

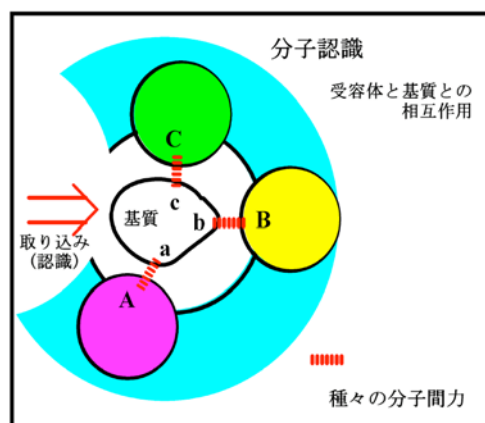
ディビジョン番号	16
ディビジョン名	有機結晶

大項目	2. 物性
中項目	2-1. 相互作用
小項目	2-1-4. 分子認識

概要（200字以内）

分子認識とは「分子を認識する現象」であり、分子認識系の有機結晶を作成し、構造解析によりその状況を解明できる。粉末X線回折パターン、さらには単結晶X線回折により構造を詳細に知ることができ、有機結晶の特徴である。

有機結晶により分子認識現象を再現し、分子間に働く相互作用を解明する、さらにはその認識機能を利用しようという研究は盛んに行われており、分子認識化学発展に多大な貢献をして来た。



現状と最前線

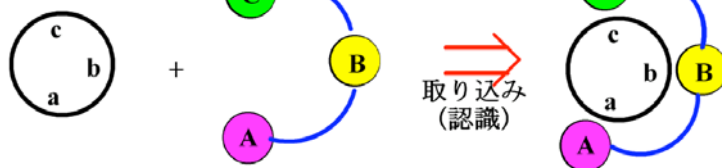
分子認識とは、言葉の通りに「分子を認識する現象」であり、その重要性は生体における物質の代謝や情報伝達等で認められている。酵素が特定の基質を認識し、変換させることはその代表である。周知のように、匂いや味を感じるのもそれぞれの受容体が分子を特異的に認識し、その情報を脳に伝達するためである。分子認識系の有機結晶を作成し、構造解析によりその状況を解明できる。粉末X線回折パターン、さらには単結晶X線回折により構造を詳細に知ることができ、有機結晶の特徴である。

この分子を認識する現象を有機結晶により再現、そしてその認識機能を利用しようという研究は盛んに行われている。分子を認識する様式は次の二つに大別できる。1) 生体におけるタンパク分子のように有機ホスト分子がある特定分子と分子間相互作用力により1:1包接錯体を形成する(様式A)。2) 複数の分子が集合体を形成し、その集合体の内に存在する空孔に特定分子が認識され、包接される(様式B)。有機結晶は様式Bの研究に威力を発揮する。たとえば、尿素の結晶では小分子が入るのに適した大きさの空孔が形成され、ヘキサンなどのさまざまな低分子化合物が包接される。このような包接結晶を形成できる分子はこれまでに数多く知られており、詳細は小項目「包接結晶」を参照されたい。

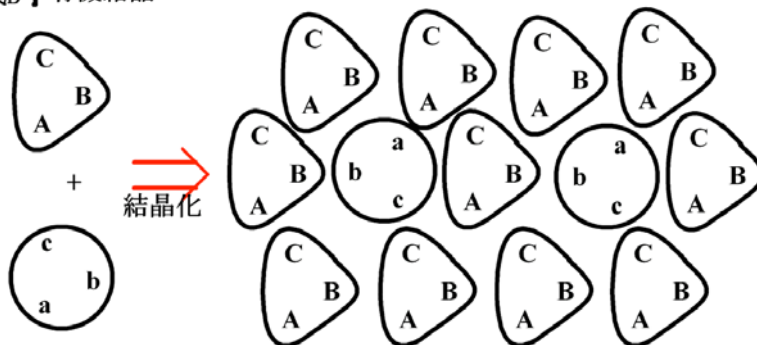
分子が認識される駆動力は、様式Aでは有機分子ホストとの間に働く分子間力であり、様式Bでは空孔内における壁面との分子間相互作用である。有機結晶自体も有機分子の集合体であ

り、様々な分子間力によって支えられている。この分子間相互作用は電磁気力によるもので、静電相互作用、誘起力、分散力のように遠距離でも働く相互作用と、軌道間の相互作用に基づく交換反発力と電荷移動相互作用などの短距離でしか働かない力に分けることができる。これらの力のいくつかが関与する

【様式A】 1 : 1 錯体



【様式B】 有機結晶



水素結合やCH -  $\pi$ 相互作用、ベンゼン - ベンゼン相互作用、さらに分子内に含まれるハロゲン原子と窒素や酸素などのヘテロ原子の非共有電子対との相互作用の報告もある。これらを研究するのに有機結晶が利用される。有機結晶では、有機分子が規則的に配列している。そしてその状態を単結晶X線構造解析で知ることができる。最近ではかなり小さな単結晶でも解析できるようになった。さらに小さな微結晶に対する粉末X線回折パターンから結晶構造を求めることも実用化されるようになった。

受容体あるいは包接空孔との認識された分子との近づきを求めることにより、分子認識に対する駆動力を明らかにできる。有機結晶では、ベンゼン環などの $\pi$ 面が固定され、それぞれの $\pi$ 面の近接方向が明確にできる。このことを直線（平面）偏光との併用により、電荷移動相互作用に関与する $\pi$ 面の近づきを明確にすることも可能となる。

以上のように、分子認識化学で有機結晶を用いて研究することは、分子間相互作用の解明に寄与する。

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
  - 分子認識における分子間力の体系化
  - 有機結晶を利用する分子認識を機能製品に利用
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
  - 有機結晶分子認識を使ったセンサーの実用化

キーワード

包接、分子間力、X線構造解析、分子間相互作用、認識力