

MOFが拓く空間の化学： ダイナミクスから理解する MOF の吸着現象と機能材料の創製

MOFs Unlocking the Chemistry of Space: Understanding Adsorption through Dynamics and Designing Functional Materials

京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 (KUIAS-iCeMS)

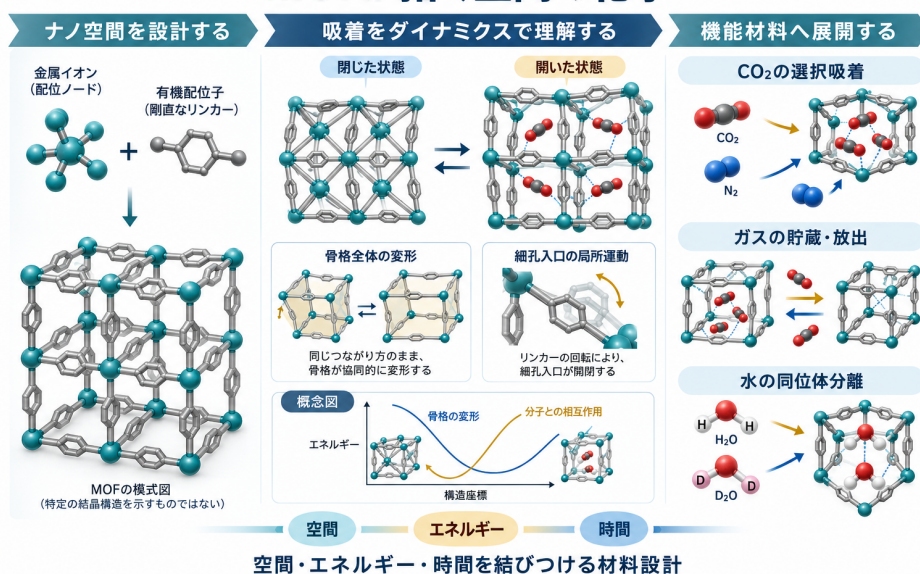
坂本 裕俊

金属イオンと有機配位子から構成される金属-有機構造体（MOF）は、ナノメートルスケールの空間を設計し、そこに取り込まれる分子の挙動を制御できる多孔性材料である。その特徴は、細孔の大きさや形状、化学的環境の多様性に加え、結晶性を保ちながら構造を変化させる柔軟性にある。分子の吸着に応じた骨格の変形や、細孔を構成する配位子の局所運動は、分子の取り込みや放出、拡散を左右する。MOF の吸着現象を理解し、その機能を引き出すには、空間の構造とともに、その時間的な変化を捉えることが重要となる。

本講演では、MOF における安定な吸着空間の創出から、柔軟な多孔性結晶「ソフトポーラスクリスタル」へと至る展開を概観し、骨格全体の協同的な構造変化と、細孔内の局所的な揺らぎという二つの視点から、吸着と機能の関係を議論する。吸着誘起構造転移に伴うゲート開閉や段階的な吸着挙動を、骨格の変形に必要なエネルギーと、分子との相互作用による安定化の観点から捉え、狭い圧力範囲でのガス貯蔵・放出や CO₂ の選択吸着につながる設計指針を紹介する。また、細孔入口の局所運動が分子の通過障壁を変調する機構に着目し、軽水と重水のように大きさや化学的性質が極めて近い分子種を、拡散挙動の違いによって識別する例を取り上げる。構造の揺らぎと分子運動の時間スケールの関係を通じて、動的な分子認識の可能性を考察する。

これらの事例を通して、空間・エネルギー・時間を結びつける「空間の化学」を描き出す。吸着量や選択性に加え、吸脱着速度や再生の容易さまでを見据えた MOF の設計を議論し、省エネルギー型の分離・貯蔵と資源循環に資する機能材料の創製を展望する。

MOFが拓く空間の化学



略歴 2003 年京都大学工学部卒業。2005 年同大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻修士課程修了。2010 年同博士課程修了、博士（工学）。2009 年 JST-ERATO 北川統合細孔プロジェクト研究補助員。2010 年 5 月信州大学エキゾチック・ナノカーボンの創成と応用プロジェクト拠点博士研究員、2012 年 11 月同助教。2014 年 1 月名古屋大学 大学院理学研究科 特任助教、JST-ERATO 伊丹分子ナノカーボンプロジェクトグループリーダー。2019 年 7 月同大学物質科学国際研究センター特任講師。2022 年 9 月京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 特定講師。2026 年 4 月より同拠点解析センター マテリアルズ解析ユニットリーダー。多孔性配位高分子の合成・機能開発、多孔性炭素材料のナノ空間特異現象、分子ナノカーボンのナノ空間機能、MOF の分子吸着過程の化学状態 3 次元可視化、低濃度 CO₂ を動的吸着する PCP の開発に従事。

