

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 をポー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、または MOP を分子間相互作用を用いて結晶化させることにより、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イオン、ルテニウムイオン、または銅イオンを有する MOP の結晶構造中における配位環境の違いや分子の歪みを解析するために、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。結晶構造が不明な化合物については Material Studio を用いて分子構造をシミュレートすることで、解析を行った。またスーパーコンピュータシステムに既に導入されている計算パッケージ「Q-Chem」を用いて MOP 分子間の相互作用を定量的に評価することにより、MOP 分子構造がその集積構造に与える影響について調査した。以上の解析により、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 (謝辞なし)

1. “Dual photoresponsive & water-triggered nitric oxide-releasing materials based on rhodium-based metal-organic polyhedra”, F. J. Carmona, T. N. Chuba, E. Sánchez-González, J. Pirillo, Y. Hijikata, S. Furukawa, *J. Mater. Chem. B* **2024**, *12*, 233-239.
2. “Porous supramolecular gels produced by reversible self-gelation of ruthenium-based metal-organic polyhedra”, J. Troyano, F. Tayier, P. Phattharaphuti, T. Aoyama, K. Urayama, S. Furukawa, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 9543-9552.
3. “Pore-Networked Gels: Permanently Porous Ionic Liquid Gels with Linked Metal–Organic Polyhedra Networks”, Z. Wang, A. Ozcan, G. A. Craig, F. Haase, T. Aoyama, D. Poloneeva, K. Horio, M. Higuchi, M.-S. Yao, C. M. Doherty, G. Maurin, K. Urayama, A. Bavykina, S. Horike, J. Gascon, R. Semino, S. Furukawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 14456–14465.