える。生体高分子と低分子の相互作用を超分子化学的な手法で操り、生体機能を制御する方法の開発が課題としてあげられる。一方、ナノ空間での分子集合体（表面膜、薄膜、固体、結晶など）の性質を問題にする化学に興味をもつ研究者の数が増えてきている。従って、ナノ空間での高度に組織化された分子集合体の配列制御法の開発とそれによるボトムアップ法による分子素子の開発が非常に近い将来に解決されるべき課題の一つと考える。

・10年後までに解決・実現が望まれる課題

材料の分野では、太陽電池、有機EL、有機FET、有機半導体などのナノサイズに集積化されたデバイスの開発を指向する研究者も多く、無機材料を基盤としてきたこれらの材料の機能を有機物で凌駕することが次の課題となると思われる。

キーワード

有機機能物質化学、超分子化学、有機デバイス、ナノ空間化学、構造生物学

(執筆者： 灰野 岳晴)