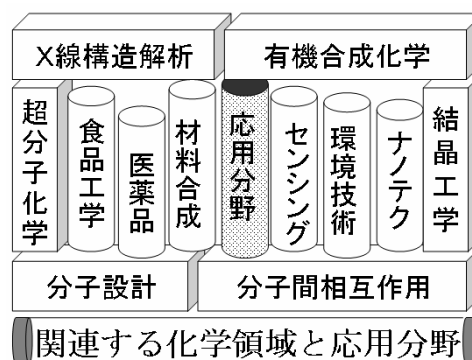


ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-1. 結晶分類
小項目	1-1-9. 包接結晶

概要（200字以内）

包接結晶は、薬効成分の徐放剤やシクロデキストリンが揮発成分を閉じ込める添加剤として医薬品や食品で利用されている。エネルギー環境分野では水素やメタンや炭酸ガスの吸蔵や分離やセンシング技術、ナノテクでは導電性高分子の分子被膜によるナノ電線の実現が期待される。今後、超微結晶や粉末試料からの構造解析が研究を加速する。また、計算科学の進歩で多成分結晶の構造予測が実現すれば自在な機能材料の設計が可能となる。



現状と最前線

分子間相互作用でホスト分子がゲスト分子を取り込んだ多成分結晶を包接結晶と云う。1940年代のヒドロキノンや尿素の結晶構造解析に始まり、単結晶のX線構造解析の進歩とともに研究対象となった。また80年代以降の超分子化学や結晶工学の台頭とともに包接結晶の利用が多数報告されている。水和物や溶媒和結晶を含めると報告されている有機結晶の約1割は包接結晶である。包接結晶は、分子内包接（分子内の空孔にゲストを包接）と結晶格子内包接（結晶格子の間隙にゲストを包接、クラスレートとも呼ばれる）に大別される。

現在、包接化合物の利用は、食品分野で揮発性の高い辛味や香りの成分を安定に食品へ添加するシクロデキストリンが好例である。また、医薬品の分野では薬効成分が徐々に解離する徐放性を利用する例や合成化学では光学分割剤や反応場として包接結晶を利用する例が報告されている。高分子化学では包接結晶が形成する一次元空孔内での包接重合や結晶相重合で反応を制御する例がある。包接結晶の分野における日本の貢献は大きく、車輪-車軸型ジオールホスト、天然物に関連するコール酸やペプチド類、また有機ゼオライトなどを開発している。

研究の最前線では機能性材料としてさらに包接結晶の多様かつ高度な利用が求められている。エネルギー環境分野のメタンハイドレート（水の結晶格子でのメタンの包接）や包接による水素ガスなどの吸蔵がある。また包接による色調や物性変化でセンシングする技術、有害物質や炭酸ガスの分離技術への応用、また、グリーンケミストリーでは溶媒を用いない包接結晶を反応場に利用する固体化学の研究されている。ナノテクノロジー分野では導電性高分子の分子皮膜による分子電線の開発や包接空間の孤立空間の利用した不安定化学種の単離。さらにホストゲスト化学を固体で利用する包接結晶は新たな高機能を創製する固体材料として期待される。

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
 - ・ 10 マイクロメートル以下の微結晶試料からの三次元単結晶構造解析の一般化
 - ・ 粉末X線構造解析に一次元データからの三次元単結晶構造解析の一般化
 - ・ 包接結晶のホストゲストの動的な挙動や結晶表面の直接観察技術の確立
 - ・ エネルギー環境技術として水素、メタン、炭酸ガスの包接結晶での固定
 - ・ 包接結晶の分子認識能を利用した分子ふるいや分離技術の実用化

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 - ・ 計算科学による他成分結晶の構造予測の確立とそれにもとづく分子システムの設計
 - ・ 迅速X線構造解析装置の高速化と包接結晶の動的構造変化の構造解析
 - ・ 包接現象を利用したセンサー技術の確立と実用化
 - ・ ナノテクノロジーとしての分子ワイヤーの被膜技術とデバイスへの応用
 - ・ 分子カプセルや包接技術の高度化によるドラッグデリバリーへ応用

キーワード

包接化合物、クラスレート、結晶工学、ホストゲスト化学、超分子化学

(執筆: 赤染 元浩)