

水素結合をキーロックとする柔軟な多孔性配位高分子のゲスト選択的ゲートオープン挙動

(京大 iCeMS¹) 大竹 研一¹、Yifan Gu¹、Jia-jia Zheng¹、北川 進¹

Guest-selective Gate-Opening Behavior of Flexible Porous Coordination Polymer with Hydrogen-bond Keylock (¹*Institute for Integrated Cell-Material Sciences, Kyoto University*) ○Ken-ichi Otake¹, Yifan Gu¹, Jia-jia Zheng¹, Susumu Kitagawa¹

Flexible porous coordination polymers (PCPs) have been extensively investigated because of their interesting gas adsorption properties such as gate opening behavior and shape-memory effect. In this work, we developed a novel PCP that exhibits highly selective gate-opening behavior toward a specific target molecule, by utilizing hydrogen-bond keylock design. This PCP has an interdigitated 2D sheet-type structure and exhibits reversible structural changes upon CO₂ sorption. The PCP design, syntheses, crystal structures, gas sorption behaviors, and theoretical characterization were investigated. Details of this study are reported.

Keywords : Porous Coordination Polymers; Crystal Structures; Gas sorption

柔軟な多孔性配位高分子 (PCP) は、ゲートオープン挙動や形状記憶効果などの興味深いガス吸着特性を持つことから、広く研究されている。報告者らは、様々なガス/蒸気に対する PCP の吸着・分離選択能に関して系統的な知見を得ることを目的として、一連の PCP 群の設計・合成を行い、その構造柔軟性とガス吸着特性について調べてきた。本研究では、水素結合のキーロックデザインを利用して、特定の標的ガス分子に対して高選択的なゲートオープン挙動を示す新規なフレキシブル多孔性配位を開発した。その中で非常に高い選択制を持って CO₂ 吸着特性を示す新規の PCP、**PCP-X** を見出した。PCP の設計、合成、結晶構造、ガス吸着挙動、および理論的な特性を調べた。**PCP-X** は、合成時には三次元ネットワーク構造を有している。

PCP-X は、熱活性化処理によって構造が大きく変化して、interdigitated 型二次元シート積層構造を持つ **PCP-X-act** となることが単結晶構造解析により明らかになった(図 1 左)。また、**PCP-X-act** は配位フリーの水酸基やピリジン基を骨格に有しており、各シート間が水素結合によって連結されていることもわかった。ガス吸着特性を調べたところ、**PCP-X** が可逆的な構造変化を伴いながら、CO₂ の吸着を行うことも明らかになった(図 1 右)。詳細は当日報告する。

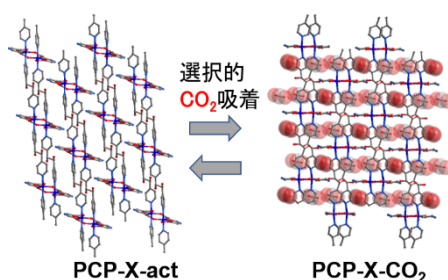


図 1. **PCP-X** の結晶構造の変化。Co:青色,C:灰色、N:水色,O:赤色で示した。CO₂ 吸着構造(**PCP-X-CO₂**)では、吸着された CO₂ 分子を半透明の vdW モデルで示した。