



## 〔PCP×構造〕

構造的視点による PCP/MOF の  
これまでと、これから

## MOF 結晶の単位構造設計から MOF 集合体の高次構造設計へ

松田亮太郎 Ryotaro MATSUDA

このたびは、2025年ノーベル化学賞を受章された北川進先生に心からお祝いを申し上げます。北川先生に師事し、大学教員・研究者として微力ながら公に尽くす道に進むことができたのは、幸運というにほかならない。本特集において、「PCP×構造」という題目で執筆の機会をいただいたので、この視点に基づき、用語やPCPの分類について簡単に解説するとともに、社会実装を見据えた高次構造体への展開についても述べる。

PCP (多孔性配位高分子) か  
MOF (金属有機構造体) か?

本特集の企画案には、「MOF, PCP いずれの用語を使うかは著者にお任せする」と記されていた。本稿ではまず、重要な背景があるが、もはや本質的な問題ではなくなったこの用語問題から解説する<sup>1)</sup>。

PCP/MOFの構造的要件は以下の3点である(図1)。

①錯体であること：金属イオンと有機分子が配位結合を介して構造を形成していること。②高分子であること：特定の錯体ユニットが連結した繰り返し構造を有し、不定で大きな分子量を有すること。③多孔性であること：外部から分子の出入りが可能な空間を内部に有すること。Porous Coordination Polymer (PCP) は上記の3つの構造的要件：すなわち、①Coordination：配位(錯体)、②Polymer：高分子、③Porous：多孔性、という物質を特徴づける構造概念的な用語である。一方、Metal-organic Framework (MOF) の語構成には①②③のいずれも含まず、その日本語訳の金属有機構造体に至っては、Frameworkの概念すらなく、「一体どんな物質か?」という不気味な用語である。また、Coordination Polymerは、100年以上も前の1916年から用いられ

まつだ・りょうたろう

名古屋大学大学院工学研究科応用物質化学専攻教授

〔経歴〕1996年帝塚山高校卒、2000年京都大学工学部卒、05年同大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻研究指導認定退学、博士(工学)。06年九州大学先端物質化学研究所助手、08年JST ERATO北川統合細孔プロジェクトGL、13年京都大学iCeMS特定准教授、15年より現職。14~18年JST さきがけ「超空間制御領域」研究員、22年JST COI-NEXT(変環共創拠点)プロジェクトリーダー。

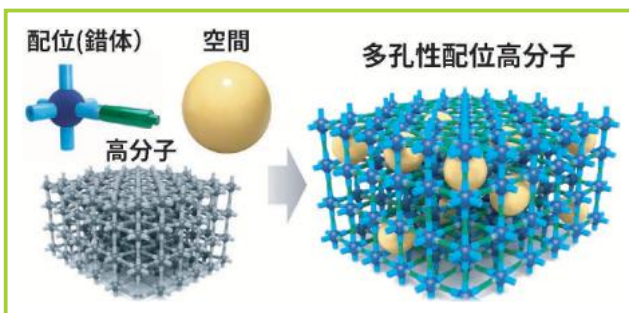


図1 3つの構造的要件を有するPCP/MOF

ている学術的用語とされる。そこにPorousの構造的要素を加えたPCPには学術用語としての品格が感じられるだろう。しかしながら、筆者が今でもPCPを信奉しているかということ、全く使っていない。品格よりもポップであることが優先される一般において、圧倒的に言いやすいMOFが広く使われていることに違和感はないし、ノーベル化学賞の公式表現として採用されたことにも異存はない。ただ、筆者自身がMOFを用いるのは単にポップで、言いやすいからというより、MOFが爆発的な発展を遂げ、それ自体が概念となり、語構成に意味を見いださずとも、「MOFとは何か」が広くイメージされるようになったからである。(ノーベル委員会ですら気にしていなかった) PCP/MOFの用語問題について、筆者もしばしば尋ねられるが、上述の私見と次の感想を答えている。『「PCP/MOFの黎明期から北川先生がPCPを用い、Yaghi先生がMOFを用いてきたのは、どこか日本的だし、アメリカ的です」と、そこに学術用語への向き合い方までを透けてみるのは、いささかステレオタイプに過ぎるかもしれないが、とても興味深いですね』。

## 黎明期から提唱されていた PCP/MOF の分類

さて、本題に移る。上述のとおり Coordination Polymer という概念は 100 年以上も前から存在していたが、1997 年の北川先生らによる最初のガス吸着を示す PCP の報告<sup>2)</sup>まで非常に長い時間を要した。それは、③の多孔性を構造的に実現する困難さに加え、そもそも「錯体による多孔質構造は安定に存在し得ない」という、先入観によるものだったと思われる。北川先生らは 1998 年の総説論文において、構造物性相関の観点から PCP を以下の 3 つに分類している<sup>3)</sup>。

第 1 世代：一見多孔質に見えるが、内部に含まれる合成溶媒などの分子を除去すると構造が崩壊するもの。

第 2 世代：空間内部の合成溶媒分子を除去しても骨格が維持され、ゼオライトのような分子吸脱着機能を示すもの。

第 3 世代：空間内部への分子の吸脱着に応じて骨格構造が柔軟に変化するもの。

これらの詳細はほかの解説記事に譲るが、特筆すべきは、第 2 世代の革新的な物質の発表からわずか 1 年後の時点で骨格構造が柔軟に変化する第 3 世代の概念を提唱し、それをたった 5 年後の 2003 年に実現した点である<sup>4)</sup>。空間構造が柔軟に変化することで実現されたゲート吸着は、科学的なパラダイムシフトを導いただけでなく、微小な圧力操作で分子の吸脱着を可能にする応用的側面からも大きな注目を集めている。北川先生は、新物質を発見する以上に新概念を創造し、発信することの重要性を説いており、実際この柔軟性 MOF の開拓もノーベル賞の受賞理由の 1 つとなっている。

## これからの PCP/MOF の構造設計

現在、報告されている MOF の種類は 10 万を超えるともいわれており、その高い構造の自由度と設計性は、十二分に示されてきた。多くの場合、吸着特性を骨格・空間構造から説明することが可能であるし、逆に骨格・空間構造から吸着特性を予測することもある。しかしながら、必ずしも吸着特性と骨格・空間構造が単純に対応するものではないことも明らかになってきた。例えば、同一の組成・結晶構造を有してい

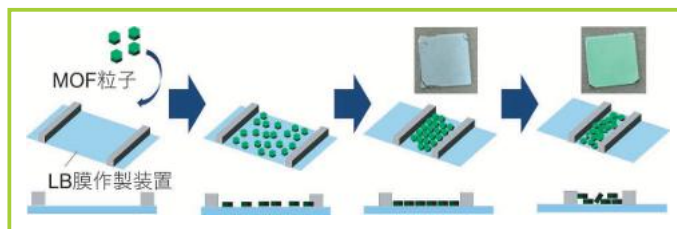


図2 MOF 粒子集合体：集合状態で構造応答性や光学特性が変わる

も、粒子のサイズや結晶欠陥の違いによって吸着特性が大きく異なることが報告されている。このことは、従来の「結晶の単位構造が吸着特性を決定する」という考えだけでは、MOF の本質的な理解が進まないということを示している。また、実用材料として MOF を用いる場合には、別の課題も存在する。MOF は小さな単結晶を少量を用いるのではなく、ある程度多くの量が必要であり、また粉体ではなく、それをペレットや膜などに成形する必要もある。MOF 成形体の吸着特性は、粒子間の界面における物質移動などが関わるため、MOF 結晶の外表面における界面現象を理解し、デザインすることも必要になる。筆者らは LB (Langmuir-Blodgett) 膜作製装置を用い、構造異方性のある第 3 世代型 MOF ナノ粒子を配列し、その集合体をシリコンおよびアルミナ基板上に転写することに成功している。この配列制御された MOF 集合体では、集合状態の違いによって、吸着に対する構造応答性などの物性が変化することを見だし、それが MOF 粒子間相互作用に起因することを明らかにした (図 2)<sup>5)</sup>。

このように、MOF 研究は発見から 30 年を経て、結晶の単位構造と吸着特性の相関に基づく物質や機能を開発する段階から、より大きな高次構造体を設計・構築し、機能開拓を行う段階へと進展している。今後、このような MOF の高次構造に関する研究が応用展開および社会実装を加速するものと期待される。

- 1) S. R. Batten, N. R. Champness, X.-M. Chen, J. G.-Martinez, S. Kitagawa, L. Öhrström, M. O'Keeffe, M. P. Suh, J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.* **2013**, *85*, 1715.
- 2) M. Kondo, T. Yoshitomi, H. Matsuzaka, S. Kitagawa, K. Seki, *Angew. Chem., Int. Ed.* **1997**, *36*, 1725.
- 3) S. Kitagawa, M. Kondo, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1998**, *71*, 1739.
- 4) R. Kitaura, K. Seki, G. Akiyama, S. Kitagawa, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2003**, *42*, 428.
- 5) K. Negita, S. Kusaka, H. Iguchi, K. Yano, S. Shin, R. Matsuda, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 26184.

© 2026 The Chemical Society of Japan