

ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-1. 結晶分類
小項目	1-1-2. 水和物結晶

<p>概要（200字以内）</p> <p>近年の水和物に関わる主要な研究は、有機物性材料関連と、医薬品関連に二分される。結晶構造の構築という意味で結晶水が物性に寄与していることは自明だが、物性発現への水ダイナミクスの直接のかかわりが解析されている事例は限られており、今後の展開が期待される。医薬品結晶の物性評価に関しては、熱力学的観点に加え、構造学的観点からの議論が増すことが予想される。この他、水ネットワークに関する研究の展開に期待がかかる。</p>	<p>有機結晶 有機水和物結晶 水和物</p> <p>有機物性材料： 結晶水の物性への寄与の解析→制御</p> <p>医薬品： 熱力学的データに基づく物性評価 →構造科学的観点の導入</p> <p>水ネットワーク包含結晶： 生体における水チャンネル、プロトンポンプの分子論的理解→人工系の設計</p> <p>中性子解析他の手法を用いた結晶水のダイナミクスの解析</p>
--	--

現状と最前線

<p>現状</p> <p>1. 有機物性科学にかかわる水和物結晶</p> <p>有機非線形光学材料や有機超伝導体、磁性体など物性発現の観点から注目されている有機結晶の中で、水和物結晶であるものは枚挙にいとまがない。しかし、結晶水が物性発現に直接関わっていることが確かめられているケースは少ない。誘電体におけるオキソニウムイオンを介したプロトンリレーなどが、直接の関与が明らかな事例として挙げられる。無機酸化物超伝導体において、結晶水の含量と物性発現のかかわりに焦点をあてた解析がなされた結果、その寄与が明確化された例が報告されている。有機物性材料においても、結晶水に焦点をあてた解析がなされれば、結晶水ダイナミクスが直接、間接に物性発現に寄与している例は多く存在すると推察される。</p> <p>2. 医薬品に関わる水和物結晶</p> <p>医薬品結晶の物性評価において、結晶水が重要であることは古くから知られている。これを受けて医薬品開発の過程で、結晶多形の問題ともかかわって水和物のキャラクターゼーションとこれを考慮した結晶形の選択は不可欠の課題となっている。従来は赤外線吸収スペクトルや熱分析を手段とした解析結果に基づく熱力学的な議論が中心であったが、近年は、単結晶を用いた構造解析が容易になったことを受けて、結晶構造に立脚した議論が展開されるようになって</p>

てきている。

3. その他

1, 2以外では、有機結晶内で結晶水の一次元鎖やサイクリックなネットワーク構築例が結晶工学とかかわりの中でしばしば報告されている。カーボンナノチューブ内での水の輸送のダイナミクスの解析などもこの範疇に入れることができよう。これらについて、生体系における水和機構やプロトンポンプ、水チャンネルの分子論的理解、人工的なプロトンリレーの実現など観点からの議論がなされている。

将来予測

上記1については、新奇な物性実現、物性制御の観点からのアプローチの一つとして水和物への関心は、今後、高まると予想される。結晶水に焦点をあてた解析がなされれば、結晶構造の構築にかかわる結晶水が直接、間接に物性発現に寄与している例が多く見出されていこう。また、結晶水の挙動を知り物性制御や物性発現への利用を考える上で、X線結晶構造解析からでは困難な結晶水の水素原子位置およびダイナミクスについての情報を得ることが本来必要であり、この意味で、中性子構造解析の重要性が増すと考えられる。しかしながら、結晶水が物性発現に直接関わる系を設計構築することはさほど容易ではなく、成功例は僅かにとどまろう。

2については、医薬品開発における水和物のキャラクタリゼーションの重要性は今後も変わらない。粉末X線結晶構造解析からの構造決定が可能になりつつあることを受けて、この方向での研究は今後増加して行くであろう。また、酵素や抗体など生体高分子を医薬品として用いる方向が進むにつれ、新しいキャラクタリゼーション方法の確立も必要となってくると思われる。

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

中性子構造解析を含めた多様な手段による結晶水の構造とダイナミクスの解析と、これに立脚した物性との相関の分析

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

人工的制御可能な水チャンネルやプロトンポンプの実現

結晶水の制御を介した新奇な物性発現、物性制御の実現

キーワード

水和物結晶、結晶水、有機物性材料、医薬品、結晶構造

(執筆者： 菅原 洋子)