特集「結晶学による化学反応の可視化」にあたって

特集号担当：足立伸一, 植草秀裕, 尾関智二, 河野正規, 栗栖源嗣

Shin-ichi ADACHI, Hidehiro UEKUSA, Tomoji OZEKI, Masaki KAWANO and Genji KURISU: Visualization of Chemical Reactions by Crystallography

近年、無機化合物・有機化合物・生体高分子など、さまざまな物質が関与する化学反応を、原子・分子の三次元的な構造およびその動きを解明することによって理解しようとする研究が、非常に盛んになってまいりました。原子・分子の三次元的配置の関数で表される観測量を扱う結晶学が、この大きな流れを支えていることは言を俟ちません。そこで日本結晶学会誌では「結晶学による化学反応の可視化」と題し、2013年の特集号を編集することと致しました。

特集号編集担当からの依頼に応じて、結晶学の手法をフルに活用して、さまざまな視点から化学反応の可視化に関する研究を精力的に行っていらっしゃる先生方から、15報の論文をお寄せいただきました。本号では、便宜上それらを

1. 原子・分子の動きの可視化
2. 反応機構の可視化
3. 可視化に立脚した反応設計・反応制御

の三部に分けて紹介いたします。しかし当然のことながら、これらの三項目は互いに無関係ではあり得ず、紹介された研究の多くは、上記三項目の複数にまたがって展開されています。それぞれの論文において、「原子・分子の動き」、「反応機構」および「反応設計・反応制御」をどのように関連付けて考察しているかに注目して読み進めていただければ幸いです。

本特集に掲載した15報の論文では、有機小分子、配位高分子を含む金属錯体、生体高分子、合成高分子など多彩な物質が扱われています。また、酵素反応、光化学反応、光異性化反応、フォトリソリズム、吸着反応、キラル化反応、結晶相反応、固相反応、気相-固相反応、固相重合、金属集積、インターカレーションなど、多岐にわたる反応が論じられています。

このように、多彩な物質の関わるさまざまな反応を、単結晶X線回折をはじめ、単結晶中性子回折、粉末X線回折、X線溶液散乱(小角・高角)、X線吸収微細構造(XANES・EXAFS)など、結晶学を基盤とした計測法を駆使して三次元的に可視化しています。いくつかの論文では、ポンププローブ測定、時分割測定、温度変化測定などの先端的手法が用いられています。さらに、結晶学で得られた結果を補強するために、振動分光、紫外可視分光、溶液・固体の核磁気共鳴分光、光学顕微鏡観察、電子顕微鏡観察、量子化学計算、分子動力学計算、磁化測定、熱測定、気体吸着実験など、さまざまな研究手法が活用されています。これらの事例は、化学反応の可視化に限らず、結晶学を利用した研究法として、非常に示唆に富んでいます。

今回の特集がきっかけとなり、結晶学会会員をはじめとする多くの研究者がこの分野に興味をもち、結晶学を用いて化学反応を理解する研究の発展につながれば幸いです。

最後になりましたが、この誌面をお借りして、お忙しい中にもかかわらず早く原稿を執筆いただいた先生方に担当者一同厚くお礼申し上げます。