



# 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

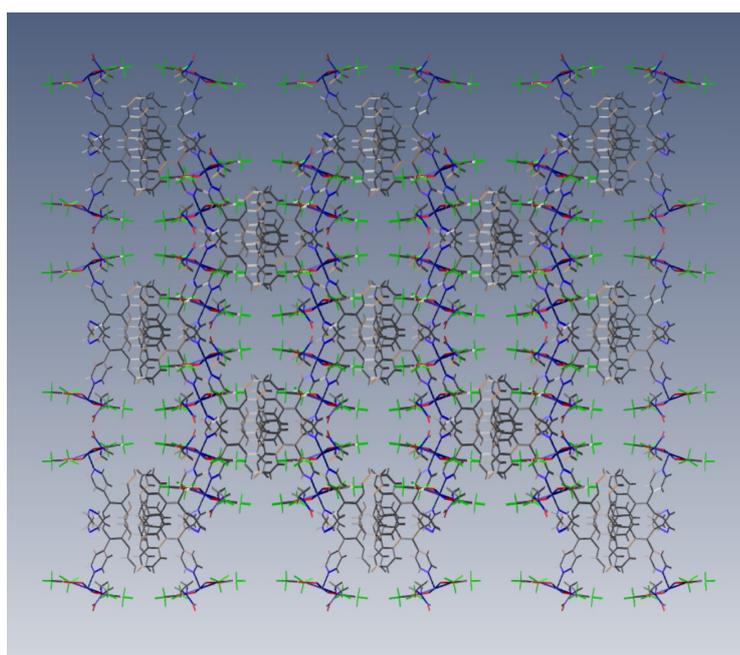
3つの MOF、Cu-TripH、 $\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC})$ 、 $\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC-2H})$ の単結晶を持ち込み、BL2S1にて X 線回折実験を行った。波長 0.75 Å の放射光を用いて、 $-150^\circ\text{C}$ ( $\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC})$ )、 $\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC-2H})$ と室温(Cu-TripH)で回折データの収集を行った。

## 3. 結果および考察

$\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC-2H})$ の場合、解像度が十分でなく、結晶構造を解くことができませんでした。

Cu-TripH の場合、データ品質は良好であり、結晶構造は決定された。低温、室温での構造と比較すると、Cu-TripH MOF は同じハニカム結晶構造のままですが、空間群が  $Fm\bar{3}m$  から  $Cmcm$  に変化され、対称性が低下している。低温でのユニットセルパラメータは 23.520、35.755、9.696 であり、高温でのユニットセルパラメータは 35.924、23.415、9.711 です。

$\{\text{Cu}(\text{hfac})_2\}_2(\text{tpyBC})$ の結晶構造も解明されている。(図 1)



Unit Cell:

Space group:  $C2/c$

$a=27.234$

$b=21.929$

$c=14.296$

$\alpha = 90$

$\beta = 96.18$

$\gamma = 90$

$R1=8.42$

$wR2=25.04$

$\text{GooF}=1.038$

図 1