

(様式 1-1)

提出日：2026 年 5 月 13 日

2025 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：田中大輔

所属機関名・部局名・職名：関西学院大学・理学部・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。）

含硫黄半導体 MOF の結晶構造解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：栗栖 源嗣、中根 崇智、川本晃大（研究室名：蛋白質結晶学研究室）

(5) 研究成果の概要

配位高分子は、金属イオンと架橋配位子が周期的に結合して形成される有機－無機ハイブリッド材料である。特に、多孔性を有するものは金属有機構造体（MOF）として広く知られ、ガス吸着や分離など多くの分野で注目されている。また、金属イオンと有機配位子の組み合わせにより、構造や機能を分子レベルで設計できる点も大きな特徴である。しかしながら、これまで報告されている MOF をはじめとする配位高分子の多くは電氣的に絶縁性であり、電気化学触媒として優れた特性を示す例は極めて限られている。研究代表者は、これまでの研究でチオールを配位部位として持つ有機配位子を用いて多くの MOF の合成を行い、このような含硫黄 MOF が半導体特性を示すことを実証してきた。含硫黄 MOF は結晶化が難しく、これまで系統的な研究は実現されていなかったが、研究代表者は機械学習を活用したハイスループット合成評価技術により、約 100 種類もの新規物質を世界に先駆けて系統的に合成し、それらの構造決定を進めてきた。

一方、ハイスループット合成による合成条件探索を実施しても、X 線結晶構造解析に適したサイズおよび品質の単結晶を合成することができないケースも多数存在していた。このことは、新規配位高分子の構造化学を体系的に理解する上で大きな制約となっている。本研究課題では、microED 法を用いて、このような従来法では解析が困難な微小結晶の構造決定を試みた。2025 年度は、鉛と 1,3,5-Benzenetrithiol からなる配位高分子の構造決定を試みたが、得られた回折データから最終的な位相決定には至らなかった。

一方、カドミウムと 2-naphthalenethiol からなる配位高分子については、2024 年度に実施した microED 測定により決定した結晶構造の再解析を行い、ディスオーダー構造の最適化に成功した。これにより、結晶構造モデルの妥当性をより高めることができた。また、これらを初期構造としてバンド計算を再度実施し、その電子構造を評価した。さらに、同じ組成を持つ結晶多型との比較や結晶相転移挙動を系統的にまとめ、構造と物性の関係について考察した。これらの成果は、microED 法が微小結晶性配位高分子の構造決定に有効であることを示すものであり、原著論文として報告した。