



多孔性分子結晶の構造解析

山本祥平¹, 張中岳²

1 名古屋大学理学部, 2 名古屋大学物質科学国際研究センター

キーワード：金属有機構造体(MOF), ポーラス結晶

1. 背景と研究目的

金属有機構造体(Metal-Organic Framework, MOF) は金属イオンと有機配位子が相互作用することで形成される多孔性物質で、金属イオンと配位子を変えることで興味深い性質が現れ、機能性材料として様々な研究がなされている。最近、我々は新しいレドックス活性配位子であるヘキサヒドロキシトリプチセンを設計し、それをを用いて機能性金属有機構造体を開発した。ほとんどの場合、これらの MOF の結晶サイズは非常に小さいので、それらの構造を決定するためにシンクロトロン光を用いた単結晶 X 線回折実験を行った。

2. 実験内容

3 つの MOF、Ni-TripMe、Co-TripMe および Cu-TripH の単結晶を持ち込み、BL2S1 にて X 線回折実験を行った。波長 0.75 Å の放射光を用いて、-150 ° C で回折データの収集を行った。

3. 結果および考察

Ni-TripMe と Co-TripMe の結晶構造を、単結晶回折データにより得ることができた。2 つの化合物は、Fig.1 に示されるのと同じ結晶構造を有する。2 つの MOF の結晶学的データを Table 1 に列挙する。高品質の結晶データから正確な C-O 結合長を求めることができ、トリプチセン配位子の酸化状態も明らかにできた。これにより MOF 構造中に水素結合と有機ラジカルの存在が確認された。

Table 1.

	Ni	Co
Space group	Pbcn	Pbcn
<i>a</i>	36.963	36.933
<i>b</i>	18.291	18.153
<i>c</i>	9.319	9.424
R1	0.0622	0.0771
wR2	0.1884	0.2427
GoF	1.048	1.067

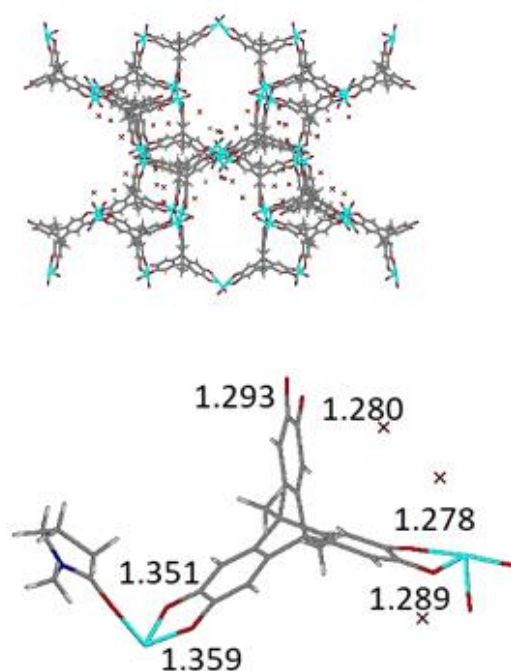


Fig.1 Ni-TripMe と Co-TripMe の結晶構造