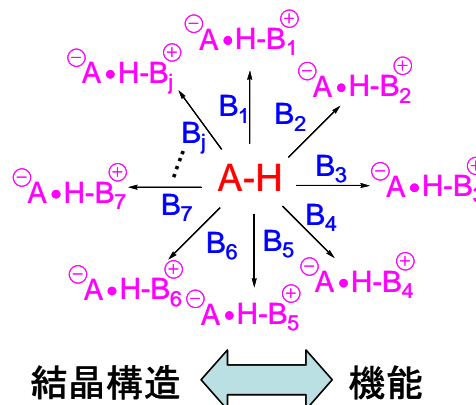


ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	1. 構造
中項目	1-1. 結晶分類
小項目	1-1-11. 有機塩

概要（200字以内）

有機塩の酸性の化合物と塩基性の化合物を混合することで形成される有機塩は2つの成分が必ず複合化する。この現象を利用して、現在まで有機伝導体や有機超伝導体、単次元鎖量子磁石や三次元非線形光学材料、光二量化、トポケミカル重合、包接結晶、イオン液体や低分子ゲル化剤など様々な機能をもつ有機結晶材料の探索がなされてきた。ラセミ体の光学分割もこの方法であり、結晶の機能を引き出す有用な方法と考えられる。



現状と最前線

有機塩の最も重要な特徴はアニオンとカチオンが必ず1：1で結晶化する点にある。つまり酸性の化合物と塩基性の化合物を混合することで塩が形成される場合、混合した2つの成分が必ず複合化する。これは2つの中性成分を混合しても必ずしも包接結晶や共結晶などの複合体が形成されないことと対照的であり、信頼性の高い複合体形成法と考えられる。またm種類の酸とn種類の塩基からは、(m x n)種類の塩がコンビナトリアル化学的に合成でき、機能性結晶のスクリーニングが可能となる。

このような有機塩の特性を利用した結晶工学的なアプローチとして、現在では機能（反応）・結晶構造・分子構造との相関を明らかにしようとする研究や機能性（反応性）有機結晶の機能（反応）の改変を目指す研究が盛んに展開されてきた。特に一方のイオンに機能（反応）性の官能基を導入し、対イオンの化学的性質や立体構造を変化させることにより、結晶中での分子の電子的環境や機能性官能基の配列を意図的に変化させようとするものである。無機の対イオンをもつ有機錯体も含めて考えると、このようなアプローチで検討されているものとして、有機伝導体や有機超伝導体、単次元鎖量子磁石や三次元非線形光学材料、オレフィンの二量化、ジエン・ジアセチレンのトポケミカル重合、包接結晶のホスト分子、ナノポーラス結晶、結晶相ではないがイオン液体や低分子ゲル化剤などが挙げられる。また、古典的なジアステレオマー法によるラセミ体の光学分割もこの方法論によるものと考えられる。

また、医薬品の分野では、酸性・塩基性のAPI (Active Pharmaceutical Ingredients) の薬剤としての性質（溶解性や結晶性）を変えるものとして、様々な塩が利用されており、実用的な面からの検討が進んでいる。またこれらの結晶の結晶構造解析などから、これらの結晶材料としての基礎的な性質を決める因子の検討が進められている。これらも有機塩を用いた機能性結晶材料の開発と考えられる。

イオンのライブラリーに関しては、汎用のカルボン酸やアミン、無機酸・無機塩基などが挙げられるが、ナノサイズの酸化物イオンのクラスターや非配位性のアニオンなど、これまでに知られていないイオンが現在でも次々合成されており、これらの“新しい”イオンからなる有機塩を用いることで新しい機能をもつ有機塩がコンビナトリアル的にスクリーニングされていくものと思われる。

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
 - 無機・有機の様々なイオンのライブラリーの構築
 - 有機塩を利用した機能性官能基の次元性および配列制御のライブラリー化
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 - 有機塩を利用した機能性官能基の複合化および配列制御
 - 有機塩を利用した薬剤の改質技術の本格的な利用

キーワード

アニオン・カチオン・結晶構造・コンビナトリアル化学・塩形成

(執筆: 佐田 和己)