

フレームワーク型金属錯体分子結晶の創成

Fabrication of framework-type metal complex molecular crystals

京都大学 高等研究院物質—細胞統合システム拠点 古川 修平

研究成果概要

本研究では、ロジウム二核パドルウィール錯体、銅二核パドルウィール錯体を基本骨格に有する金属錯体多面体 (metal-organic polyhedra, MOP) の合成を行った。この MOP 分子を原料とし、分子間に空隙が発現するように結晶化させることで、フレームワーク型分子結晶を合成した。

具体的には、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、フレームワーク型分子結晶中における分子間相互作用を詳細に解析した。本研究で得られた MOP の単結晶 X 線構造解析の結果に対し、密度汎関数法を用いた計算化学的な解析を施すことで、MOP 分子間に働く相互作用を①交換反発、②静電相互作用、③誘起相互作用、④分散相互作用の4成分に分けて定量化した。相互作用エネルギーの内訳から、MOP 分子が分子間に空隙を発現しながら結晶化するメカニズムを議論した。なお、本研究で行った計算化学的解析はすべて京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに既に導入されている計算パッケージ「Q-Chem」を用いて行った。

本研究における MOP 分子結晶の合成・解析は現在も進行中である。次年度以降は多様な構造の MOP 分子をさらに合成し、これらの分子結晶について分子間相互作用の詳細な解析を行うことで、フレームワーク型分子結晶を狙って合成するための一般的な分子設計手法を開発する予定である。以上の研究成果を踏まえ、次年度中に原著論文を国際誌に投稿予定である。