



多孔性分子結晶の構造解析

張 中岳¹, 三角 勇気²

1 名古屋大学物質科学国際研究センター, 2 名古屋大学大学院理学研究科

キーワード : MOF, ポーラス結晶

1. 背景と研究目的

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。その中でも、広がった π 共役系を持ち、一般的な MOF よりも高い伝導度を示す導電性 2 次元 (2D) MOF が、近年関心を集めている^[1]。導電性 2D MOF の中でも配位子にトリフェニレン誘導体を用いた M-CAT-1 (M = Co, Ni, Cu) が知られているが^[2]、Cu-CAT-1 については厳密な構造が明らかにされていない。そこで本実験による粉末 X 線回折測定により構造を明らかにすることを試みた。また、M-CAT-1 とは配位子のヘテロ原子のみが異なる MOF である Ni₃(HITP)₂ と^[3]、配位子にトリプチセン誘導体を用いた新奇の MOF である M-Trip-R についても同様の実験を行い、構造解析を試みた。

2. 実験内容

ビームライン BL5S2 において Cu-CAT-1、Ni₃(HITP)₂、M-Trip-R の各サンプルに対して粉末 X 線回折測定を行った。波長が 1 Å の放射光を用いて室温で行った。

3. 結果および考察

Fig. 1. に今回で得られた測定結果の一部を示した。Cu-CAT-1 のデータを文献 2 にある回折パターンと照らし合わせたところ、ピーク位置は一致したものの、文献 2 のデータとは異なり、ピークの分裂が確認できた。Ni₃(HITP)₂ は Cu-CAT-1 と同じ構造を持つことが知られているため、Cu-CAT-1 とピーク位置が一致すると予想されたが、今回の測定では一致しなかった。サンプルが酸化されてしまい変質したことによりピークの位置が変わってしまった可能性が考えられるため、今後、合成過程や後処理の過程を再検討し、最適な条件を探索する予定である。M-Trip-R の MOF に関しては、今回得られた測定結果を用いて、Rietveld 法を用いた構造解析を行う予定である。

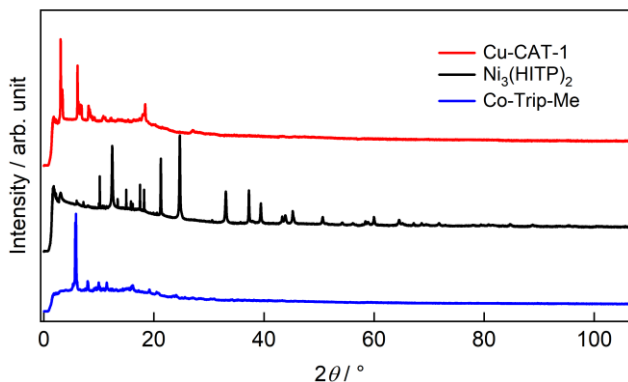


Fig. 1. PXRD patterns of Cu-CAT-1, Ni₃(HITP)₂, and Co-Trip-Me

4. 参考文献

1. Sun, L.; et al. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2016**, *55*, 3566.
2. Hmadeh, M.; et al., *Chem. Mater.* **2012**, *24* (18), 3511.
3. Dennis, S.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 8859.