



多孔性分子結晶の構造解析

張 中岳¹, 山本 祥平², Yan Dongwan²

¹名古屋大学物質科学国際研究センター, ²名古屋大学理学部化学科

キーワード：金属有機構造体, 粉末 X 線回折, 構造解析

1. 背景と研究目的

Metal-Organic Frameworks (MOFs) は、多孔性でありながら様々な機能を発現できる物質群として大変注目を集めている¹。MOF においてもそれらの物性は結晶構造に大きく依存しているが、単結晶構造解析に適用可能な大きさの MOF の単結晶を得ることは困難な場合も多い。そのような場合には、高分解能の粉末 X 線回折パターンを用いた構造解析手法がよく用いられている。

本実験においては、我々の合成した 11 種類の MOF について粉末 X 線回折測定を行い、構造解析を試みた。

2. 実験内容

ビームライン BL5S2 にて、11 種類の MOF の結晶性粉末の X 線回折測定を行った。測定試料は carboxylate を配位部位とする MOF 7 種 (Zr-ADC-1, Zr-ADC-2, Ti-BDC, Ti-BTB, Ti-ABDC, Ti-BPDC and Ti-ABDC) および triptycene 誘導体からなる MOF 4 種 (Ni-Trip-H, Ni-Trip-Me, Co-Trip-Me and Cu-Trip-Me) を測定した。なお、試料はすべて外径 0.3 mm のガラスキャピラリーに充填し、12.4 keV の放射光にて測定を行った。

3. 結果および考察

すべての試料において、実験室での Cu K α を線源として用いた予備測定に比べ、シンクロトロン光によって強い回折ピークを得ることができた。特に、トリプチセン誘導体からなる MOF については、 $2\theta < 5^\circ$ において新たなピークを観測することができ、これはシンクロトロン光で可能な透過法測定により得られたものである (図 1)。

なお、現在は本実験により得られた解析パターンの指数付けを行い、構造解析に取り組んでいる。

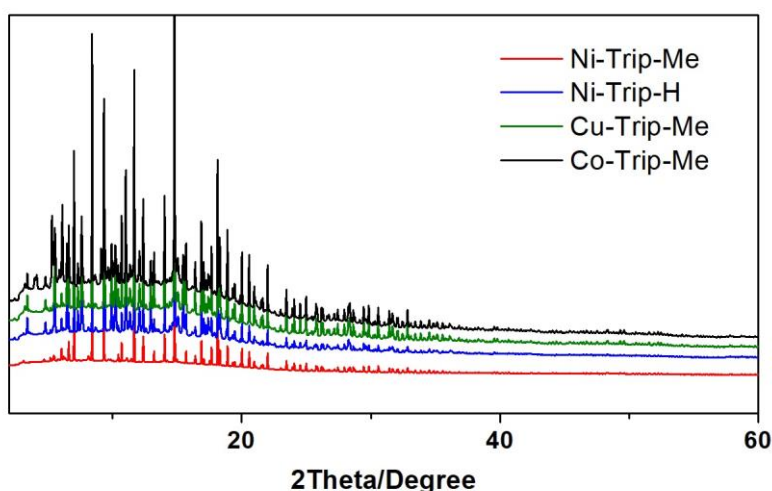


図 1 トリプチセン誘導体 MOF の PXRD パターン

4. 参考文献

1. Introduction to Metal-Organic Frameworks, H. C. Zhou, J. R. Long, O. Yaghi, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 673-674.