

金属錯体ソフトマテリアルの創成  
Fabrication of Coordination Soft Materials

京都大学高等研究院物質—細胞統合システム拠点

古川 修平

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ロジウム二核パドルウィール錯体、ルテニウム二核パドルウィール錯体を基本骨格に有する金属錯体多面体 (metal-organic polyhedra) の合成を行った。この MOP をポラスモノマーとして用い、イミダゾールやピリジン系連結配位子を用いて配位重合を行うことで金属錯体ソフトマテリアルの合成を行った。

具体的には、新規に合成したロジウムやルテニウムを有する MOP の結晶構造との比較を行うために、X 線結晶構造データベース検索を行った (Cambridge Structural Database を用いた)。ここでは、パドルウィール構造が理想とする形からどの程度歪んでいるのかを定量的に解析、またパドルウィール構造の axial 位に配位している分子の金属—配位子間結合を解析することにより、どの程度連結配位子が強く結合しているのかを見積もった。これにより、合成した金属錯体ソフトマテリアルの構造情報と、シミュレーションによって推定したポリマー構造との相関に関する研究を行った。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

“Understanding the role of linker flexibility in soft porous coordination polymers”

Yamil J Colón, Shuhei Furukawa

*Mol. Syst. Des. Eng.* **2020**, 5, 284-293. DOI: 10.1039/C9ME00117D