

(様式 1-1)

提出日：2026 年 5 月 10 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：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、共役構造が 3 次元的につながった機能性 COF の開発および応用を目的としている。当該年度においては様々な 3D COF の構造解析を MicroED を用いて検討した。種々の 3D COF を測定していく上で、PXRD による粉末全体の結晶性評価と連動して行うことで MicroED の測定に適した試料かどうかを比較的すみやかに決定できるようになった。また、COF 合成の副生成物として生成した不溶性有機分子の構造決定に成功し、従来では困難であった副生成物の同定および副反応の機構の推定に大いに寄与した。さらに、前年度に MicroED によって構造決定された nbo トポロジーをもつ 3D COF について構造精密化を完了させ、論文として投稿した。