

科学研究費助成事業（特別推進研究）研究進捗評価

課題番号	24000009	研究期間	平成24年度～平成28年度
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）		

【平成27年度 研究進捗評価結果】

該当欄		評価基準
○	A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
	A	当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である

（評価意見）

研究代表者は、水中での疎水相互作用を利用した金属錯体の自己組織化により異なる大きさの内部空間を持つ数々のケージ化合物を合成し、ゲスト分子の包摂により形成される超分子錯体の分野で常に世界をリードしてきた。

本研究では、有機溶媒中で単一のフレームワークの末端配位子を取り除くことでフレームワーク構造を変化させることなく、ネットワーク化させた結晶材料を開発し、新たな学問分野を切り開いている。溶液中のゲスト分子を結晶性ネットワークフレームに包摂させることで、ゲスト分子の擬溶液構造のみならず、反応試薬溶液を順次フレーム内に包摂させ、反応を開始させて反応の全素過程（原系、中間体、生成系）の分子構造変化を、X線構造解析により決定するという全く新しい方法論を作り上げている。ゲスト分子を溶液・固体状態に関わらず結晶性ネットワークフレームに包摂させ、そのままX線構造解析を行うことにより、原系の分子構造のみならず反応中間体の構造決定を可能にした本研究は、構造解析の分野に革命をもたらし、また、溶液化学と固相化学の統合をも実現させており、画期的な成果を出していると評価される。

【平成30年度 検証結果】

検証結果	当初目標に対し、期待以上の成果があった。
A+	本研究の当初目的である中空錯体を反応場とする反応開発では、有機分子と金属錯体双方の包接による特異的反応開発や反応活性点の分離に基づくカスケード反応を見いだしている。特筆すべきは単結晶反応場の構築と、包接した有機化合物を細孔内で整列させ、その有機化合物のX線構造解析を可能にした研究成果であり、特に後者はX線結晶学の常識を覆す研究成果として画期的である。この研

究成果は、単結晶構造解析が困難であった有機化合物の構造解析に対する新手法としての有用性に留まらず、化学反応過程を解析する新たな手法としても有用である。加えて金属イオンと有機配位子からなる自己組織化球状錯体において従来常識を超える巨大ナノ空間の創出にも成功している。以上により、本研究は当初目標を大きく超える進展があったと認められる。