

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、銅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イオンを有する MOP、そしてロジウム、ルテニウム、銅イオンを複数種分子内に有する 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、金属種に依存したパドルウィール構造中の金属—金属間距離の変化、そしてパドルウィール構造の歪みを定量的に解析した。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)

“Multiscale Structural Control of Linked Metal-Organic Polyhedra Gel by Aging-Induced Linkage-Reorganization” Zaoming Wang, Christian Villa Santos, Alexandre Legrand, Frederik Haase, Yosuke Hara, Kazuyoshi Kanamori, Takuma Aoyama, Kenji Urayama, Cara M. Doherty, Glen Jacob Smales, Brian R. Pauw, Yamil J. Colon, Shuhei Furukawa
Chem. Sci. **2021**, *12*, 12556-12563.

“Porous Colloidal Hydrogels Formed by Coordination-Driven Self-Assembly of Charged Metal-Organic Polyhedra” Zaoming Wang, Gavin A. Craig, Alexandre Legrand, Frederik Haase, Saori Minami, Kenji Urayama, Shuhei Furukawa
Chem. Asian J. **2021**, *16*, 1092-1100.