

提出日：平成 29 年 5 月 15 日

平成 28 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

(2) 研究成果の概要

課題名	「ケンブリッジ結晶学データベースの利用による、自然分晶可能なヘテロ環化合物の探索・設計に関する研究」		
研究代表者	氏名	国本 浩喜	
	所属機関名・部局名	金沢大学・国際基幹教育院	
	職名	特任教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村 春木		
<p>一般にヘテロ環化合物は、医薬品等として使用されるものが多いため、単一の鏡像異性体のみを選択的に取得することが要求される。本研究課題では、単一の鏡像異性体のみを選択的に取得する手法のうち、「優先晶出法による光学分割法」に着目した。</p> <p>優先晶出法とは、異種の鏡像異性体の混合溶液から結晶化する際に、同種の鏡像異性体同士が互いに結びついて集合する性質（自然分晶）を利用した光学分割法である。ところが、自然分晶する物質は、今のところごく少数しか見出されていない。それに加えて、自然分晶可能な物質を探索・設計するための手段が、未だに系統的に確立されていないという問題点がある。</p> <p>本研究課題では、種々のヘテロ環化合物について、ケンブリッジ結晶学データベース解析や単結晶 X 線構造解析等により、同種の鏡像異性体間に働く分子間相互作用の特徴を明らかにすることで、「自然分晶の要因を解明する」ことを目指した。さらにこれらの知見に基づき、自然分晶可能なヘテロ環化合物を「規則的・効率的に探索する」ための方法論の確立や、「新規に設計・合成する」ことを目指した。</p> <p>本研究期間では、種々のヘテロ環化合物について、ケンブリッジ結晶学データベース解析や、単結晶 X 線構造解析等により、同種の鏡像異性体間に働く分子間相互作用について詳細な検討を行った。そこで得られた知見に基づいて、分子内に種々の官能基を導入したヘテロ環化合物を合成した。</p> <p>しかし、これらの合成したヘテロ環化合物の中から、自然分晶可能なものを見出すには、本研究期間内では、いまだ至っていない。</p> <p>なお、この研究の過程で、結晶多形性を有するヘテロ環化合物や、水溶液中で容易に二量化を引き起こすヘテロ環化合物を見出すことができた。これらの成果については、今後、学会発表や学術論文への投稿を行う予定である。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 29 年 5 月 19 日（金） ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp