

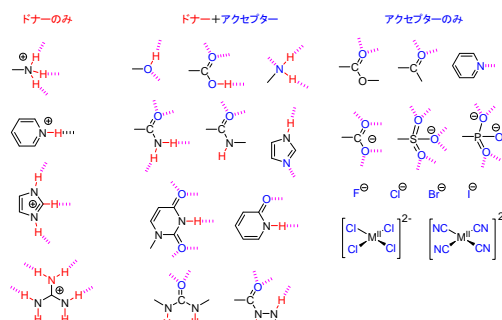
ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	2. 物性
中項目	2-1. 相互作用
小項目	2-1-2. 水素結合

概要（200字以内）

様々な単独の水素結合性官能基を有する化合物について、その水素結合パターンが完備しつつある。それに従い、既知の水素結合ネットワークを用いて、機能性官能基の集積化や配列制御、および他の分子間力との協同効果による結晶構造の制御などに研究の中心が移っている。また、非水素結合部の分子構造の改変に伴う水素結合ネットワークの超分子異性が精力的に研究されており、これらが克服されることにより、本当の意味で結晶設計が可能になると思われる。

基本的な水素結合性官能基のドナー数およびアクセプター数



現状と最前線

有機分子の結晶構造を支配する分子間力のなかで最も強くかつ指向性のある水素結合はこれまで分子構造から結晶構造を制御するためのツールとして精力的に研究が展開されてきた。結晶工学の立場から、①水素結合性官能基の水素結合ドナーおよびアクセプター間の生じる水素結合パターンの分子設計、②非水素結合部の分子構造の改変に伴う水素結合ネットワークの超分子異性(Supramolecular Isomerism)、③従来の枠を超えた様々な官能基間 (C-H...H, C-H...X など) での新しい水素結合の探索、④既存の水素結合ネットワークを用いて、機能性官能基の集積化および配列制御、および⑤他の分子間力との協同効果による結晶構造の制御、の5つが精力的に研究されてきた。

①に関してはこの十年間の研究によって、ほとんどの基本的な水素結合性官能基の水素結合ドナー・アクセプター性などが明確になり、それらがとりうる水素結合パターンが結晶構造解析により明らかになり、結晶構造と分子構造の相関がかなり明確になっている。例えば、結晶構造における「堅い(Robust)」超分子シントンとして、尿素誘導体やメラミン・バルビツールなどによって形成される水素結合ネットワークは結晶のみならず、低分子ゲルや液晶などの他の分子集合体形成に利用されている。しかしながら、同一の水素結合性官能基でも、複数の水素結合パターンを形成する場合があります、その現象の理解に向けて、②の研究が行われており、非水素結合性置換基の大きさ、形、キラリティーの影響や他の分子間相互作用の役割が明らかにされている。④においては、オレフィンやジエン・ジアセチレンなどの反応性官能基の配列

を水素結合により制御し、光二量化やトポ化学重合を積極的にデザインが可能となっている。包接結晶または共結晶など複数の化合物を含む結晶においても、水素結合によるナノ空孔のデザインや機能化についての研究が精力的に行われている。⑤については、金属-配位子間の配位結合や電荷移動錯体形成などと水素結合を巧みに組み合わせることで、機能性官能基の集積化や構造の次元性制御を行い、特異な磁気・電子環境（強誘電性・伝導性・超伝導性など）を作りあげることが試みられている。

これらのアプローチはいずれも最終的には有機結晶の構造をデザインすることを目的としており、これと、分子そのものの機能を操ることが可能になり、その機能を最大限に引き出す分子配列を水素結合でデザインすることができれば、様々な機能をもつ有機結晶の構築が可能になると期待できる。また、これらの機能の集積や複合化への道筋がしめされるものと考えられる。

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
簡単な水素結合性官能基からなる分子における結晶構造の予測
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
複数の水素結合性官能基や、他の分子間相互作用との協同性を利用した結晶構造のデザイン
機能性官能基の配列制御および水素結合における超分子異性の解明

キーワード

分子間力・分子集合体・階層構造・結晶構造・分子結晶

(執筆者：佐田 和己)