

平成25年度 科学研究費助成事業（特別推進研究）  
研究進捗評価 現地調査報告書

研究課題名	自己組織化による単結晶性空間の構築と擬溶液反応
研究代表者名 (所属・職)	藤田 誠（東京大学・大学院工学系研究科・教授）

**【評価コメント】**

研究代表者はこれまで分子性の自己集積型かご型錯体の合成と、その内部空間への特異的な分子の取り込みに関する超分子化学の分野で常に世界をリードしてきた。

本研究では、これまでの分子性の中空錯体を構成する金属錯体の末端のキレート剤を取り外すことで、中空錯体の構造を保ったまま高度な分子認識空間を有する配位結合ネットワークを有する単結晶空間が形成されることを見だし、分子と固体を結ぶ新たな研究分野を開発しつつある。

現在、世界的に活発な研究が行われているPCP（多孔性高分子錯体）では内部空間がゲスト分子の輸送路となっているのに対して、本研究で取り扱っている物質群は、分子性の分子認識能を有する中空構造を保持した単結晶材料であり、個々のかご型錯体の周りには大きな空洞が存在するため、単結晶空間内のかご型錯体への溶液中のゲスト分子の高速での取り組みが可能となっている。特に、単結晶空間への高速かつ立体特異的な分子の取り組みは、分子の結晶化を必要とせず、既に油状分子や50ngの超微量試料のX線結晶解析への道を開いている。

また、均一系の反応を固体結晶内の空間で進行させて原系・中間体・生成系のX線構造解析を行っている。

以上を踏まえ、配位結合ネットワークで形成される単結晶空間が、分子構造解析に変革をもたらすことが今後期待できる。