

### 3成分からなる共有結合性有機構造体の形成にモノマー構造が及ぼす影響

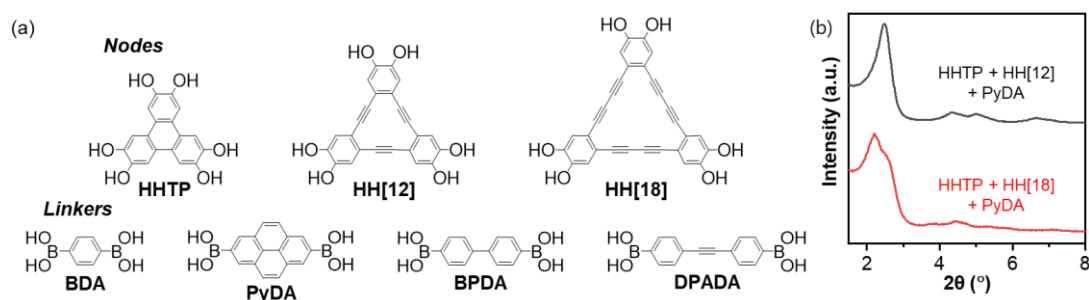
(阪大院工) ○大久保 円造・三浦 雅司・相澤 直矢・鈴木 充朗・中山 健一

Effect of monomer structures on the formation of ternary covalent organic frameworks (Graduate School of Engineering, Osaka University) ○Enzo Okubo, Masashi Miura, Naoya Aizawa, Mitsuharu Suzuki, Ken-ichi Nakayama

Covalent organic frameworks (COFs) are porous crystalline compounds with high design flexibility; particularly, those constructed with three or more different types of monomers are attractive in their immense possibility for expanding structural and functional diversity. However, systematic investigation on the synthesis of multi-component COFs has been rather scarce so far. This work investigates the relationship between structures of monomers and products in the synthesis of 2-node-1-linker ternary COFs by employing differently sized nodes and linkers (Fig 1a). Our results show that ternary COFs are formed as expected in most cases, while mixtures of different COFs are formed in certain cases (Fig. 1b). This presentation will discuss the results based on the formation rate and structural defects of COFs that are both strongly dependent on the monomer structure.

**Keywords:** covalent organic frameworks; multi-component polymerization; X-ray diffraction

共有結合性有機構造体 (COF) は、高い設計自由度をもつ結晶性の多孔質化合物であり、特に3種類以上の異なるモノマーからなる多成分 COF では、きわめて多様な構造や物性が実現可能と考えられる。しかし、多成分 COF に関する系統的な合成検討の報告例は少なく<sup>1,2)</sup>、その自在な構築を実現するためにはさらなる知見の獲得が必要である。本研究では、組み合わせるモノマーの構造と生成する COF の組成や結晶性との相関を調査するため、2 ノード + 1 リンカー型の3成分 COF の形成について、異なるサイズのノード分子 (HHTTP, HH[12], HH[18]) とリンカー分子 (BDA, PyDA, BPDA, DPADA) を用いた検討を実施した (Fig. 1a)。その結果、モノマーの組み合わせによって、想定される3成分 COF が生成する場合と異なる COF の混合物が得られる場合とが確認された (Fig. 1b)。発表では、このような違いが生じる原因を、モノマーに対応した COF 形成速度の違いや COF 中の構造欠陥などの観点から考察する。



**Fig. 1** (a) Chemical structures of node and linker molecules employed in this work. (b) Examples of powder X-ray diffraction patterns of the products; HHTTP + HH[12] + PyDA, HHTTP + HH[18] + PyDA.

(1) Huang, N. et al. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12325. (2) Li, R. L. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 7081.