

有機結晶サマースクールなどは、いかがでしょう

大阪大学産業科学研究所 宮田 幹二

有機結晶の一つであるホスト・ゲスト包接結晶に携わってから 40 年余、有機結晶部会設立(1997 年)から 20 年、初回からの参加者として、願望を一つ。これまでの有機結晶シンポジウムよりずっと自由自在な雰囲気をもつ、例えばサマースクールなどを有志で開催しませんか。自由自在にプログラムを組み、学習・討論・情報交換・交歓などができる、中堅や若手が中心の合宿の場である。昨年の広島大学のプレシンポジウムでは、過去の有機結晶シンポジウムにはなかった、新しい複数の試みがなされた。これを是非発展させ、有機結晶部会がさらに飛躍してほしい、と願うのである。今や X 線結晶構造解析が日常化し、有機結晶は多分野融合領域として定着した。それゆえ、もう少しリラックスして集える場があれば、と思うのである。

言い古されてきたことだが、学会やシンポジウムは、どうしても公式の研究発表の場となる。そのため、懇親会があるとはいえ、私的な経験を踏まえた本音を語れる時間は、それほどあるわけではない。スクールでは、研究紹介、自己紹介、世代間交流、技術伝承、最新情報の交換などは当然として、自由なプログラムを会員に提案してもらおう。例えば、私の講義、私の海外留学、私の英語、私の国際交流、私の成功と失敗、私の戦略戦術、私の秘策、私の恩師、などと称して、多分野の研究者がワイワイガヤガヤと好きなようにやるのである。インターネットでの研究室ホームページ紹介、関連国際学会の紹介や参加勧誘などもできよう。もちろん研究内容への鋭い突っ込みの時間もほしい。有機結晶領域が定着した現在では、数回も開催すれば種が尽きますよ、ということは絶対ないだろう。

個人的な思い入れだが、このような場で分子グラフィックスや映像を十分に楽しんでほしい。私が有機結晶にどんどん引き込まれてきた理由の一つは、分子グラフィックスの魅力である。ナノ科学の三次元データとして、結晶構造データほど素晴らしいものはない。コンピューターのハードとソフトの急速な進歩により、動的な分子世界を気軽に映像化できる時代である。思い返せば、1980 年代後半、パソコンが合成系の有機化学教室にも入りはじめ、分子構造式や分子模型の時代から分子グラフィックスの時代へ変わると感じた。もし包接結晶のホスト・ゲスト関係を手軽に視覚化できれば、分子認識機構がわかり、研究が楽しくなると、ワクワクした。その頃と比べ、学会での発表方法も随分進化し、PowerPoint を基本とするプレゼンが定着した。しかし、発表時間枠は変わらないので、有機結晶の視覚的表現やアニメ映像を満喫する時間は取れない。折角、結晶の三次元データという宝を豊富に持つのに、若者達を有機結晶にぐいぐい引き寄せる機会が失われているのではないか。

筆者は、ずっと高分子学会会員でもあり、若いときの研究の思い出は、ほとんどその中での活動にある。社会との接点の多い高分子は、産官学の交流、若手の会や専門部会の活動が昔から盛んである。境界領域の有機結晶に参加する方々は、各自の根城をもち、様々な経験をもつ。有機結晶部会でも、新しい活動が有志により生まれてもよいのではないか。昨年のようなプレシンポジウム、あるいはサマースクール、少人数の合宿等々。財政的基盤を考える必要も出てくるが、これを機会に資金調達法を真剣に探し求めるのも良いかもしれない。

ここ 30 年ほどで、有機結晶に対する意識はどう変化したか。有機結晶部会設立前、有機結晶の教科書は、「結晶の分子科学入門」(笹田, 大橋, 斎藤/編, 講談社サイエンティフィク, 1989)であった。題

名には有機が含まれず、本文では分子性結晶という用語が使われた。それ以前から、固体化学の本は多数あったが、無機化学中心であった。このような状況は、部会員による書物の出版で変わった。例えば、無機ではなく有機化学を中心とする「固体有機化学」(小林・林, 化学同人, 2009)が出版され、一昨年には「結晶化学; 基礎から最先端まで」(大橋, 裳華房, 2014)が上梓された。昨年, 多数の部会員が執筆した, 「Advances in Organic Crystal Chemistry; Comprehensive Reviews 2015」(田村, 宮田/編, Springer, 2015)が出版され, 有機結晶化学という研究分野が世界に発信された。一方, 世界結晶年 2014 年を記念して, 日本結晶学会より「日本の結晶学(II) ; その輝かしい発展」が出版され, 平成の幕開けから四半世紀の発展がまとめられた。

結晶学と有機化学は, どちらも長い歴史がある。これらの異分野が融合して, 新しい有機結晶化学という分野が興隆するとき, 重要な革新が起こるはずである。単純に, 物質として無機化合物から有機化合物, 巨大高分子に拡大しました, あるいは分析法として NMR に加え X 線結晶構造解析で分子構造を決定しました, ではないはずである。歴史的な教訓では, 異分野が融合するとき, 革新が起こり, 新しい境地に達するのである。とすれば, 有機化学を根城とする研究者は, 有機化学と結晶学の基礎概念が, どのように融合するかを鳥瞰的に見つめているのが得策である。

有機化学の立場から, 二つの観点がある。一つは, 物質の立体構造である。有機分子は球状のものは少なく, 種々雑多な立体構造をもつ。そのため, 分子を多点で近似し, 一次元棒状, 二次元板状あるいは三次元塊状と近似する。一方, 結晶学は数学的に一点近似で考える場合が多い。もう一つは, 物質の集合構造である。有機化学では一個の分子を考える場合が多いが, 結晶学では必然的に分子集合を考える。従って, 有機結晶では, 分子集合体の立体構造を多点近似で捉え, 超分子化学として考察することになる。用いる基礎数学は, 有機化学では三次元立体幾何学, 結晶学では群論であるが, 有機結晶では, この二つの数学が融合するはずである。

群論では, 対称操作の組合せで, 分子集合法が 230 個の空間群として見事に体系化されている。有機化学者にとっては, この空間群は近寄り難い高峰のようである。数学的な対称操作は同等で単純な記号で表示されるが, その対称操作で生まれる有機分子集合体は種々雑多である。しかも, 対称操作に必要な点・線(軸)・面, さらに結晶の単位格子の三軸は, 有機分子の立体構造と全く連携していない。この高峰に近寄る方法があるだろうか。人間のように, 有機分子を頭尾・左右・背腹の三軸非対称な物体として近似できるが, このような平行六面体の物体なら, 単位格子の三軸や対称操作と関連づけられる。キラリティの観点からは, 分子キラリティに加え, 超分子キラリティを考察するのは当然のことである。立体幾何学で考えると, 分子間のほんの少しのずれで, 超分子キラリティが発生する。結晶内の分子集合体には, ずれに基づくキラリティが満ちており, アキラル分子からキラル結晶が生じるのは不思議ではない。

近年, 分子間エネルギーの計算が益々正確になりつつあり, 昨年「有機分子の分子間力; *Ab initio* 分子軌道法による分子間相互作用エネルギーの解析」(都築, 東京大学出版会, 2015)が出版された。この分子間エネルギーを基礎に, 有機分子の集合法を立体幾何学的階層構造として理解できるであろう。さらに, 粉末解析, ナノ微結晶解析, 巨大単位胞解析, 解析装置, 計算機などの進化により, 有機結晶化学は, 20 年先にはどのように変貌しているのだろうか。