

(様式 1-1)

提出日：2025 年 5 月 7 日

2024 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、ほかは削除してください。）

MicroED

(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ください。）

3 次元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 ）

(5) 研究成果の概要

*背景および目的、方法と結果について、公開して差し支えない範囲で記載。

共有結合性有機構造体（Covalent Organic Framework: COF）は、選択的ガス吸着、固体触媒などの材料として近年注目されている。全て典型元素からなるために軽量かつ低環境負荷の材料であり、さらに金属を含まないことで共役構造によるフレームワーク内の電荷輸送能を付与できることが期待されている。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。

本研究では、革新的なデザインによって、共役構造が 3 次元的につながった機能性 COF の開発および応用研究を行った。当該年度においては、正方形ユニットをスピロボレートリンカーでつないだ 3 次元 COF の合成および MicroED による構造解析に成功した。正方形ユニットとしては、中央に 8 員環をもつヘテロ[8]サーキュレン類縁体をスクリーニングし、適切な剛直性と溶解性を併せ持つユニットの開発に成功した。これを用いてホウ素試薬との反応を行ったところ、非常に結晶性の高い頑強な COF が得られた。粒径は 100 nm～1 μ m であり放射光を用いた X 線結晶構造解析に適したサイズに至らないが、MicroED によって非常に精度よく構造解析を達成した。