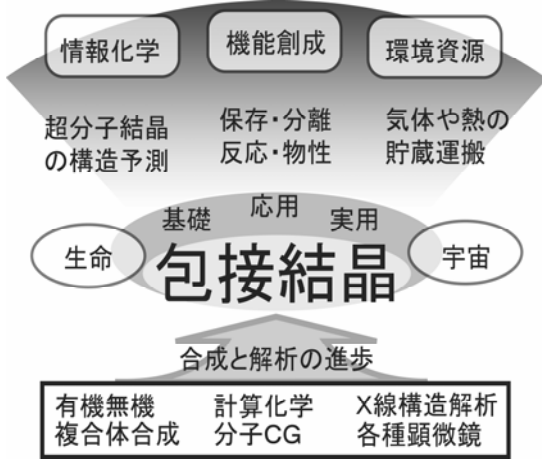


ディビジョン番号	8
ディビジョン名	生体機能関連化学・バイオテクノロジー

大項目	1. 生体機能関連化学
中項目	1-20. 分子認識、ホストゲスト化学
小項目	1-20-6. 結晶包接

概要（200字以内）

今までに多種多様な包接結晶が見出され、現在では結晶構造データに基づいて、鍵と鍵穴の関係を詳細に観測し、分子認識を考察することができる。ホストゲスト成分は、有機物から無機物へ、高分子へ、各種複合体へと広がっている。活性種の安定化、反応性や物性の制御を目指した研究が非常に盛んである。分離・食品・薬品分野への応用に加え、今後は環境・資源・エネルギー分野に対応した包接結晶が開発実用化されると考えられる。



現状と最前線

1940年代に尿素やヒドロキノンのX線結晶構造解析に基づき、ホスト分子にゲスト分子が非共有結合で取り込まれているという包接化合物の構造概念が確定した。それから60年余の間に、包接結晶の研究は著しく拡大し、超分子化学へと発展する礎となった。それとともに包接という学術用語の使用範囲は、有機結晶から、無機結晶、有機無機複合結晶にも広がった。

有機包接結晶は、初め偶然に見つけられ特殊なものとされたが、1980年代頃からしだいに分子設計に基づいて合成されるようになり、現在では実に多種多様なものとなっている。今では包接結晶は普通の有機分子集合体として、また結晶性超分子の代表例として理解されるようになっている。包接結晶の実例は、インターネットで各種データベースから容易に収集することができる。結晶構造の予測が可能になれば、近い将来には、計画的にあるいはプログラミングして、包接結晶を構築する時代が来るであろう。

ケンブリッジ結晶構造データベース（CSD）などから得られる立体構造データに基づいて、分子グラフィックスにより、鍵と鍵穴の関係を詳細に観測することができる。立体的関係に加え、水素結合などの非共有結合の有無や強度を比較検討できるため、包接結晶ではホストがつくる空間にゲストの収容される様子が明瞭である。そのため、分子認識や反応の機構を精緻に理解できることが多い。生体分子のモデルや模倣の枠を越えて、今後はそれに勝る機能をもつ包接結晶が創成されるであろう。

生体の情報機能に関連して、分子集合や分子複合を情報表現と考えれば、有機化学には、「共有結合を用いて分子情報をつくり、非共有結合を用いてこの情報を表現する」という基本原理が成立している。つまり、有機分子の共有結合による配列情報は、包接結晶として表現され得る。この考えによれば、包接結晶は情報の化学の骨格として今後位置づけられると思われる。

包接結晶の立体構造は、次元性に基づいて分類できる。ゲストがホストに四方を取り囲まれて孤立したものを零次元構造、ゲストが一方向に連なる一次元構造、面状に連なった二次元構造、格子状に連なった三次元構造である。これらの構造中に各種ゲストが収容または放出され、その際熱の出入りを伴っている。従って、物質の分離や貯蔵あるいは熱の貯蔵に長けている。ラジカルなどの不安定な活性種でも、包接空間では熱的に安定になり、長寿命となることが知られている。包接空間における異方的配列や運動を利用して、すでに多数の立体選択的反応が見出され、キラルな空間での定量的不斉誘導も実現している。最近では、電磁気・光学などの物理的性質の制御を目指した研究も多くなっている。共役系分子や各種金属を巧みに組み合わせれば、様々な物性をもつ包接結晶が創成できるであろう。非共有結合を多数取り入れた生体高分子のように、有機高分子ホストを一般的に合成する方法が開発されれば、機能複合材料への展開が飛躍的に進むと思われる。

包接結晶の基本構造は、広範囲の物質に適用できる。すなわち、ホストゲスト成分を有機物から無機物あるいは有機無機複合体へ、低分子から高分子あるいは高分子複合材料へと広げられる。ホストの作る包接空間の大きさは、nmに限らず、無機高分子では $\mu\text{m}$ に広がる。そのため、産業への利用も次第に広がりつつある。最初の例は、尿素による分岐有機分子の分離であった。シクロデキストリンなどの糖類は、現在食品用として大量に使用されている。防腐剤などの薬品としての利用も広がりを見せている。ゼオライトなどの無機物は、有機物の合成や反応に広範囲に用いられている。ガスハイドレートは低温高圧下で大量に扱う技術が確立し、メタンや天然ガスの運搬に用いられる時代がやって来た。将来水素貯蔵にも貢献し、各種廃熱の有効利用にも役立つと思われる。今世紀、包接結晶は環境・資源・エネルギーの問題解決に活躍すると期待できる。

#### 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：パソコンを用いた三次元仮想空間でのホストゲスト関係の自在観察、各種有機無機複合体の合成と機能創成、直径と周期が数 nm の空間をもつ包接結晶の作成、ガスハイドレートの実用化。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題：計算化学による分子構造から包接結晶構造の予測、分子量の大きなキラルホスト分子の合成、生体系の定序性情報を意識した高分子包接結晶の作成、水素の貯蔵運搬技術の実用化。

#### キーワード

X線構造解析、複合体合成、機能創成、資源環境、情報化学