

平成26年 2月 25日

豊橋技術科学大学長 殿

審査委員長 菊池 洋



## 論文審査及び学力の確認の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。  
記

学位申請者	藤澤 郁英	報告番号	第 240 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	環境・生命工学専攻
論文題目	環状四量体複合体結晶構造を基にした分子認識様式としてのカチオン $\cdots\pi$ 相互作用とC-H $\cdots\pi$ 相互作用の研究		
公開審査会の日	平成26年 2月 13日		
論文審査の期間	平成26年 1月23日～平成26年 2月24日	論文審査の結果	合格
学力の確認の日	平成26年 2月 13日	学力の確認の結果	合格

論文内容の要旨  
本研究は生体系でのカチオン $\cdots\pi$ 相互作用およびC-H $\cdots\pi$ 相互作用を模倣すべく設計された分子認識系の構築と、分子認識様式としてのカチオン $\cdots\pi$ 相互作用とC-H $\cdots\pi$ 相互作用の存在と意義を明らかにすることを目的としている。そのために豊富な $\pi$ -電子系および良く定義された立体構造をもつホスト分子として環状四量体(レゾルシナレン、ピロガラレン)を、ゲスト分子として生体内で重要な働きを担う生体関連物質を用いて分子複合体を合成し、X線構造解析により結晶構造を、NMR測定により溶液内の分子構造を明らかにするとともに、分子間相互作用エネルギー計算によりこれらの相互作用の妥当性を検討している。本論文は5章より構成されている。第1章で本研究の背景および目的を、第2章で基本的な実験方法を記述している。第3章ではカチオン $\cdots\pi$ 相互作用に基づく分子認識系として、ゲストカチオン分子として第4級トリメチルアンモニウム基をもつ一群の生理活性物質(カルニチン、ベタイン、ホスホコリン)を用いて合成された計6種類の分子複合体におけるカチオン $\cdots\pi$ 相互作用について、第4章ではC-H $\cdots\pi$ 相互作用に基づく分子認識系として、ゲスト分子としてピペコリン酸(免疫抑制剤FK506の鍵骨格のモデル物質)あるいはプロリンを用いて合成された計4種類の分子複合体におけるC-H $\cdots\pi$ 相互作用について、それぞれ詳細に検討した結果をまとめている。第5章で本論文の結論を述べている。

審査結果の要旨  
本研究は生体系でのカチオン $\cdots\pi$ 相互作用およびC-H $\cdots\pi$ 相互作用を模倣すべく生体関連物質を用いて合成した計10種類のホスト-ゲスト分子複合体において、ホスト分子とこれらのゲスト分子との間にカチオン $\cdots\pi$ 相互作用あるいはC-H $\cdots\pi$ 相互作用が、結晶および溶液中で実際に存在することを明らかにした初めての報告である。エネルギー計算もその妥当性を裏付けている。このような簡単な合成モデル系でのカチオン $\cdots\pi$ 、C-H $\cdots\pi$ 相互作用によるホスト-ゲスト複合体の形成は、分子認識様式としてのカチオン $\cdots\pi$ 、C-H $\cdots\pi$ 相互作用の一般性を示すものであり、生体系における分子認識の理解に新たな視点を与えるものである。特にこれまでタンパク質の構造保持のみの役割とされているプロリン残基がC-H $\cdots\pi$ 相互作用により分子認識機能を持つことを示した意義は大きい。本研究はタンパク質構造の芳香環クラスター部をターゲットとする新規薬剤の設計を提案しており、新規薬剤の開発が期待される。また本研究は超分子化学の新たな研究分野として「新規のカチオン $\cdots\pi$ 、C-H $\cdots\pi$ 相互作用を分子間力とするホスト-ゲストの化学」の構築に寄与しており、この分野の更なる発展(新規超分子の構築と機能、新規有機結晶の構造と制御、新規機能材料の設計、等)が展望される。本研究の成果は6報の論文として査読付学術雑誌に掲載されている。以上により、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

菊池 洋



伊津野 真一



浴 俊彦



青木 克之



(注) 論文審査の結果及び学力の確認の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。