



金属有機構造体結晶の構造解析

張中岳

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，酸化状態，配位環境

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を設計し、それ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

4つの MOF、Zr-TBC、Zr-ZOC、Cu-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

Zr-TBC および Zr-ZOC の場合、解像度が十分でなく、結晶構造を解くことができなかった。Cu-TripH および Cu-TripMe の場合、データ品質は良好であり、それらの結晶構造は決定された。Cu-TripH と Cu-TripMe はどちらも、2次元の層状のハニカム構造を持っていた。Cu-TripH と Cu-TripMe の両方のスタッキングモチーフは ABAB スタッキングで、興味深いことに、Cu-TripH には厳密に階層化された 2D スタッキングモチーフがあり、Cu-TripMe には織り交ぜられた 2D スタッキングモチーフがある。両方の MOF で、層間相互作用は Cu(catechol)₂ 構造間の水素結合であった。Cu-Trip と Cu-TripMe の空間群は、それぞれ Fmm2 と I222 で、この空間群は、Cu-TripH の潜在的な強誘電挙動を示唆している。

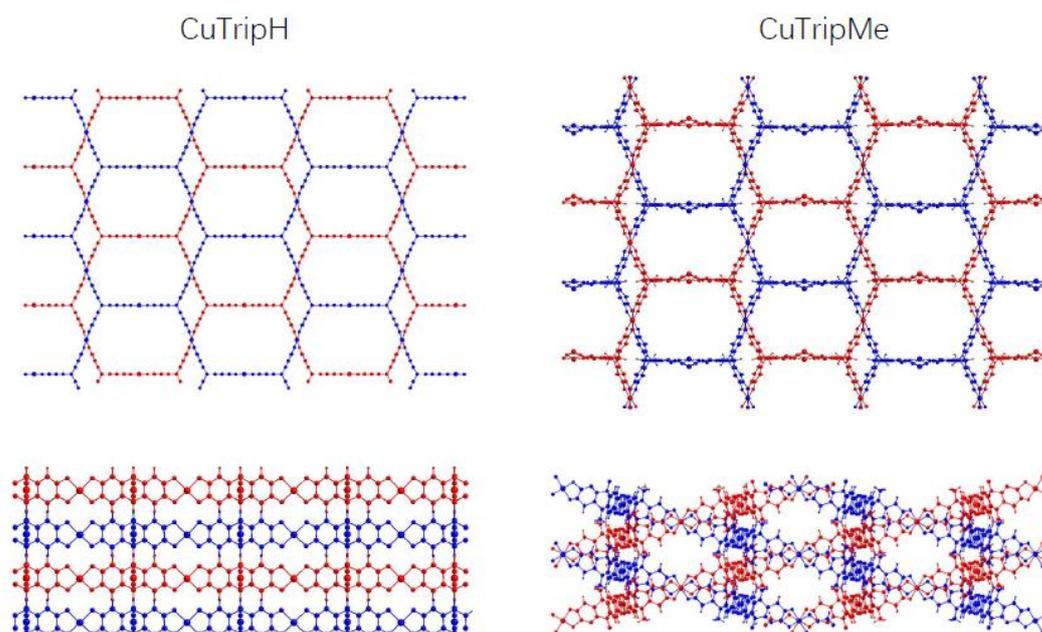


Fig.1 CuTripH と CuTripMe の結晶構造