

(様式 1-1)

提出日：2024 年 5 月 1 日

2023 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

研究成果報告書

(1) 事業名（下記より該当事業名を選択し、ほかは削除して下さい。）

共同研究員 ・ 超高磁場 NMR ・ クライオ電子顕微鏡 ・ **MicroED** ・ 客員フェロー

(2) 研究代表者

氏名：瀬川泰知

所属機関名・部局名・職名：自然科学研究機構分子科学研究所 准教授

(3) 研究課題名（申請時に記載したものと同一課題名を記入して下さい。）

3次元共有結合性有機構造体の微小単結晶構造解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：栗栖源嗣教授（研究室名：蛋白質結晶学研究室）

(5) 研究成果の概要（公開）

高度に骨格が制御された構造体は機能の宝庫である。共有結合性有機構造体(Coalent Organic Framework : COF)はその代表例であり、構造有機化学や有機合成化学だけでなく材料科学的にも非常に注目を集めている。骨格を形成するユニットやそれらの結合様式によって、吸着、分離特性や光化学的、電気化学的特性など様々な物性を発現させることができるため、新たな機能性物質への応用研究が精力的に行われている。その中の一つである有機半導体において、三次元に共役した固体の創製は大きな目標であり、ありふれた元素から無機物を超える物性を得ることができると予想されている。構造的な乱雑さの無い、三次元に共役した構造体の合成が実現すれば、バンド構造までを見越した有機半導体の設計と合成が可能になり、材料科学に新たな高機能物質を供給できるとともに、構造有機化学、有機合成化学の両分野において大きなインパクトをもたらす。現在までに様々な骨格をもつ COF が合成されてきたが、三次元 COF の多くは sp^3 ユニットをもとに構成されるダイヤモンド型構造のため、骨格全体に広がる π 共役系を有していない。また、 sp^2 ユニットは一般に二次元構造をとるため、 sp^2 ユニットを利用した三次元 COF の形成は困難である。一方、三次元に広がる π 共役系を有する COF の合成は試みられているが、ユニット同士が一本の結合で繋がれているため自由回転が生じ、構造が一義的に定まらない。このように三次元共役という魅力的な特徴をもつ fc-COF (fully-fused, fully-conjugated 3D-COF) であるが、その合成手法は未だ確立されていない。

当該年度において研究代表者らは、fc-COF の合成および microED による構造決定を目的として研究を行った。フタロシアニンおよびヘテロサーキュレンをユニットにもつ 2 種類の COF に対し microED を適用した。フタロシアニン COF は結晶性が低く、回折点は得られたものの構造決定には至らなかった。これは粉末 X 線回折によって低結晶性であったことと整合する結果である。一方で、ヘテロサーキュレン COF は高い結晶性の微結晶粉末として得られ、microED によって微結晶の回折を測定したところ初期構造の決定に成功した。