

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、銅二核パドルウィール錯体と、疑似5回対称性を持つ配位子を用いて、多孔性金属錯体中に幾何フラストレーションを誘起し、それが3次元空間におけるネットワークとしてどのように緩和されるのかを調べた。銅二核パドルウィール構造を持つ酢酸銅と、疑似5回対称性を持つ配位子を用いて、合成条件のみを変更させることで、3つの異なる多孔性金属錯体を新規に合成した。

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、X線結晶構造データベース検索 (Cambridge Structural Database) を用いて、これまでに報告されている銅二核パドルウィール構造の構造データをすべて抽出し、理想となるパドルウィール構造でから、どの程度歪んでいるのかを2つの構造軸を決めてプロットした。そこに、今回新しく合成した幾何フラストレーションを持つ多孔性金属錯体の銅二核パドルウィール構造のデータを重ねてみたところ、これまでの構造に比べて大きく歪んだ構造であることがわかった。このような局所的な構造の歪によるフラストレーションの緩和は、他の4つの緩和プロセス (配位子の配位サイトの利用度、空間サイズ、配位子の孤立化、配位子の水素結合) との競合により決定され、幾何フラストレーション構造をもつ多孔性金属錯体では、決まった基底構造を持たず、条件によって構造が大きく変わることが明らかになった。

発表論文 (謝辞あり)

発表論文 (謝辞なし)

“Pseudo-5-Fold-Symmetrical Ligand Drives Geometric Frustration in Porous Metal–Organic and Hydrogen-Bonded Frameworks”

Frederik Haase, Gavin A. Craig, Mickaële Bonneau, Kunihisa Sugimoto, Shuhei Furukawa  
*J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 13839-13845. DOI: 10.1021/jacs.0c04450