

有機結晶の気体吸着状態についての理論的解析  
Theoretical analysis of the gas sorption state of organic crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 人間・環境学専攻 物質科学講座  
津江広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に広く適用可能なため、古くから研究されており、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N末端とC末端の両方を保護した化合物 **1** (図1) の単結晶が、CO<sub>2</sub>を高選択的に吸着することが判明している。

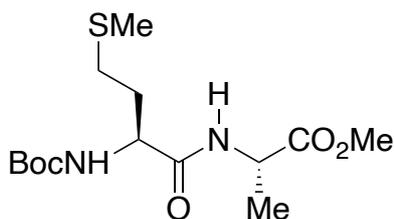


図1 **1** の分子構造

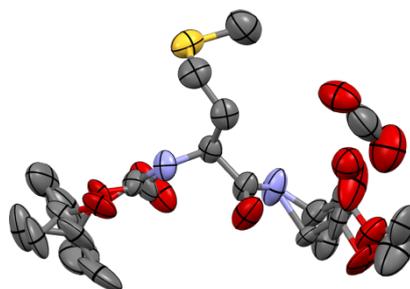


図2 **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態の OTREP 図

**1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態の結晶構造については、既に-173 °Cで解析済みであったが、本研究では、新たに-85 °Cでの解析を行った。また、結晶中において**1**とCO<sub>2</sub>との間に働く分子間相互作用を計算化学により解析した。ここでは、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

単結晶X線構造解析の結果、-85 °Cにおいても **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態を原子レベルで可視化することに成功した(図2)。結晶中において **1** と CO<sub>2</sub> との間には有意な原子接触が見られた。そこで、計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて、CO<sub>2</sub> 吸着状態の原子座標を用いて結晶構造の構造最適化を行った後、Gaussian 16 を用いて二次の摂動法による *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い、**1** と CO<sub>2</sub> との間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果、-173 °Cの場合と同じく、-85 °Cにおいても、両者の間に働く主要な分子間相互作用は分散力であり、**1** による高選択的なCO<sub>2</sub>の吸着挙動は、同相互作用によって発現していることが分かった。