

気体吸着状態の結晶構造解析を簡便化する新規結晶マウントの独自開発  
De novo design and development of a novel crystal mount for facilitating crystallographic  
analysis of gas sorption state

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

現在、ケンブリッジ結晶構造データベースには 130 万を超える有機化合物と有機金属化合物の結晶構造が登録されており、その中には気体吸着状態の結晶構造も含まれている。しかし、気体吸着状態の結晶構造解析を行う上で必須となるサンプルの調製方法は、ノウハウの塊となっているのが現状である。そこで本研究では、気体吸着状態の結晶構造解析を簡便に行えるようにすることを目的として、新規の結晶マウント(NCM)を独自に設計し、その開発を行った。また、NCM を用いてジペプチド誘導体 **1**(図1)の CO<sub>2</sub> 吸着状態を明らかにするとともに、計算化学を用いて **1** と CO<sub>2</sub> との分子間相互作用の解析を行った。

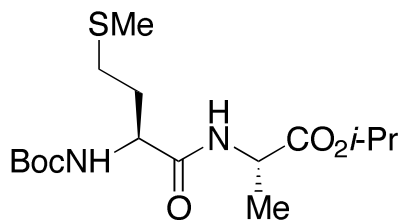


図1 **1** の分子構造

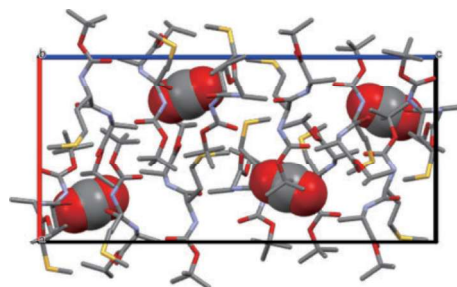


図2 **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態

NCM と **1** の単結晶を用いて、1気圧の CO<sub>2</sub> 雰囲気下かつ-78 °Cでの結晶構造解析を行った結果、**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)。次いで、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを用いて、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。Materials Studio を用いて **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態の結晶構造を構造最適化した後、Gaussian 16を用いて二次の摂動法による ab initio 計算を行うとともに、Orient を用いてエネルギー分割計算を行った。その結果、**1** と CO<sub>2</sub> との間には主として分散力と静電力が働いており、**1** の単結晶が示す高選択的な CO<sub>2</sub> 吸着挙動は、これらの分子間相互作用によって発現していることが明らかとなった。

発表論文(謝辞あり)

Yamanaka, K.; Moritake, M.; Takahashi, H.; Tsue, H. *Cryst. Growth Des.* **2024**, *24*, 9433–9439.